Серия «Синергетика: от прошлого к будущему»

Ю. Л. Климонтович

ТУРБУЛЕНТНОЕ ДВИЖЕНИЕ И СТРУКТУРА ХАОСА

Новый подход к статистической теории открытых систем

Предисловие
доктора физико-математических наук,
профессора
Г. Г. Малинецкого

Издание второе

МОСКВА

URSS

ББК 22.317 22.318

Климонтович Юрий Львович

Турбулентное движение и структура хаоса: Новый подход к статистической теории открытых систем / Предисл. Г. Г. Малинецкого. Изд. 2-е.
М.: КомКнига, 2007. — 328 с. (Синергетика: от прошлого к будущему.)

В настоящей книге изложены идеи и методы статистической теории открытых систем. Автор рассматривает следующие основные проблемы: критерии относительной степени упорядоченности сложных движений; связь динамического и статистического описания, роль динамической неустойчивости движения в статистической теории; ансамбль Гиббса для неравновесных процессов, переход от обратимых уравнений динамики к необратимым уравнениям, флуктуационно-диссипационные соотношения; молекулярные и турбулентные источники флуктуаций в открытых системах; турбулентное движение и диссипативные структуры.

Книга предназначена для физиков, биофизиков, химиков, экономистов и философов, а также аспирантов и студентов, использующих статистическую теорию открытых систем, в частности, теорию турбулентности и самоорганизации.

Рецензент:
доктор физико-математических наук *А. С. Бакай*

Издательство «КомКнига». 117312, г. Москва, пр-т 60-летия Октября, 9.
Формат 60×90/16. Бумага типографская. Печ. л. 20,5. Зак. №653.

Отпечатано в ООО «ЛЕНАНД». 117312, г. Москва, пр-т 60-летия Октября, д. 11А, стр. 11.

13-значный ISBN, вводимый с 2007 г.:
ISBN 978–5–484–00899–5
Соотв. 10-значный ISBN, применяемый до 2007 г.:
ISBN 5–484–00899–9

© КомКнига, 2007

НАУЧНАЯ И УЧЕБНАЯ ЛИТЕРАТУРА
E-mail: URSS@URSS.ru
Каталог изданий в Интернете:
http://URSS.ru
Тел./факс: 7 (495) 135–42–16
URSS Тел./факс: 7 (495) 135–42–46

4073 ID 38289
9 785484 005895 >

ОТ РЕДАКЦИИ

Издательство URSS продолжает новую серию книг «Синергетика: от прошлого к будущему».

Синергетика, или теория самоорганизации, сегодня представляется одним из наиболее популярных и перспективных междисциплинарных подходов. Термин синергетика в переводе с греческого означает «совместное действие». Введя его, Герман Хакен вкладывал в него два смысла. Первый — теория возникновения новых свойств у целого, состоящего из взаимодействующих объектов. Второй — подход, требующий для своей разработки сотрудничества специалистов из разных областей.

Но это привело и к замечательному обратному эффекту — синергетика начала оказывать все большее влияние на разные сферы деятельности и вызывать все больший интерес. Сейчас этим подходом интересуются очень многие — от студентов до политиков, от менеджеров до активно работающих исследователей.

Синергетика прошла большой путь. Тридцать лет назад на нее смотрели как на забаву физиков-теоретиков, увидевших сходство в описании многих нелинейных явлений. Двадцать лет назад, благодаря ее концепциям, методам, представлениям, были экспериментально обнаружены многие замечательные явления в физике, химии, биологии, гидродинамике. Сейчас этот междисциплинарный подход все шире используется в стратегическом планировании, при анализе исторических альтернатив, в поиске путей решения глобальных проблем, вставших перед человечеством.

Название серии «Синергетика: от прошлого к будущему» тоже содержательно. Как говорил один из создателей квантовой механики, при рождении каждая область обычно богаче идеями, чем в период зрелости. Видимо, не является исключением и синергетика. Поэтому мы предполагаем переиздать часть «синергетической классики», сделав акцент на тех возможностях и подходах, которые пока используются не в полной мере. При этом мы надеемся

познакомить читателя и с рядом интересных работ, ранее не издававшихся на русском языке.

«Настоящее» — как важнейший элемент серии — тоже понятно. В эпоху информационного шума и перманентного написания то заявок на гранты, то отчетов по ним, даже классики синергетики очень немного знают о последних работах коллег и новых приложениях. Мы постараемся восполнить этот пробел, представив в серии исследования, которые проводятся в ведущих научных центрах страны.

«Будущее...» — это самое важное. От того, насколько ясно мы его представляем, зависят наши сегодняшние усилия и научная стратегия. Прогнозы — дело неблагодарное, — хотя и совершенно необходимое. Поэтому ряд книг серии мы надеемся посвятить и им.

В редакционную коллегию нашей серии любезно согласились войти многие ведущие специалисты в области синергетики и нелинейной динамики. В них не следует видеть «свадебных генералов». В их задачу входит анализ развития нелинейной динамики в целом и ее отдельных областей, определение приоритетов нашей серии и подготовка предложений по изданию конкретных работ. Поэтому мы указываем в книгах серии не только организации, в которых работают эти исследователи, но и важнейшие области их научных интересов.

И, конечно, мы надеемся на диалог с читателями. При создании междисциплинарных подходов он особенно важен. Итак, вперед — в будущее.

В нашей серии уже вышло более двух десятков книг общим тиражом более сорока тысяч экземпляров. Серия начала издаваться на испанском языке. Однако мы уверены, что и самые глубокие проблемы синергетики, и самые интересные книги серии впереди.

Редакционная коллегия серии «Синергетика: от прошлого к будущему»

Председатель редколлегии:

Г. Г. Малинецкий, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (сложность, хаос, прогноз).

Члены редколлегии:

Р. Г. Баранцев, Санкт-Петербургский государственный университет (асимптотология, семиодинамика, философия естествознания).

А. В. Гусев, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (вычислительная гидродинамика, технологии, медицина).

А. С. Дмитриев, Институт радиоэлектроники РАН (динамический хаос, защита информации, телекоммуникации).

В. П. Дымников, Институт вычислительной математики РАН (физика атмосферы и океана, аттракторы большой размерности).

С. А. Кащенко, Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова (асимптотический анализ нелинейных систем, образование, инновации).

И. В. Кузнецов, Международный институт теории прогноза землетрясений и математической геофизики РАН (анализ временных рядов, вычислительная сейсмология, клеточные автоматы).

А. Ю. Лоскутов, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова (эргодическая теория, биллиарды, фракталы).

И. Г. Поспелов, Вычислительный центр им. А. А. Дородницина РАН (развивающиеся системы, математическая экономика).

Ю. Д. Третьяков, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова (наука о материалах и наноструктуры)

Д. И. Трубецков, Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского (теория колебаний и волн, электроника, преподавание синергетики).

Д. С. Чернавский, Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН (биофизика, экономика, информация).

Наш электронный адрес — synergy@keldysh.ru

ПОСЛЕДНИЙ ПРОЦЕНТ

Книга, которую вы держите в руках, написана выдающимся физиком-теоретиком, специалистом по статистической физике и термодинамике, работы которого получили мировое признание, Юрием Львовичем Климонтовичем.

Мне посчастливилось много раз слушать доклады и выступления Ю. Л. Климонтовича, обсуждать с ним разные задачи теории самоорганизации. Обычно это происходило на Московском семинаре по синергетике на физическом факультете МГУ. Одним из руководителей этого семинара в течение многих лет был Юрий Львович. Первое ощущение от общения с ним — доброжелательность, увлеченность наукой, глубина. Дальнейшее общение убеждало, что эти качества присущи ему в превосходной степени.

Есть много путей в синергетику и много взглядов на нее. Взгляд Юрия Львовича был связан со статистической физикой. Оглядываясь назад, можно сказать, что на физическом факультете МГУ был своеобразный культ статистической физики. И умудренные жизнью старшекурсники снисходительно объясняли «первокурам», как нелегко будет сдать «кванты» и «статы». Судя по рассказам старых профессоров и мемуарам, начало этой традиции было положено профессором физфака А. А. Власовым (тем самым, который предложил уравнение Власова, ставшее классическим и вошедшее почти во все учебники физики плазмы) и дискуссией вокруг его работ, развернутой академиками-физиками.

Одной из самых популярных кафедр физфака в течение многих лет, да насколько я знаю и теперь, является кафедра квантовой статистики. Многие лекторы, излагавшие этот сложный раздел теоретической физики, читали его как «поэму в прозе». Таков был, к примеру, курс профессора И. А. Квасникова, который мне

довелось слушать[1], отличавшийся кристальной ясностью, удивительной четкостью, последовательностью, гармоничностью. Одним из блестящих продолжателей традиции физфаковской статистической физики был и Юрий Львович.

Работы Больцмана, Максвелла, Гиббса по статистической механике продвинули эту область физики далеко вперед. Принято сетовать на трудность работы в областях, где нет парадигмы, где многое приходится создавать «с чистого листа». Но свои трудности есть и там, где уровень очень высок! В этих областях происходит своеобразный отбор исследователей, способных и воспринять огромный накопленный потенциал, и переосмыслить его, и двинуться вперед. К таким ученым, безусловно, относился Юрий Львович.

Обычно он подводил итоги обсуждения доклада, прозвучавшего на семинаре. Это оставляло огромное впечатление. Оказывалось обычно, что проблемы, рассмотренные докладчиком, уже ставились и решались в статистической физике. Иногда их рассматривали с тех же, а иногда с других позиций. И то, и другое бывало очень интересно и поучительно.

Неудивительно, что при таком «научном обаянии» у Юрия Львовича было много учеников и очень высокий авторитет. Его исследования высоко ценили немецкие коллеги и, в частности, один из создателей синергетики Герман Хакен. Его учеником является Вернер Эбелинг, с книгами и многократными выступлениями которого во многом связано распространение синергетических идей в нашей стране.

Многие классические труды строятся как попытка ответить на один очень простой, на первый взгляд, вопрос. Так геометрия Евклида строится как теория, призванная выяснить, каковы выпуклые многогранники с равными сторонами и углами и сколько их. Удивительный результат — теория Платоновых тел — убеждал современников Евклида, да и современных математиков, в красоте и гармонии мироздания. Центром этой книги являются два вопроса. Что такое самоорганизация? Какое движение более упорядоченно — ламинарное или турбулентное?

Естественно, отвечая на них, Юрий Львович предлагает взглянуть на эти проблемы с вершины статистической физики. Глубина и оригинальность ответов на эти вопросы, предлагаемая автором, думаю, не оставит равнодушными многих физиков и математиков, начиная со старшекурсников и кончая профессорами.

---

[1] *Квасников И. А.* Термодинамика и статистическая физика: В 4 т. Т. 4. Квантовая статистика. М.: URSS, 2005. (Серия «Классический университетский учебник».)

В свое время академик Яков Борисович Зельдович, возглавляя отдел астрофизики Института прикладной математики, любил на своих семинарах примерно так говорить о науке: «Трудно в каждой области осваиваются первые 10 %, заниматься следующими 80 % — одно удовольствие, оставшиеся 9 % идут тяжело, а когда вы дошли до последнего 1 %, то надо менять область!» Мне кажется, Юрий Львович относился к исследователям, которых волновал этот самый трудный и волнующий последний процент. И, как показывает эта книга, этот процент заслуживает и огромного труда, и вдохновения, и радости прикосновения к тайнам природы.

Председатель редколлегии серии
«Синергетика: от прошлого к будущему»
Г. Г. Малинецкий

Памяти
Льва Николаевича Климонтовича
и Иосифа-Ивана-Петра Альбиновича Маевского
посвящается эта книга

ПРЕДИСЛОВИЕ

Поясним прежде всего название книги. Подзаголовок объединяет три ключевых понятия: «открытые системы», «статистическая теория», «новый подход».

Открытые системы в отличие от идеализированных замкнутых (изолированных) систем могут обмениваться с окружающими телами как энергией и веществом, так и информацией. Благодаря этому в открытых системах возможны, в частности, и процессы самоорганизации, в результате которых возникают более сложные и одновременно более совершенные структуры.

Все рассматриваемые в книге открытые системы являются макроскопическими, т. е. состоят из очень большого числа объектов, принимаемых за «элементарные». Их роль могут играть атомы и молекулы в физике и химии, клетки и микроскопические живые существа в биологии, высокоорганизованные организмы в социологии, планеты и звезды в астрономии. Таким образом, спектр открытых систем чрезвычайно широк. В силу макроскопичности рассматриваемых открытых систем, а также в силу возможной динамической неустойчивости движения отдельных «элементарных» объектов (элементов) и неполной контролируемости внешних условий, достаточно полное и адекватное описание открытых систем в подавляющем числе случаев может быть проведено лишь на основе статистической теории.

В слова «новый подход» вкладывается двойной смысл. Во-первых, многие идеи и методы описания неравновесных процессов являются либо относительно новыми, либо получили существенное развитие в недавнее время. Во-вторых, существенно и другое. Движения и процессы в макроскопических открытых системах настолько сложны, что в настоящее время лишь сравнительно немногое можно изложить с достаточной полнотой и последовательностью. Во многих случаях при выборе новых способов анализа экспериментальных данных и математических моделей рассматриваемых процессов приходится в большой мере полагаться на физическую интуицию.

Поднимемся теперь на «ступеньку» выше — поясним основной заголовок.

Понятия «ламинарное» и «турбулентное» движения (течения) возникли в гидродинамике. С тех пор эти понятия, однако, существенно расширились, и ламинарное и турбулентное движения рассматриваются на всех уровнях описания неравновесных процессов в открытых системах от кинетического до реакционно-диффузионного. При этом во всех случаях одной из основных характерных черт турбулентного движения является наличие большого числа развитых макроскопических степеней свободы. По этой причине турбулентное движение является чрезвычайно сложным и его поведение непредсказуемым.

Во многих случаях необходима оценка относительной степени упорядоченности ламинарных и турбулентных, а также различных турбулентных движений между собой. Без такой оценки невозможно, например, выявление наличия процесса самоорганизации при переходе от одного турбулентного движения к другому. До последнего времени доминирующей, и кажущейся почти очевидной, была точка зрения, согласно которой турбулентное движение является более хаотическим, чем ламинарное. В книге рассматривается и другая точка зрения, согласно которой турбулентное движение — «турбулентная жизнь» открытых систем может быть более богатой и более высокоорга-

низованной. В этой связи и возникает проблема выявления «структуры хаоса».

Раскрытие приведенных понятий приводит к необходимости решения целого ряда связанных в единый узел проблем: связь динамического и статистического описания сложных движений; конструктивная роль динамической неустойчивости движения отдельных элементов системы при переходе от уравнений движения к необратимым уравнениям для макроскопических характеристик; конкретизация определения ансамбля Гиббса при описании неравновесных процессов; формулировка и сравнительный анализ различных критериев относительной степени упорядоченности неравновесных состояний, критериев самоорганизации.

Книга в значительной мере представляет итог многолетних исследований автора по различным вопросам статистической теории неравновесных процессов в различных системах. Главное внимание здесь уделяется не деталям расчетов, а изложению основных идей и методов современной статистической теории открытых систем на различных уровнях описания. Такое построение книги делает ее более доступной широкому кругу специалистов самого различного профиля. Той же цели служит и большое число относительно простых примеров, иллюстрирующих общие положения теории. Естественно, что изложение не является исчерпывающим. В книге не рассматриваются многие прикладные направления теории открытых систем. Они лишь кратко отмечаются в Заключении. Широта приложений современной теории открытых систем иллюстрируется довольно обширным списком литературы, приведенным в конце книги.

Естественно, что в процессе работы над книгой многие вопросы неоднократно обсуждались с разными специалистами. Некоторые из них с самого начала принимали и поддерживали «нестандартные» идеи и результаты, а другие, напротив, были настроены скептически. Автор в равной мере благодарен и тем и другим, поскольку любая критика является, в конечном счете, стимулирующей.

Она позволяет легче выявить слабые места в изложении и сделать аргументацию более убедительной. Надеюсь, что и дальнейшая критика будет служить пользе дела.

В определенной мере книга является междисциплинарным учебным пособием по основам современной статистической теории открытых систем. Многое в ней будет доступно и понятно не только физикам, химикам и биофизикам, но и экономистам и философам. Во всяком случае автор надеется, что дело будет обстоять именно так.

Если мы закроем дверь перед заблуждением, то как же тогда войдет Истина?

Р. Тагор

Введение

ОСНОВНЫЕ ПРОБЛЕМЫ

Цель книги — изложение основных идей, методов и закономерностей современной статистической теории макроскопических открытых систем. Такие системы могут обмениваться с окружающими телами как энергией, так и веществом. В них в силу этого возможно образование различных структур, возможны процессы самоорганизации.

Макроскопические открытые системы в физике, химии и биологии, а также и в социологии являются, как правило, чрезвычайно сложными. Их сложность обусловлена рядом факторов. Прежде всего тем, что они будучи макроскопическими состоят из многих объектов, принимаемых за элементы строения. В зависимости от рассматриваемой системы и принятого уровня описания составляющие рассматриваемую систему «элементарные» объекты могут быть как микроскопическими (например, атомы и молекулы в различных средах), так и макроскопическими (макромолекулы в химии и биологии, «элементарные» объекты в социологии).

Процессы самоорганизации занимают особое место среди разнообразных процессов в открытых системах. Они возможны лишь в нелинейных системах, так как только в них существуют разнообразные и сложные движения, необходимые для возникновения и развития процессов самоорганизации.

Существенно также, что процессы самоорганизации происходят только в диссипативных системах. Это кажется, на первый взгляд, удивительным, так как диссипация проявляется обычно в затухании движения, в рассеянии энергии, в потере информации. Однако диссипация играет в процессах самоорганизации и конструктивную роль.

Без ее участия невозможно образование устойчивых пространственно-временных структур, последовательности которых и составляют процесс самоорганизации. Чтобы подчеркнуть это обстоятельство, И. Пригожин ввел емкое и точное название «диссипативные структуры».

В макроскопических открытых системах, которые будут рассматриваться, имеются широчайшие возможности для возникновения коллективных (кооперативных) явлений. С целью подчеркнуть роль коллектива, роль кооперации в процессах самоорганизации Г. Хакен ввел специальный термин «синергетика». Синергетика не является новой наукой, но может быть определена как новое объединяющее направление в науке. Цель синергетики — выявление общих идей, общих методов и общих закономерностей в самых различных областях естествознания и социологии.

Естественно, что возникновение теории самоорганизации — синергетики было подготовлено трудами многих выдающихся ученых. Это, в первую очередь, Л. Больцман и А. Пуанкаре — основоположники статистической и динамической теории сложных движений; А. М. Ляпунов — один из создателей теории устойчивости движения, лежащей в основе теории самоорганизации; А. Н. Колмогоров, который ввел, в частности, понятие метрической энтропии для характеристики степени хаотичности сложных движений в динамических системах.

Существенную роль в развитии статистической и термодинамической теории открытых систем сыграли работы Л. И. Мандельштама, А. А. Андронова, Н. С. Крылова, Н. М. Крылова и Н. Н. Боголюбова, А. А. Власова, Л. Д. Ландау, Я. Б. Зельдовича, Д. А. Франк-Каменецкого.

К числу основоположников теории самоорганизации относится, несомненно, и Владимир Иванович Вернадский — создатель учения о ноосфере — учения о роли человека в развитии биосферы и всей природы в целом.

Выделим основные проблемы статистической теории открытых систем, которые здесь рассматриваются.

В.1. Критерии относительной степени упорядоченности различных неравновесных состояний в открытых системах

Мы уже несколько раз использовали термин «процессы самоорганизации», но не дали ответа на вопрос: что такое самоорганизация? И это не случайно.

Известно много различных примеров, когда наличие самоорганизации представляется очевидным. Можно, и это делается в очень многих работах, предложить и математические модели для описания таких процессов. Трудно, однако, дать общее определение понятия «самоорганизация». Такого определения нет фактически ни в книге Г. Николиса и И. Пригожина «Самоорганизация в неравновесных системах», которая является первым систематическим изложением теории самоорганизации, ни в книге Г. Хакена «Синергетика» (1980). Нет этого определения и в более поздних книгах (*Пригожин*, *Стенгерс*, 1986; *Хакен*, 1985).

Можно обратиться к более ранним («дофизического периода») работам, посвященным проблемам самоорганизации. Они собраны, например, в книге «Принципы самоорганизации» под редакцией А. Я. Лернера (1966). Приведем слова из предисловия редактора сборника: «...самоорганизация остается на протяжении многих веков, пожалуй, самым загадочным явлением, самой сокровенной тайной природы». И дальше: «...читатель не найдет в нем (в сборнике.— **Ю. К.**) ни одной работы, которая претендовала бы на раскрытие принципов самоорганизации».

Эти слова написаны около четверти века назад. За это время мы значительно продвинулись в понимании принципов самоорганизации и постараемся это показать. И все же здесь гораздо больше нерешенных проблем, как принципиальных, так и более частных. Одной из них является проблема определения сравнительной степени упорядоченности или, напротив, хаотичности различных неравновесных состояний открытых систем.

Итак, одна из основных задач книги — описание и сравнительная оценка различных критериев *относительной* степени упорядоченности различных состояний, отвечающих разным значениям управляющих параметров. Таким образом, мы не ставим задачу дать общие определения понятий самоорганизация, порядок, хаос. Эти определения и не являются необходимыми. Надо ответить на вопрос: какое из рассматриваемых сложных движений в процессе эволюции (во времени или в пространстве управляющих параметров) является более упорядоченным? Ответ необходим, чтобы можно было сделать заключение о наличии процесса самоорганизации.

При решении этой общей проблемы возникают и более частные вопросы, например, о правильности выбора управляющих параметров, об оптимизации поиска наиболее

упорядоченных или (в зависимости от задачи) наиболее хаотических состояний.

Решение общей проблемы можно, разумеется, начать с решения более частных задач. Как сравнить степень упорядоченности состояний в генераторе когерентных колебаний или, напротив, в генераторе шума? Является ли переход от стационарного ламинарного течения жидкости в трубе к стационарному турбулентному течению процессом самоорганизации, или, другими словами, какое из двух стационарных течений — ламинарное или турбулентное, является более упорядоченным?

Ответ на первый вопрос кажется очевидным. Именно, по мере увеличения значения положительной обратной связи — параметра порядка — состояние генератора становится более упорядоченным. Зачастую, однако, «очевидность» является обманчивой.

Действительно, почти в любой, взятой наугад книге по турбулентности можно найти утверждение, что турбулентное движение является более хаотическим, чем ламинарное. Имеются, однако, и исключения. Так, например, на с. 195 книги И. Пригожина и И. Стенгерс высказывается противоположная точка зрения: «Долгое время турбулентность отождествлялась с хаосом или шумом. Сегодня мы знаем, что это не так .〈 . . . 〉 Множество пространственных и временных масштабов, на которых разыгрывается турбулентность, соответствует когерентному поведению миллионов и миллионов молекул. С этой точки зрения переход от ламинарного течения к турбулентному является процессом самоорганизации. Часть энергии системы, которая в ламинарном течении находилась в тепловом движении молекул, переходит в макроскопическое организованное движение».

Аналогичная точка зрения была высказана ранее в нашем курсе «Статистическая физика» (1982). В работе (*Климонтович*, 1984) эта позиция была подтверждена конкретным расчетом.

Этот пример показывает, сколь трудно при сложных движениях отличить «порядок» от «хаоса». По этой причине и возникает необходимость введения количественных критериев относительной степени упорядоченности различных неравновесных состояний открытых систем.

Об относительной степени упорядоченности можно судить по различным критериям: по значениям показателей Ляпунова и энтропии Крылова — Колмогорова — Синая (К-энтропии), по размерности эффективного фазово-

го пространства, по значениям энтропии Больцмана — Гиббса — Шеннона, перенормированным к заданному значению средней эффективной энергии — эффективной функции Гамильтона открытой системы. Сравнительный анализ различных критериев и детальный анализ последнего из них и составляет одну из основных задач книги.

Здесь отметим еще следующее.

Первоначальные расчеты относительной степени упорядоченности по значениям энтропии Больцмана — Гиббса — Шеннона базировались на конкретных математических моделях. Это давало возможность определения вида соответствующей эффективной функции Гамильтона. В работе (*Климонтович*, 1988) показана возможность оценки относительной степени упорядоченности открытых систем непосредственно по экспериментальным данным, т. е. без использования математических моделей рассматриваемых процессов. Тем самым существенно расширяются возможности практического применения рассматриваемого критерия.

В.2. Связь статистического и динамического описаний движения в открытых системах. Конструктивная роль динамической неустойчивости движения

Начиная с классических работ Л. Больцмана и А. Пуанкаре описание сложных движений в нелинейных диссипативных системах проводится двумя способами: методами кинетической теории (статистической теории неравновесных процессов), одним из основателей которой и является Л. Больцман, а также методами динамической теории, развитой первоначально для гамильтоновых систем; один из ее основателей — А. Пуанкаре.

До недавнего времени статистическая и динамическая теории сложных движений в нелинейных диссипативных системах развивались практически независимо и, более того, противопоставлялись одна другой. Необходимость синтеза этих двух теорий особенно остро ощущается в последние годы в связи с развитием статистической теории открытых систем, особенно теории самоорганизации. Выявление взаимного влияния этих двух теорий и составляет одну из основных задач книги.

Мы увидим, в частности, что динамическая неустойчивость движения, например атомов газа Больцмана, играет конструктивную роль в обосновании кинетической теории.

Складывается, казалось бы, парадоксальная ситуация. Действительно, движение атомов газа Больцмана динамически неустойчиво. Согласно динамической теории это ведет *к динамическому хаосу*. В то же время, в частности, в теории самоорганизации используются кинетические уравнения для макроскопических (усредненных микроскопических) распределений. Тем самым из хаотического движения атомов выделяются относительно простые движения больших совокупностей атомов. Именно так поступают на всех уровнях описания — кинетическом, гидродинамическом, диффузионном — неравновесных процессов.

Разрешение этого кажущегося парадокса состоит в том, что динамическая неустойчивость движения атомов играет конструктивную роль в том смысле, что определяет саму возможность более грубого описания неравновесных процессов на основе уравнений для макроскопических функций, т. е. для коллективных переменных.

Ниже мы обсудим эту точку зрения более детально. Здесь же рассмотрим лишь иллюстративный пример из области социологии, когда сами «элементарные» объекты системы являются весьма сложными. Приведенная ниже иллюстрация полезна, поскольку показывает ограниченность широко распространенной точки зрения, согласно которой наличие динамической неустойчивости — экспоненциального «разбегания» траекторий — принимается, как правило, за признак перехода к хаосу.

Представим себе, что происходит Международный конгресс, посвященный, например, проблемам теории открытых систем. Примем *состояние*, когда участники конгресса после его официального закрытия находятся еще в зале заседаний, *за начальное* и рассмотрим два возможных вида дальнейшего движения участников: 1. Участники конгресса и после его завершения перемещаются вместе. 2. Участники конгресса разъезжаются по местам жительства и работы — экспоненциально «разбегаются». Иными словами, движение участников конгресса становится «динамически неустойчивым». Какая из двух возможностей в большей мере отвечает интересам развития науки?

Первая возможность на ограниченном отрезке времени может быть, разумеется, полезной, так как позволяет продолжить личные контакты и дискуссии. Несомненно, однако, что именно вторая возможность необходима для использования полученной информации в дальнейшей ра-

боте. Конструктивная — позитивная роль «динамической неустойчивости» движения здесь очевидна.

Можно также отметить, что такого рода динамическая неустойчивость — экспоненциальное «разбегание траекторий» участников конгресса планируется Оргкомитетом — Оргкомитет, как правило, старается обеспечить участников обратными билетами.

В.3. Переход от обратимых уравнений к необратимым. Ансамбль Гиббса в статистической теории неравновесных процессов

Эта проблема также относится к числу основных, поскольку все уравнения статистической теории открытых систем являются диссипативными и, следовательно, необратимыми. Вопрос о переходе от обратимых уравнений движения — уравнений Гамильтона элементарных объектов системы (например, атомов газа) — к необратимым тесно связан с вопросом о выборе ансамбля Гиббса при описании неравновесных процессов в открытых системах. Здесь снова возникает проблема взаимосвязи статистического и динамического описаний, и не только на микроскопическом уровне, но и на всех уровнях макроскопического описания процессов в открытых системах.

В.4. Роль флуктуаций на различных уровнях описания. Флуктуационно-диссипационные соотношения

В статистической теории неравновесных процессов в открытых системах используется иерархия уравнений для макроскопических — коллективных переменных: кинетические уравнения для распределений в 6-мерном фазовом пространстве; гидродинамические уравнения; реакционно-диффузионные уравнения; уравнения химической кинетики; уравнения для квазистатических процессов в термодинамике. На всех перечисленных уровнях описания задача сводится к решению уравнений для усредненных по ансамблю Гиббса соответствующих микроскопических характеристик — уравнениям для первых моментов соответствующих случайных функций. Такие уравнения можно назвать *динамическими уравнениями для диссипативных систем* (диссипативными динамическими уравнениями).

Естественно, что уравнения для первых моментов не дают полного описания — необходим учет флуктуаций.

Это утверждение является общим, поскольку в статистической теории существуют так называемые *флуктуационно-диссипационные соотношения* (ФДС). Тем самым флуктуации являются неизбежными для любой диссипативной системы. Весь вопрос сводится к тому, какова же роль флуктуаций или, напротив, какова область справедливости диссипативных динамических уравнений.

Здесь мы вступаем в новую область — область флуктуационной кинетической теории, флуктуационной гидродинамики, флуктуационной диффузии. В соответствии с этим возникает проблема установления ФДС на различных уровнях описания для самых разных состояний — как близких к равновесному, так и далеких от него, как при малой диссипации, так и для сильно диссипативных систем.

ФДС позволяют проследить за ростом флуктуаций при приближении к тем или иным критическим точкам — точкам неравновесных фазовых переходов, ведущих к образованию новых диссипативных структур в процессах самоорганизации.

Несмотря на то, что первые ФДС установлены более шестидесяти лет назад (формула Эйнштейна в теории броуновского движения для коэффициента диффузии, формула Найквиста для интенсивности источника случайной ЭДС в электрической цепи), в этой области еще много нерешенных вопросов, особенно для открытых систем.

В.5. Броуновское движение в открытых системах. Молекулярные и турбулентные источники флуктуаций

Цель книги — дать единое изложение основных идей, методов и закономерностей современной статистической теории открытых систем. Поэтому прослеживается переход от обратимых уравнений к необратимым, который на всех уровнях описания ведет к уравнениям для флуктуирующих макроскопических переменных: функций распределения в кинетической теории, гидродинамических и термодинамических функций на гидродинамическом и диффузионном уровнях описания. Все эти величины в обобщенном смысле можно рассматривать как объекты броуновского движения — «броуновские частицы». В связи с этим возникает необходимость изложения ряда вопросов теории броуновского движения в открытых системах.

Как мы увидим, существует целая иерархия различных броуновских движений, начиная с наиболее быстрых движений в кинетической теории и кончая наиболее медленными, при которых по мере уменьшения частоты спектральная плотность возрастает по закону $1/\omega$ — фликкер-шум. Кроме того, характер броуновского движения сильно меняется по мере удаления от равновесного состояния, когда становятся существенными нелинейные процессы. Это приводит к новым проблемам при использовании уравнений Ланжевена и Фоккера — Планка, в частности, наряду с молекулярными, приходится вводить и турбулентные источники флуктуаций в уравнения Ланжевена.

В.6. Ламинарное и турбулентное движение

В зависимости от относительной роли флуктуационного и упорядоченного движений, а также от числа макроскопических степеней свободы, можно выделить три группы движений.

Это, во-первых, хаотическое тепловое движение. В этом случае усредненные макроскопические параметры постоянны, а наличие флуктуаций характеризует «молекулярную» структуру системы. Флуктуации макроскопических характеристик малы и во многих случаях, за исключением, например, броуновского движения малых частиц в жидкости, могут не приниматься во внимание.

Ко второй группе можно отнести ламинарное движение, или *ламинарные пространственно-временные диссипативные структуры*. Они возникают на фоне теплового движения и характеризуются небольшим числом макроскопических степеней свободы. Роль флуктуаций здесь особенно существенна около критических точек перехода от одних диссипативных структур к другим, или, иными словами, при неравновесных фазовых переходах.

Наконец, к третьей группе можно отнести турбулентное движение, которое определяется большим числом макроскопических степеней свободы. Турбулентное движение очень разнообразно и может возникать на всех уровнях описания — от кинетического до диффузионного или диффузионно-реакционного. Оно характеризуется большим числом пространственных и временных масштабов. На фоне мелкомасштабного турбулентного движения могут выделяться и *когерентные пространственно-временные структуры*.

При анализе ламинарного и турбулентного движения существенна оценка их относительной степени упорядоченности. В работе (*Климонтович*, 1984) такая оценка проведена по значениям перенормированной к заданному значению средней эффективной энергии энтропии Больцмана — Гиббса — Шеннона — по критерию S-теоремы. По этому критерию усредненное турбулентное движение оказывается более упорядоченным, чем ламинарное. Это лишь один из аргументов в пользу высказанной в работах (*Климонтович*, 1982 и IV, 1984; *Эбелинг*, *Климонтович*, 1984; *Пригожин*, *Стенгерс*, 1984, 1986; *Климонтович*, *Энгель-Херберт*, 1984) точки зрения, согласно которой переход от ламинарного движения к турбулентному в ряде случаев может рассматриваться как неравновесный фазовый переход к более упорядоченному состоянию и, следовательно, как пример процесса самоорганизации.

В статистической теории открытых систем (в частности, в теории неравновесных фазовых переходов) прослеживается глубокая аналогия с теорией равновесных фазовых переходов, развитой Л. Д. Ландау (см., например, *Хакен*, 1980, 1985). При этом существенно обобщается термин «параметр порядка», введенный в теории Ландау для определения долгоживущих макроскопических характеристик. Так, в теории турбулентности роль параметра порядка играет *тензор напряжений Рейнольдса*, который характеризует состояние, далекое от равновесного.

Таким образом, турбулентное движение представляется как очень сложное движение в открытых системах, возникающее из менее упорядоченного движения — «физического хаоса». Такая точка зрения на турбулентное движение (*Климонтович*, 1982 и IV) и определила название книги «Турбулентное движение и структура хаоса». Подзаголовок подчеркивает, что основное внимание уделяется общим проблемам статистической теории открытых систем. Все эти проблемы являются чрезвычайно сложными, поэтому лишь сравнительно немногое можно в настоящее время изложить с достаточной полнотой и последовательностью. Во многих случаях приходится в большей степени полагаться на физическую интуицию, чем на строгий математический расчет. В такой ситуации слова Рабиндраната Тагора, принятые в качестве эпиграфа к книге, являются для автора ободряющими.

Глава 1

ЭВОЛЮЦИЯ ЭНТРОПИИ И ПРОИЗВОДСТВО ЭНТРОПИИ В ОТКРЫТЫХ СИСТЕМАХ

Во введении были перечислены основные проблемы, анализ которых является целью настоящей книги. К числу основных была отнесена проблема установления и сравнительного анализа критериев относительной степени упорядоченности неравновесных состояний открытых систем. К числу основных, как показано ниже, относится также рассмотрение критерия, базирующегося на сопоставлении перенормированных к определенным условиям значений энтропии и производства энтропии. Это определило название и содержание гл. 1. Поскольку все основные рассмотренные в ней вопросы перечислены в подробном оглавлении, можно сразу приступить к последовательному изложению материала. Естественно начать с определения и обсуждения основных понятий теории эволюции в открытых системах.

1.1. Хаос и порядок. Управляющие параметры. Физический хаос. Эволюция и самоорганизация в открытых системах

Понятие «хаос» играло существенную роль в мировоззрении философов древности, в частности представителей школы Платона. Отметим два сформулированных ими положения, которые сохраняют свое значение и в настоящее время.

Хаос — состояние системы при удалении всех возможностей проявления ее свойств. Из хаоса возникает все, что составляет мироздание — порядок.

В физике понятия «хаос», «хаотическое движение», «порядок» являются фундаментальными, но тем не менее определенными недостаточно четко.

Действительно, начиная с классических работ Максвелла, Больцмана и Гиббса, хаотическим называют движение атомов в состоянии теплового равновесия. Хаотическим, однако, называют и движение, далекое от равновесного, например, в генераторах шума, в турбулентных потоках и т. д. Широкое распространение получил термин «динамический хаос». Он характеризует сложное движение в маломерных гамильтоновых и диссипативных динамических системах. Известным примером служит движение жидкости при развитой тепловой конвекции, которое описывается уравнениями Лоренца (*Лоренц*, 1963).

Итак, термином «хаос» характеризуют самые различные виды сложных движений. Поскольку во многих случаях хаос трудно отличить от упорядоченного, но очень сложного движения, то возникает необходимость в критериях относительной степени упорядоченности или, напротив, хаотичности движений.

При анализе и сопоставлении сложных движений важен выбор управляющих параметров, изменение которых определяет характер процесса. Выбор таких параметров во многих случаях представляет самостоятельную задачу. Он производится, как правило, либо на основе уже имеющейся информации о системе, либо на основе дополнительных исследований, например бифуркационных диаграмм. При этом возможны, естественно, и ошибки, поэтому критерии правильности выбора управляющих параметров должны давать и возможность контроля правильности сделанного выбора.

В качестве управляющих могут выступать самые разнообразные параметры.

Так, в классических и квантовых генераторах их роль играет *обратная связь*, или *накачка*. В мультистабильных системах, например, выбор того или иного стационарного состояния может осуществляться путем изменения начальных условий. Управляющим параметром может служить и медленное время, например время наблюдения за состоянием здоровья пациента в процессе лечения.

В гидродинамике в зависимости от вида течения роль управляющих параметров играют *числа Рейнольдса*, *Рэлея*, *Тейлора*. При наличии нескольких управляющих параметров возможны поиски оптимальных состояний, например наибольшей упорядоченности в процессах самоорганизации при наибольшей хаотичности при конструировании шумовых генераторов.

Спектр открытых нелинейных диссипативных систем, при исследовании которых необходима оценка сравнительной степени упорядоченности, чрезвычайно широк: от физического вакуума, который характеризуется, по-видимому, максимальной возможной степенью хаотичности, до Вселенной, от газа бесструктурных частиц до биологических и социологических систем.

Обозначим через $a = (a_1, \ldots, a_n)$ набор параметров, выбранных в качестве управляющих. Выделим два состояния, отвечающие значениям $a = a_0$, $a = a_0 + \Delta a$. Управляющие параметры всегда могут быть определены таким образом, что более упорядоченному состоянию отвечают положительные значения $\Delta a_i > 0$. При этом условии для более упорядоченного состояния

$$a = a_0 + \Delta a, \quad \Delta a_i > 0, \qquad i = 1, 2, \ldots, n. \qquad (1.1.1)$$

Состояние при $\Delta a = 0$ назовем состоянием физического хаоса. При сравнении степени упорядоченности состояний будем принимать его за «начало отсчета». Слово «физический» введено в термин с целью подчеркнуть физический характер рассматриваемых ниже критериев. При этом существенно следующее.

Во-первых, состояние физического хаоса может существенно отличаться от равновесного состояния.

Во-вторых, приведенное определение будет использоваться при сравнении как далеких, так и близких неравновесных состояний. При сравнении близких состояний будут использованы локальные формулировки критериев относительной степени упорядоченности. Тогда локальным будет и само определение физического хаоса.

Понятие «эволюция» является очень общим. В физике рассматривается, например, эволюция к равновесному состоянию или стационарному (в открытых системах) состоянию. Примером эволюции может служить образование последовательности новых структур в процессах самоорганизации. В биологии согласно теории Дарвина образование новых структур происходит путем естественного отбора.

Известно, что Людвиг Больцман назвал XIX век веком Дарвина, полагая тем самым, что теория эволюции Дарвина, основанная на принципе естественного отбора, является наиболее значительным открытием прошлого века.

Такой вывод может показаться неожиданным. Действительно, ведь XIX век очень богат великими открытиями в естествознании, в частности, в физике. XIX век —

это век термодинамики, созданной трудами Сади Карно, Рудольфа Клаузиуса, Вильяма Томсона и других замечательных ученых, это век электромагнитной теории Майкла Фарадея и Джеймса Максвелла. В XIX веке были заложены и основы современной кинетической теории, одним из основателей которой был Людвиг Больцман. Он предложил первое кинетическое уравнение, которое описывает, в частности, необратимый процесс установления равновесного состояния. Он впервые ввел статистическое определение энтропии и доказал свою знаменитую Н-теорему. И все же Больцман определил XIX век как век Дарвина.

Главное, что определило такой выбор, это удивительная научная интуиция Больцмана, глубина которой, да и то не в полной мере, становится очевидной лишь в настоящее время.

Во времена Больцмана не существовало каких-либо математических моделей биологической эволюции. Более того, отнюдь не была общепринятой предложенная самим Больцманом теория необратимых процессов, Н-теорема. Напротив, вокруг теории Больцмана бушевали страсти. Среди самых активных его оппонентов был и Анри Пуанкаре.

Для иллюстрации характера полемики приведем цитату (*И. Пригожин*, 1985, с. 170): «Пуанкаре в одной из своих работ не рекомендовал изучать труды Больцмана на том основании, что посылки в рассуждениях Больцмана противоречат его, Пуанкаре, выводам»*).

Пуанкаре, основываясь на обратимых уравнениях механики, пришел к выводу, что теория необратимых процессов и механика несовместимы. Основанием служило, в частности, то, что в рамках механики Гамильтона невозможно построить функцию Ляпунова, играющую роль Н-функции (энтропии) в теории Больцмана.

Для иллюстрации степени изменения отношения к работам Больцмана приведем слова замечательного представителя следующего поколения физиков — Эрвина Шредингера (см. *И. Пригожин*, 1985, с. 161): «Его (Больц-

---

*) На с. 29 сборника (*Кадомцев* (ред.), 1984) в статье (*Мисра, Пригожин*, 1984) приводится другая версия, высказанная А. Пуанкаре: «В этой связи забавно вспомнить слова Пуанкаре о том, что рекомендовать кому-либо прочитать работу Больцмана он не может, так как не может рекомендовать изучение доказательств, в которых выводы противоречат предпосылкам». Авторы, к сожалению, не дают точного указания на первоисточник.

мана.— Ю. К.) направление мышления можно было бы назвать моей первой любовью в науке. Никакие идеи не захватывали меня так глубоко и вряд ли смогут захватить меня в будущем».

Итак, Больцман назвал XIX век веком Дарвина. В этом проявилась вера Больцмана в то, что развитая им кинетическая теория неравновесных процессов будет служить основой и для описания процессов в открытых физических, химических и биологических (!) системах. По мере развития статистической теории открытых систем мы все больше убеждаемся в правоте Больцмана.

Каково же соотношение понятий «эволюция» и «самоорганизация»?

Говоря о процессах самоорганизации, мы будем иметь в виду процессы, при которых (по приведенным ниже критериям) возникают более сложные и более совершенные структуры. При таком подходе возникает вопрос: является ли любой эволюционный процесс процессом самоорганизации? Ответ, естественно, отрицательный, поскольку ни в физических, ни даже в биологических системах не заложено «внутреннее стремление» к самоорганизации. Действительно, эволюция может вести и к деградации. В физике примером служит переход к равновесному состоянию, которое, по Больцману и Гиббсу, является наиболее хаотическим. В биологии происходит деградация биологических структур.

Таким образом, самоорганизация — лишь один из возможных путей эволюции.

1.2. Энтропия Больцмана — Гиббса — Шеннона

В статистической теории открытых систем энтропия является одной из важнейших характеристик и может играть три разных роли: служить мерой неопределенности при статистическом описании, мерой относительной степени упорядоченности неравновесных состояний открытых систем и, наконец, мерой разнообразия в теории эволюции — разнообразия, без которого становится невозможным естественный отбор.

На разных этапах развития статистической теории и теории информации были предложены отличающиеся по форме и степени общности определения энтропии.

Впервые связь введенной ранее в термодинамике энтропии с функцией распределения координат и импульсов частиц $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ была установлена Больцманом на

примере разреженного газа. Воспроизведем этот результат.

Начнем с динамического (микроскопического) распределения N частиц рассматриваемой системы в 6-мерном пространстве $x = (\mathbf{r}, \mathbf{p})$ координат и импульсов частиц

$$N(x, t) \equiv \sum_{1 \leq i \leq N} f^{(\text{д})}(x_i, t) = \sum_{1 \leq i \leq N} \delta(x - x_i(t)),$$
$$\int N(x, t)\, dx = N. \tag{1.2.1}$$

Величина $N(x, t)\,dx$ определяет истинное (не усредненное; в теории турбулентности часто говорят «осредненное») число частиц около точки x в элементе объема dx в момент времени t. Интеграл по всему объему в пространстве x определяет полное число частиц.

При статистическом описании, когда отсутствует полная информация о значениях $x_i(t)$, функция $N(x, t)$ является *случайной* функцией. Оставляя пока открытым вопрос оценки степени неполноты при статистическом описании, введем формально ансамбль Гиббса — совокупность одинаковых систем, но с разными значениями микроскопических переменных x_i. Обозначим чертой сверху (или скобками $\langle\ \rangle$) усреднение по ансамблю Гиббса и введем обозначение для первого момента случайной плотности

$$\overline{N}(x, t) \equiv \langle N(x, t) \rangle = \left\langle \sum_{1 \leq i \leq N} \delta(x - x_i(t)) \right\rangle. \tag{1.2.2}$$

Первый момент связан с функцией распределения $f(x, t)$ равенством

$$\overline{N}(x, t) = nf(x, t), \qquad V^{-1} \int f(x, t)\, dx = 1, \tag{1.2.3}$$

где $n = N/V$ — средняя плотность числа частиц, множитель V^{-1} введен для удобства записи дальнейших выражений.

Энтропия Больцмана выражается через функцию распределения $f(x, t)$:

$$S_{\text{Б}}(t) = -kn \int f(x, t) \ln f(x, t)\, dx + S_0. \tag{1.2.4}$$

Значение константы S_0 зависит от выбора размера ячейки в фазовом пространстве $x = (\mathbf{r}, \mathbf{p})$, однако не играет роли, поскольку для всех приведенных ниже критериев используют разность энтропий двух разных состояний.

Здесь и ниже введены размерные функции распределения. Переход к безразмерным распределениям осуществляется выбором ячейки в фазовом пространстве.

Рассмотрим $6N$-мерное фазовое пространство $X = (\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_N)$ и введем динамическое (микроскопическое) распределение

$$f_N^{(\text{д})}(X, t) = \delta(X - X(t)), \qquad \int f_N^{(\text{д})}(X, t)\, dX = 1. \quad (1.2.5)$$

При статистическом описании динамическое распределение является случайной функцией. Снова вводим ансамбль Гиббса и проводим соответствующее усреднение по ансамблю. Функция распределения в $6N$-мерном фазовом пространстве определяется первым моментом динамического распределения (5)

$$f_N(X, t) = \langle f_N^{(\text{д})}(X, t)\rangle = \langle \delta(X - X(t))\rangle. \quad (1.2.6)$$

Через функцию f_N выражается энтропия Гиббса

$$S_{\text{Г}}(t) = -k \int f_N(X, t) \ln f_N(X, t)\, dX + S_0. \quad (1.2.7)$$

Константу S_0 можно выбрать таким образом, чтобы в отсутствие корреляций, когда распределение $f_N(X, t)$ выражается через произведения распределений отдельных частиц, т. е. при условии

$$f_N(X, t) = \prod_{1<i<N} \left(V^{-1} f(x_i, t)\right), \qquad V^{-1} \int f(x_i, t)\, dx = 1, \quad (1.2.8)$$

энтропии Больцмана (4) и Гиббса (7) совпадали:

$$S_{\text{Г}} = S_{\text{Б}}. \quad (1.2.9)$$

Естественно, что выражение (7) является более общим, чем (4), так как оно справедливо и при наличии корреляций координат и импульсов частиц. При учете корреляций, как мы увидим, равенство (9) нарушается и заменяется неравенством (знак равенства отвечает случаю (8))

$$S_{\text{Г}} \leqslant S_{\text{Б}}. \quad (1.2.10)$$

Энтропии Больцмана и Гиббса были введены при статистическом описании систем частиц, когда микроскопическое состояние характеризуется набором пар сопряженных координат и импульсов частиц системы. Определение энтропии через среднее значение функции распределения имеет, однако, более общее значение, так как выражения

такого типа обладают совокупностью свойств, которые позволяют использовать их в качестве *меры неопределенности* при статистическом описании. На это обратил внимание К. Шеннон — один из создателей теории информации.

Это дает основание использовать более общее определение энтропии — энтропии Шеннона

$$S(t) = -\int f(X, t) \ln f(X, t)\, dX + S_0, \qquad \int f(X, t)\, dX = 1. \tag{1.2.11}$$

Здесь $f(X, t)$ — функция распределения произвольного набора переменных X, характеризующих состояние рассматриваемой системы. Определенная таким образом энтропия может служить мерой неопределенности при любом распределении.

Если состояние системы характеризуется дискретным набором переменных n с функцией распределения f_n, то энтропия определяется выражением

$$S(t) = -\sum_n f_n \ln f_n, \qquad \sum_n f_n = 1. \tag{1.2.12}$$

Свойства энтропии, позволяющие принять ее за меру неопределенности при статистическом описании, приводятся в курсах теории информации (например, *Стратонович*, 1975) и некоторых курсах статистической физики (например, *Климонтович*, IV, гл. 4).

1.3. Функция распределения значений энтропии

Напомним, что с помощью распределения $f(X, t)$ можно найти распределение значений произвольной функции $A(X)$ динамических переменных X. Распределение $f(A, t)$ определяется формулой

$$f(A, t) = \int \delta(A - A(X)) f(X, t)\, dX. \tag{1.3.1}$$

Заметим теперь, что выражение (2.11) для энтропии S можно представить в виде среднего значения функции динамических переменных специального вида

$$A\{X\} = -\ln(f(X, t)/C), \qquad \ln C = S_0. \tag{1.3.2}$$

Здесь зависимость от X входит не явно, а через функцию распределения $f(X, t)$. Из формул (1), (2) следует, что функция распределения значений энтропии может быть

определена выражением

$$f(S, t) = \int \delta(S + \ln[f(X, t)/C]) f(X, t)\, dX. \qquad (1.3.3)$$

Энтропия Шеннона (2.11) может быть представлена как среднее значение с распределением (3):

$$S(t) = \int Sf(S, t)\, dS = -\int f(X, t) \ln(f(X, t)/C) dX. \qquad (1.3.4)$$

В качестве примера найдем с помощью распределения (3) дисперсию энтропии для равновесного состояния системы с функцией Гамильтона $H(X)$. За $f(X, t)$ примем каноническое распределение Гиббса

$$f_N(X) = \exp\left[(kT)^{-1}(F - H(X))\right], \qquad \int f_N(X)\, dX = 1. \qquad (1.3.5)$$

Здесь F — свободная энергия. Константа C включена в F. Функция распределения энтропии имеет в этом случае вид

$$f(S) = \int \delta(S + [F - H(X)]/T) f_N(X)\, dX. \qquad (1.3.6)$$

Среднее значение совпадает с энтропией Гиббса для равновесного состояния:

$$S_\text{г} = \int Sf(S)\, dS = -(F - \overline{U})/T, \qquad \overline{U} \equiv \overline{H(X)}. \qquad (1.3.7)$$

Из (6) следует, что дисперсия энтропии определяется выражением

$$\overline{(S - S_\text{г})^2} = (\overline{U^2} - \overline{U}^2)/T^2, \quad U = H(X) \qquad (1.3.8)$$

и, следовательно, пропорциональна дисперсии внутренней энергии. Для дисперсии внутренней энергии равновесного состояния с распределением Гиббса (5) при произвольной функции $H(X)$ справедливо равенство (например, *Климонтович*, IV, гл. 5)

$$\overline{U^2} - \overline{U}^2 = kT^2 \partial\overline{U}/\partial T. \qquad (1.3.9)$$

Из (8), (9) следует выражение для дисперсии энтропии:

$$\overline{(S - S_\text{г})^2} = k\, \partial\overline{U}/\partial T. \qquad (1.3.10)$$

Этот результат хорошо известен в статистической физике. При его выводе, как правило, используется распределе-

ние Гаусса для термодинамических переменных. Естественно, что в общем случае распределение $f(S)$ не совпадает с распределением Гаусса. Отличие наиболее существенно вблизи критических точек, а также для стационарных состояний открытых систем.

В конце главы на примере математической модели биологической эволюции мы покажем, что логарифм распределения энтропии $f(S)$ может служить мерой разнообразия. Это будет вторая роль энтропии.

Итак, были введены два типа распределений.

1. Динамические распределения $N(x, t)$, $f_N^{(д)}(x, t)$. Уравнения для этих функций (они приводятся в начале гл. 2, в которой обсуждаются причины возникновения необратимости) эквивалентны уравнениям движения частиц — уравнениям Гамильтона и поэтому являются обратимыми.

2. Статистические распределения $f(x, t)$, $f_N(X, t)$. Они получаются путем усреднения соответствующих динамических распределений по ансамблю Гиббса.

Замкнутые уравнения для статистических распределений принято называть кинетическими уравнениями. Примеры таких уравнений для разреженного газа (газа Больцмана) рассматриваются в 1.5, 1.7. Здесь же необходимо отметить следующее.

Кинетические уравнения для выбранной системы, например для разреженного газа, могут быть получены в разных приближениях. Во всех случаях, однако, они отвечают *приближению первых моментов* тех или иных случайных распределений. Тем самым не учитываются флуктуации и, следовательно, приближение первых моментов можно рассматривать как *приближение сплошной среды.*

В силу приближенности, из-за потери информации о высших моментах, все уравнения, отвечающие приближению первых моментов — приближению сплошной среды, являются диссипативными уравнениями.

В связи со сказанным возникают два существенных вопроса.

Во-первых, приведенные выражения для энтропии Больцмана — Гиббса — Шеннона определяются статистическими распределениями $f(x, t)$, $f_N(X, t)$, $f(X, t)$, которые можно рассматривать как первые моменты некоторых случайных функций, например динамических распределений. Поскольку уравнения для статистических распределений — кинетические уравнения — пока неизвестны, то приведенные определения энтропии остаются

еще недостаточными (в общем случае) для проведения расчетов энтропии.

Во-вторых, остается пока открытым вопрос об определении энтропии с учетом флуктуаций, определяющих высшие моменты.

1.4. Ансамбль Гиббса. Сглаживание по физически бесконечно малому объему. Энтропия с учетом флуктуаций. Пространственные (временные) и фазовые средние. Локальное условие эргодичности

Уравнения для динамических (микроскопических) распределений $N(x, t)$, $f_N^{(д)}(X, t)$ эквивалентны, как мы уже отмечали, уравнениям Гамильтона и поэтому являются обратимыми. В гл. 2 обратимые уравнения для динамических распределений используются как исходные лишь для «старта» при получении необратимых кинетических уравнений, описывающих реальные процессы в макроскопических системах.

При рассмотрении макроскопических систем непосредственное использование уравнений для динамических распределений практически невозможно по следующим причинам (разобьем их условно на внутренние и внешние).

К числу внутренних причин относится, прежде всего, *динамическая неустойчивость движения* частиц — элементарных объектов рассматриваемой системы. Это означает, что близкие в начальный момент частицы расходятся по всему объему. Поскольку начальные условия для частиц не могут быть заданы точно, то даже при небольшом начальном разбросе в силу динамической неустойчивости происходит перемешивание по фазовому объему.

К числу внешних причин относятся *неконтролируемые* (*случайные*) *воздействия* на рассматриваемую систему со стороны внешних объектов. В силу динамической неустойчивости даже малые внешние воздействия могут приводить к существенным изменениям состояния системы.

По этим причинам полное динамическое описание движения частиц оказывается невозможным и, следовательно, неизбежен переход к ансамблю Гиббса для совокупности систем, микроскопические состояния которых задаются с некоторой неопределенностью. Какими же физическими условиями задается эта неопределенность?

Как определить ансамбль Гиббса для неравновесных процессов?

Статистический ансамбль был введен Гиббсом для описания равновесного состояния. Для системы в термостате функция распределения f_N определяется каноническим распределением Гиббса (3.5). В этом случае одинаковыми — заданными для всех систем являются лишь температура и небольшое число внешних параметров. Естественно, что при этом имеется огромный произвол в значениях подавляющего числа степеней свободы частиц системы.

Таким образом, в равновесном ансамбле Гиббса число контролируемых степеней свободы мало и, следовательно, неопределенность задания микроскопических состояний системы очень велика. Это и отвечает тому, что степень хаотичности равновесного состояния максимальна (см. ниже, 1.10. Теорема Гиббса).

Такое задание ансамбля Гиббса не годится, разумеется, для описания произвольных неравновесных процессов. Как же быть?

В теории неравновесных процессов широко распространен прием, когда неопределенность микросостояний систем в ансамбле Гиббса задают распределением $f_N(X_0)$ начальных значений X_0 координат и импульсов частиц. В этом случае можно конкретизировать соотношение (2.6), связывающее динамическое и статистическое распределения. Именно,

$$f_N(X, t) = \langle f_N^{(\text{д})}(X, t)\rangle_{X_0} = \\ = \int \delta(X - X(X_0, t - t_0)) f_N(X_0)\, dX_0. \quad (1.4.1)$$

Поскольку начальные условия входят параметрически, то усреднение по начальным условиям не меняет вида уравнения для функции распределения и, следовательно, оно совпадает по виду с уравнением для динамического распределения f_N и остается по этой причине обратимым. Это естественно, поскольку усреднение по начальным условиям X_0 не затрагивает структуру уравнений движения — уравнений Гамильтона.

В силу указанных выше внутренних и внешних причин такое задание ансамбля Гиббса при описании неравновесных процессов также не является удовлетворительным, так как из-за динамической неустойчивости и действия неконтролируемых внешних факторов обратимость движения нарушается.

Таким образом, вопрос определения ансамбля Гиббса остается пока открытым.

В статистической теории неравновесных процессов наиболее естественным является следующее задание неопределенности микросостояний систем в ансамбле Гиббса.

Используем понятия *физически бесконечно малых масштабов* длины $l_ф$ и времени $\tau_ф$. Выбор этих величин ограничивается двумя условиями.

1. Величины $l_ф$, $\tau_ф$ малы по сравнению с характерными масштабами рассматриваемой задачи.

2. Физически бесконечно малый объем $V_ф$ содержит большое число частиц (элементарных объектов):

$$N_ф = nV_ф \gg 1. \tag{1.4.2}$$

Эти ограничения оставляют, естественно, широкий простор для выбора параметров $l_ф$, $\tau_ф$. Конкретизация этого выбора может быть проведена лишь при задании структуры системы и выборе уровня описания (кинетический, гидродинамический, диффузионный). Это будет сделано в 1.5 на примере разреженного газа — газа Больцмана.

Допустим, что вид физически бесконечно малых масштабов конкретизирован и, следовательно, определены величины $V_ф$, $N_ф$. Тогда считаем, что неопределенность в задании микроскопических состояний систем ансамбля Гиббса определяется неопределенностью (произволом) состояний частиц в пределах объема $V_ф$ (или соответствующего интервала времени $\tau_ф$). Это позволяет провести осреднение — сглаживание динамических распределений по физически бесконечно малому объему, и ввести, тем самым, сглаженные распределения

$$\begin{aligned} \tilde{f}_N(X, t) &= \langle f_N^{(д)}(X, t)\rangle_{V_ф}, \\ \tilde{N}(x, t) &\equiv n\tilde{f}(x, t) = \langle N(x, t)\rangle_{V_ф}. \end{aligned} \tag{1.4.3}$$

Естественно, что для макроскопических систем сглаженные распределения $\tilde{f}_N$, $\tilde{N}(x, t)$ остаются случайными функциями, поэтому возможно дальнейшее усреднение по введенному таким образом ансамблю Гиббса. В результате приходим к определению статистических распределений — первых моментов случайных функций

$$\begin{aligned} f_N(X, t) &= \langle \tilde{f}_N(X, t)\rangle, \\ nf(x, t) &= \langle \tilde{N}(x, t)\rangle \equiv n\langle \tilde{f}(x, t)\rangle. \end{aligned} \tag{1.4.4}$$

Введем соответствующие обозначения для флуктуаций сглаженных распределений:

$$\delta\tilde{f}_N = \tilde{f}_N - f_N, \qquad \delta\tilde{N} = \tilde{N} - \langle\tilde{N}\rangle \qquad (\delta\tilde{f} = \tilde{f} - f). \quad (1.4.5)$$

С помощью сглаженных распределений (3) можно ввести соответствующие энтропии Больцмана и Гиббса. Они определяются по аналогии с формулами (2.4), (2.7) (величины, соответствующие S_0, опускаем) следующим образом:

$$\tilde{S}_{\text{Б}} = -kn\int \tilde{f}(x, t)\ln\tilde{f}(x, t)\,dx, \qquad (1.4.6)$$

$$\tilde{S}_{\text{Г}} = -k\int \tilde{f}_N(X, t)\ln\tilde{f}_N(X, t)\,dX. \qquad (1.4.7)$$

Введенные таким образом сглаженные (пульсирующие) энтропии являются случайными функциями.

Сравним среднее значение сглаженной энтропии

$$\langle\tilde{S}_{\text{Б}}\rangle = -kn\int \langle\tilde{f}(x, t)\ln\tilde{f}(x, t)\rangle\,dx \qquad (1.4.8)$$

с энтропией Больцмана $S_{\text{Б}}$ в случае малых флуктуаций $\delta\tilde{f} = \tilde{f} - f$. В первом неисчезающем приближении по δf для искомой разности энтропий получаем следующее выражение:

$$\langle\tilde{S}_{\text{Б}}\rangle - S_{\text{Б}} = -\frac{kn}{2}\int f^{-1}(x, t)\langle\delta\tilde{f}(x, t)\,\delta\tilde{f}(x, t)\rangle\,dx \leqslant 0. \qquad (1.4.9)$$

Этот результат является естественным. Он показывает, что *при более полном статистическом описании*, когда наряду с первыми моментами учитываются и флуктуации, *энтропия*, а следовательно и неопределенность описания, *уменьшается*.

Сравним также выражение для энтропии (7), определяемой сглаженным N-частичным распределением $\tilde{f}_N$, с энтропией Гиббса $S_{\text{Г}}$. В приближении малых флуктуаций для разности средней энтропии и энтропии Гиббса $S_{\text{Г}}$ получаем выражение

$$\langle\tilde{S}_{\text{Г}}\rangle - S_{\text{Г}} = -\frac{k}{2}\int f_N^{-1}(X, t)\langle\delta\tilde{f}_N(X, t)\,\delta\tilde{f}_N(X, t)\rangle\,dX \leqslant 0. \qquad (1.4.10)$$

Естественно, что и для N-частичного распределения $\tilde{f}_N$ дополнительная информация о флуктуациях приводит к

уменьшению энтропии и, следовательно, к уменьшению степени неопределенности статистического описания.

Выражение (6) для сглаженной энтропии использовано при расчете энтропии стационарного турбулентного движения (*Климонтович*, 1984). При дополнительном условии постоянства средней кинетической энергии относительного движения энтропия при переходе от ламинарного к стационарному турбулентному течению уменьшается. Это свидетельствует о большей упорядоченности турбулентного движения по сравнению с ламинарным (см. 6.8).

Вернемся к определению (3) для сглаженных распределений.

Заметим, что для динамических распределений $f_N^{(д)}$, $f^{(д)}(x_i, t)$ (см. (2.5), (2.1)) справедливо точное равенство

$$f_N^{(д)}(X, t) = \prod_{1 \leq i \leq N} f^{(д)}(x_i, t). \qquad (1.4.11)$$

Оно является следствием того, что динамические распределения содержат полную информацию о системе, поэтому N-частичное распределение $f_N^{(д)}$ представляется как произведение отночастичных динамических распределений $f^{(д)}(x_i, t)$, т. е. корреляции тождественно равны нулю.

Для усредненных по ансамблю Гиббса распределений $f(x, t)$, $f_N(X, t)$ соответствующее равенство (2.8) является приближенным. Оно отвечает нулевому приближению по статистическим корреляциям.

Можно это выразить и другими словами. Для выбранного ансамбля Гиббса, т. е. при задании степени неопределенности микросостояний систем ансамбля, равенство (2.8) означает, что при усреднении по ансамблю дополнительные корреляции не возникают. Это, естественно, достаточно жесткое требование (см. ниже). Здесь же необходимо отметить следующее.

При использовании сглаженных распределений $\tilde{f}_N(X, t)$, $\tilde{f}(x, t)$ возможно промежуточное (между точным (11) и наиболее жестким (2.8)) приближенное равенство

$$\tilde{f}_N(X, t) \approx \prod_{1 \leq i \leq N} (V^{-1}\tilde{f}(x_i, t)), \qquad V^{-1}\int \tilde{f}(x_i, t)\, dx = 1; \qquad (1.4.12)$$

распределения $\tilde{f}(x_i, t)$ не зависят от номера частицы i. Равенство (12) означает, что при заданной путем сглажи-

вания по объему $V_ф$ неопределенности состояний систем ансамбля для сглаженных функций распределения нет корреляций. Корреляции проявляются при усреднении по ансамблю Гиббса. Вследствие этого, после усреднения, равенство (12) принимает вид

$$f_N(X, t) = \left\langle \prod_{1 \leq i \leq N} \left(V^{-1} \tilde{f}(x_i, t)\right) \right\rangle. \qquad (1.4.13)$$

Оно совпадает с (2.8) лишь в отсутствие корреляции сглаженных распределений $\tilde{f}$. Это различие обусловлено корреляциями флуктуаций с характерными масштабами, большими физически бесконечно малых масштабов, т. е. при условиях

$$r_{кор} > l_ф, \qquad \tau_{кор} > \tau_ф. \qquad (1.4.14)$$

Такие флуктуации назовем *крупномасштабными*, а при кинетическом описании — *кинетическими флуктуациями*. В противоположность этому флуктуации с характерными масштабами, удовлетворяющими неравенствам

$$r_{кор} < l_ф, \quad \tau_{кор} < \tau_ф, \qquad (1.4.15)$$

назовем *мелкомасштабными*. Они определяют корреляции частиц в пределах физически бесконечно малого объема $V_ф$ (или интервала времени $\tau_ф$).

Обычно условие эргодичности записывают в виде равенства пространственных (временных) и фазовых средних для произвольной функции распределения динамических переменных

$$\lim_{T \to \infty} T^{-1} \int_0^T A(X(t))\, dt = \int A(X) f_N(X, t)\, dX. \quad (1.4.16)$$

В таком виде условие эргодичности, конечно, не может быть использовано в статистической теории неравновесных процессов.

Действительно, для неравновесных процессов распределение $f_N(X, t)$ зависит от времени, поэтому зависят от времени и фазовые средние $\langle A(t) \rangle$. В то же время левая часть уравнения (16) от времени не зависит. В связи с этим остается открытым вопрос о формуле условия эргодичности для неравновесных процессов; он не является простым.

Начнем с более частного вопроса: какое из усреднений — пространственное (временное) или фазовое (по ансамблю Гиббса) — является первичным?

Ответ, казалось бы, однозначен. Именно, первичным является усреднение по времени (или пространству), поскольку именно такое усреднение — сглаживание по измерительному (временному) интервалу $T_{изм}$ (объему $V_{изм}$) — производится при экспериментальном исследовании явлений. В статистической теории отражением этого является задание неопределенности микросостояний систем ансамбля Гиббса путем сглаживания по физически малому объему $V_ф$ (интервалу $\tau_ф$), т. е. переход к сглаженным распределениям $\tilde{f}$, $\tilde{f}_N$. При этом желательна согласованность экспериментального сглаживания (по интервалам $T_{изм}$, $V_{изм}$) и теоретического (по $\tau_ф$, $V_ф$).

Широко распространена, однако, противоположная точка зрения, которая предельно четко сформулирована в Приложении к книге Р. Балеску (*Балеску*, 1978. Т. 2. С. 386): «Таким образом, мы полностью присоединяемся к той группе физиков (к ней принадлежат, в частности, Толмен и Ландау), которые считают, что эргодическая теория является любопытным свойством динамической системы, но не имеет отношения к обоснованию статистической механики. Выход из обсуждавшихся выше трудностей заключается в том, чтобы *рассматривать средние по ансамблю как первичное определение макроскопических функций*, не вводя какой-либо более фундаментальной концепции. Эргодическая теорема отходит, таким образом, на второй план. Более того, отпадает теперь упомянутая выше главная трудность. Теперь макроскопическая величина (фазовое среднее) может быть уже функцией времени».

Итак, в качестве первичного при экспериментальном исследовании принимаем сглаживание по временному интервалу $T_{изм}$ (объему $V_{изм}$). Возможно, конечно, и то и другое сглаживание в одном эксперименте. Сглаженные функции $\tilde{f}^{T_{изм}}$, $\tilde{f}^{V_{изм}}$ зависят в общем случае от времени и координат.

При теоретическом исследовании производим сглаживание по объему $V_ф(\tau_ф)$. Тем самым задается неопределенность описания микросостояний систем ансамбля Гиббса. Выбор величин $V_ф$, $\tau_ф$ диктуется структурой рассматриваемой системы, принятым уровнем описания (кинетический, гидродинамический, диффузионный), а также локальным условием эргодичности.

В результате сглаживания по объему $V_ф(\tau_ф)$ переходим от динамических (микроскопических) распределений $N(x, t)$, $f_N^{(д)}$ к сглаженным распределениям $\tilde{f}$, $\tilde{f}_N$.

Теперь вернемся к вопросу об эргодичности.

Уравнения (12), (13) не являются эквивалентными, если существенную роль играют корреляции, обусловленные крупномасштабными флуктуациями (с характерными масштабами (14)). В этом случае сглаженные распределения $\tilde{f}$, $\tilde{f}_N$ и распределения f, f_N, отвечающие дополнительному усреднению по ансамблю Гиббса, существенно различаются, т. е. имеют место неравенства

$$\tilde{f}(x, t) \neq f(x, t), \quad \tilde{f}_N(X, t) \neq f_N(X, t). \qquad (1.4.17)$$

Возможна, однако, и обратная ситуация, когда крупномасштабные флуктуации пренебрежимо малы и вследствие этого равенства (12), (13) практически эквивалентны. В этом случае усреднение по ансамблю не меняет фактически сглаженных распределений и имеют место равенства

$$\tilde{f}(x, t) = \langle \tilde{f}(x, t) \rangle \equiv \langle f \rangle_{V_\Phi} \quad (\text{или } \langle f \rangle_{\tau_\Phi}). \qquad (1.4.18)$$

Введенное здесь новое обозначение подчеркивает, что неполнота задания состояний при фазовом усреднении определяется сглаживанием по физически бесконечно малому объему V_Φ (или τ_Φ).

Таким образом, для состояний, когда крупномасштабные флуктуации пренебрежимо малы, при усреднении по ансамблю не возникают дополнительные корреляции сглаженных распределений. С учетом введенного в (18) обозначения локальное условие эргодичности можно записать в следующем виде:

$$\tilde{f}^{T_{\text{изм}}}(x, t) = \langle f(x, t) \rangle_{\tau_\Phi}, \qquad \tilde{f}^{V_{\text{изм}}}(x, t) = \langle f(x, t) \rangle_{V_\Phi}. \qquad (1.4.19)$$

Конкретизируем теперь приведенные общие утверждения на примере разреженного газа — газа Больцмана.

1.5. Кинетическое уравнение Больцмана для статистического и сглаженного распределений. Физически бесконечно малые масштабы для газа Больцмана. Конструктивная роль динамической неустойчивости движения атомов газа

1.5.1. Характерные параметры взаимодействия. В разреженном газе имеются три характерных параметра длины: r_0 — диаметр атома-шарика, $r_{\text{ср}}$ — среднее расстояние между атомами ($r_{\text{ср}} \sim n^{-1/3}$) и l — средняя длина свобод-

ного пробега $(l \sim 1/nr_0^2)$. При этом для разреженного газа выполняются неравенства

$$r_0 \ll r_{ср} \ll l. \qquad (1.5.1)$$

Из трех параметров лишь два независимы (например, r_0, $r_{ср}$). Ими определяется безразмерный параметр — *параметр плотности*

$$\varepsilon = nr_0^3. \qquad (1.5.2)$$

Условие разреженного газа выражается соотношением

$$\varepsilon = nr_0^3 \ll 1. \qquad (1.5.3)$$

Параметр плотности характеризует взаимодействие частиц. При $\varepsilon = 0$ частицы не взаимодействуют, не сталкиваются, так как при этом эффективное сечение равно нулю. Взаимодействие атомов играет двоякую роль.

Во-первых, оно определяет вклад взаимодействия в термодинамические функции. Например, для модели упругих шаров давление разреженного газа определяется выражением

$$p = p_{ид}(1 + nb). \qquad (1.5.4)$$

Здесь $p_{ид}$ — давление идеального газа, $b = 2\pi r_0^3/3$ — константа Ван дер Ваальса. Мы видим, что вклад в давление, обусловленный взаимодействием, пропорционален параметру плотности. Давление отлично от нуля и в нулевом приближении по параметру плотности ε. Оно совпадает с давлением идеального газа $p_{ид}$.

В кинетическом уравнении Больцмана вклад взаимодействия в термодинамические функции (недиссипативные характеристики) не учитывается.

Таким образом, при определении недиссипативных характеристик используется нулевое приближение по ε. В этом смысле уравнение Больцмана справедливо только для идеального газа. Кинетические уравнения для неидеального газа рассмотрены в работах (*Климонтович*, 1971 (2), 1973, II).

Во-вторых, роль взаимодействия проявляется при описании диссипативных процессов, определяющих, в частности, установление равновесного состояния в изолированной системе.

Характерное время установления *локального равновесия* для газа Больцмана — время релаксации $\tau_{рел}$ определяется временем свободного пробега при парных столкно-

вениях $\tau = l/V_т$, а длина релаксации $l_{рел}$ — длиной свободного пробега l. Таким образом,

$$l_{рел} \sim l \sim r_0/\varepsilon, \quad \tau_{рел} \sim l/V_т \sim r_0/V_т\varepsilon. \qquad (1.5.5)$$

Здесь использовано определение параметра плотности $= nr_0^3$.

Поскольку размер атома r_0 — фиксированный параметр, то в нулевом приближении по параметру плотности время и длина релаксации равны бесконечности. Таким образом, процесс установления локального равновесия — процесс релаксации на кинетическом этапе, не может быть описан в нулевом приближении по параметру плотности. Здесь необходим учет вкладов первого порядка по ε.

1.5.2. Кинетическое уравнение Больцмана для статистического распределения. Известны два существенно различных вывода кинетического уравнения Больцмана для разреженного газа.

Первый принадлежит самому Больцману. Он основан на модели парных столкновений и *на гипотезе молекулярного хаоса*. Этой гипотезе можно дать математическую трактовку, если воспользоваться сглаженными функциями $\tilde{f}$, $\tilde{f}_N$ и приведенным выше определением ансамбля Гиббса.

Диссипативные процессы в кинетическом уравнении описываются так называемым «интегралом столкновений» Больцмана. Он определяется балансом столкновений двух типов: увеличивающих и уменьшающих, соответственно, долю частиц с данным импульсом. Оба процесса, согласно Больцману, пропорциональны произведению одночастичных функций распределения. В этом заключалась его гипотеза молекулярного хаоса.

Более естественно, казалось бы, предположить, что оба вклада в интеграл столкновений пропорциональны двухчастичным распределениям, так как речь идет о столкновениях пар частиц. При этом, однако, мы не пришли бы к замкнутому уравнению для одночастичного распределения — к кинетическому уравнению. В чем же тогда сущность гипотезы Больцмана и какова ее математическая модель?

После сглаживания по физически бесконечно малому объему $V_ф$ (или $\tau_ф$) существуют две двухчастичные функции распределения:

$$\tilde{f}_2(x, x', t); \; f_2(x, x', t) = \langle \tilde{f}_2(x, x', t) \rangle. \qquad (1.5.6)$$

Первая возникает при сглаживании по V_Φ соответствующего динамического распределения $f_2^{(д)}(x, x', t)$, а вторая при дополнительном усреднении по ансамблю Гиббса. Имеются, таким образом, и две возможности математического представления гипотезы Больцмана о молекулярном хаосе.

1. Пренебрежение в интеграле столкновений корреляциями для сглаженного распределения $\tilde{f}_2$:

$$\tilde{f}_2(x, x', t) = \tilde{f}(x, t)\tilde{f}(x', t). \qquad (1.5.7)$$

2. Пренебрежение в интеграле столкновений корреляциями в усредненном по ансамблю Гиббса двухчастичном распределении:

$$f_2(x, x', t) = \langle \tilde{f}_2(x, x', t)\rangle = f(x, t)f(x', t). \qquad (1.5.8)$$

Эти два математических выражения гипотезы Больцмана (7) и (8) являются частными случаями более общих выражений, соответственно, (4.12), (2.8) для N-частичных распределений $\tilde{f}_N(X, t)$, $f_N(X, t)$.

Равенство (8) является более жестким, так как оно означает пренебрежение корреляциями всех масштабов. Равенство же (7) предполагает лишь пренебрежение мелкомасштабными корреляциями с характерными масштабами (4.15), крупномасштабные же корреляции учитываются. Это видно из того, что при усреднении равенства (7) по ансамблю Гиббса вместо (8) получим более общее соотношение

$$f_2(x, x', t) = \langle \tilde{f}_2(x, x', t)\rangle = \langle \tilde{f}(x, t)\tilde{f}(x', t)\rangle,$$

которое отличается от (8) учетом двухчастичных корреляций

$$\tilde{g}_2(x, x', t) = \langle \tilde{f}(x, t)\tilde{f}(x', t)\rangle - f(x, t)f(x', t).$$

Остается вопрос: почему все же можно пренебречь мелкомасштабными корреляциями, т. е. использовать равенство (7) вместо точного равенства для динамических распределений (ср. с (4.11))

$$f_2^{(д)}(x, x', t) = f^{(д)}(x, t)f^{(д)}(x', t)?$$

Ответ состоит в следующем. Уравнение для динамического распределения $f^{(д)}$ (см. 2.1) является прямым следствием обратимых уравнений движения частиц газа — уравнений Гамильтона и поэтому также обратимо. Уравнение же для функции $\tilde{f}$ (оно будет здесь приведено) является необратимым из-за потери информации о дви-

жении частиц газа вследствие усреднения по объему $V_ф$. При выводе этого уравнения уже учтены мелкомасштабные корреляции. Именно они и определяют интеграл столкновений.

Этим и оправдано использование равенства (7) при получении кинетического уравнения. В нем пренебрегли корреляциями, которые уже учитываются в самих столкновениях, определяющих интеграл столкновений в уравнении для функции $\tilde{f}$ (см. (5.18)—(5.20)).

Заметим, что Больцман фактически формулировал гипотезу молекулярного хаоса в виде (8). В результате он получил кинетическое уравнение для детерминированного (неслучайного) распределения $f(x, t)$, т. е. уравнение механики сплошной среды в 6-мерном фазовом пространстве.

Из уравнения Больцмана в свою очередь вытекают уравнения гидродинамики — уравнения механики сплошной среды для детерминированных гидродинамических функций. Как известно, уравнения механики сплошной среды имеют широкую область применимости, однако существуют многочисленные явления, которые невозможно описать с помощью этих уравнений. Это, например, броуновское движение, рассеяние света и, наконец, турбулентное движение. В связи с этим мы будем использовать более общую трактовку гипотезы Больцмана, которая выражается равенством (7), и соответствующее кинетическое уравнение для сглаженной (пульсирующей) функции распределения $\tilde{f}(x, t)$. При переходе к гидродинамическому приближению из кинетического уравнения для функции $\tilde{f}$ вытекают уравнения гидродинамики для пульсирующих гидродинамических функций $\tilde{\rho}(r, t)$, $\tilde{u}(r, t)$, $\tilde{T}(r, t)$. С помощью этих уравнений можно описать гидродинамические флуктуации. Они же могут служить исходными при построении теории турбулентности. Тем самым перекидывается мост между гипотезой Больцмана и гипотезой Рейнольдса в теории гидродинамической турбулентности.

Обратимся теперь к работам по динамическому обоснованию кинетического уравнения Больцмана. Начало было положено работой Ж. Ивона в 1935 г. Основные результаты были получены, однако, лишь в 1946 г. в работах Н. Н. Боголюбова, М. Борна и Х. Грина, Дж. Кирквуда. Наиболее глубокий анализ проблемы дан в работе (*Боголюбов*, 1946). Обзор более поздних работ имеется в книге (*Гуров*, 1966) и в сборнике (*Любовиц*, *Монтрол* (ред.), 1986).

Основой служит уравнение Лиувилля для статистического распределения (4.1), которое является обратимым. Из него вытекает цепочка обратимых уравнений для последовательности функций распределения: одночастичной $f_1 \equiv f(x, t)$, двухчастичной, $f_2(x, x', t)$ и т. д.— система уравнений Боголюбова, Борна, Грина, Кирквуда, Ивона (ББГКИ). Решение этих уравнений с целью получения кинетического уравнения Больцмана проводится в первом приближении по параметру плотности при расчете диссипативных процессов и в нулевом приближении при расчете недиссипативных вкладов (приближение идеального газа по термодинамическим функциям).

Переход от динамических обратимых уравнений Боголюбова (ББГКИ) к необратимому уравнению Больцмана производится путем использования условия ослабления начальных корреляций частиц газа.

Условие ослабления начальных корреляций формулируется в разных работах несколько отличными способами. Наиболее четко в математическом отношении оно было сформулировано Н. Н. Боголюбовым. Будем называть его *условием полного ослабления начальных корреляций* (условием Боголюбова). Оно эквивалентно гипотезе Больцмана о молекулярном хаосе в форме (8) (но не в форме (7)!).

Тем самым условие Боголюбова содержит неявное допущение о пренебрежении крупномасштабными (кинетическими, гидродинамическими, диффузионными) флуктуациями. Именно благодаря этому путем приближенного решения цепочки уравнений ББГКИ удается получить замкнутое необратимое кинетическое уравнение Больцмана для статистического распределения $f(x, t)$, т. е. уравнение механики сплошной среды в 6-мерном фазовом пространстве.

Схема вывода этого уравнения Больцмана, предложенная в работах (*Кирквуд*, 1946, 1947), несколько отличается от схемы Н. Н. Боголюбова. Кирквуд использовал сглаживание по малому временному интервалу. Однако в явном виде (в соответствии со структурой разреженного газа) не было дано определение величин $V_ф$, $\tau_ф$; вследствие этого процесс сглаживания не был определен достаточно четко. В результате все свелось к уравнению для статистического распределения $f(x, t)$.

Вывод кинетического уравнения Больцмана на основе уравнений Боголюбова (ББГКИ) подробно обсуждается во многих работах (*Боголюбов*, 1946; *Гуров*, 1966; *Лиф-*

шиц, *Питаевский*, 1979; *Климонтович*, II, IV). Приведем сразу результат — замкнутое уравнение для одночастичной функции распределения. Для дальнейшего уравнение Больцмана удобно записать в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}(\mathbf{r}, t)\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = I_{\text{Б}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t),$$

$$V^{-1}\int f\, d\mathbf{r}\, d\mathbf{p} = 1. \qquad (1.5.9)$$

Левая часть уравнения определяет изменение функции f вследствие перемещения частиц и действия средней силы $\mathbf{F}$, которая связана с функцией распределения f равенством

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_0 - n\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\int \Phi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t)\, d\mathbf{r}'\, d\mathbf{p}'. \qquad (1.5.10)$$

Здесь $\mathbf{F}_0$ — внешняя сила. Второй член — средняя сила, определяемая одночастичным распределением f. Впервые такого рода сила введена в работах А. А. Власова по теории плазмы (*Власов*, 1938); назовем ее силой Власова. Для разреженного газа эта сила, как правило, пренебрежимо мала.

Член в правой части уравнения (9) определяет изменение функции распределения за счет той «части» взаимодействия, которая приводит к диссипации. Поскольку взаимодействие в разреженном газе сводится к столкновениям, то интеграл в правой части уравнения (9), определяющий диссипацию из-за столкновений, принято называть *интегралом столкновений Больцмана*. Без учета этого вклада, т. е. при $I_{\text{Б}} = 0$, уравнение (9) остается обратимым.

В результате столкновений, как мы уже отмечали, происходит как увеличение, так и уменьшение средней доли числа частиц в момент t в точке $\mathbf{r}$, т. е. функции распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$. Явное выражение для интеграла столкновений Больцмана может быть представлено в виде (ниже $\mathbf{p}_1 \equiv \mathbf{p}$)

$$I_{\text{Б}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1, t) = n\int_0^\infty \rho\, d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \int d\mathbf{p}_2\, |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2| \times$$

$$\times\left[f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1', t) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_2', t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_2, t)\right]. \qquad (1.5.11)$$

Чтобы выразить импульсы $\mathbf{p}_1'$, $\mathbf{p}_2'$ через $\mathbf{p}_1$, $\mathbf{p}_2$, надо учесть законы сохранения импульса и кинетической энергии при

столкновениях пар частиц:

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_2', \qquad \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} = \frac{\mathbf{p}_1'^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2'^2}{2m}. \quad (1.5.12)$$

Четыре уравнения (12) позволяют найти соотношения $\mathbf{p}_{1,2}' = \mathbf{p}_{1,2}'(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \theta, \varphi)$, в которые входят еще два параметра: угол рассеяния θ и угол φ цилиндрической системы координат с осью z вдоль относительной скорости сталкивающихся частиц $\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$. Зависимость прицельного расстояния ρ от угла рассеяния найдем путем решения уравнений движения двух частиц. Переменные $\mathbf{r}$, t входят в интеграл столкновений лишь как параметры.

Подстановка (11) в (9) и приводит к замкнутому уравнению для функции распределения $f(x, t)$ — кинетическому уравнению Больцмана. В тех случаях, когда средняя сила является существенной, выражения (9)—(11) составляют уравнение Больцмана — Власова.

Интеграл столкновений Больцмана обладает замечательными свойствами:

$$\int \varphi(\mathbf{p}) I_{\text{Б}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)\, d\mathbf{p} = 0 \quad \text{при} \quad \varphi = 1,\ \mathbf{p},\ \mathbf{p}^2/2m; \quad (1.5.13)$$

$$\int \varphi(\mathbf{p}) I_{\text{Б}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)\, d\mathbf{p} \geqslant 0 \quad \text{при} \quad \varphi = -k \ln f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (1.5.14)$$

Свойство (13) обеспечивает выполнение законов сохранения плотности числа частиц, плотности импульса и плотности кинетической энергии разреженного (в термодинамическом смысле идеального) газа. Для неидеального газа свойства интеграла столкновений (13) существенно изменяются (*Климонтович*, 1971 (2), 1973, II).

Свойство (14) используется при доказательстве Н-теоремы Больцмана о монотонном возрастании энтропии в изолированном разреженном газе при релаксации к равновесному состоянию (см. 1.8).

Определим теперь в явном виде *физически бесконечно малые масштабы для газа Больцмана.* Это позволит нам сформулировать более общее уравнение Больцмана для сглаженного (пульсирующего) распределения $\tilde{f}(x, t)$, откроет путь для учета крупномасштабных флуктуаций.

Поскольку разреженный однокомпонентный газ характеризуется лишь одним безразмерным параметром плотности $\varepsilon = nr_0^3$, то через него должна определяться и связь бесконечно малых масштабов l_Φ, τ_Φ с характерными масштабами газа l, τ; r_0, τ_0.

Обозначим через N_Φ среднее число частиц в объеме V_Φ и определим интервал τ_Φ равенством

$$\tau_\Phi = \tau/N_\Phi, \qquad N_\Phi = nV_\Phi \approx nl_\Phi^3. \tag{1.5.15}$$

Таким образом, по определению τ_Φ — интервал, через который сталкивается одна, но *любая*, из частиц N_Φ в объеме V_Φ. Добавим к (15) равенство, связывающее l_Φ, τ_Φ через тепловую скорость:

$$l_\Phi = \tau_\Phi V_\text{т}. \tag{1.5.16}$$

Из соотношений (15), (16) находим искомые выражения (*Климонтович*, 1971 (2), 1973, II — IV)

$$\tau_\Phi = \varepsilon^{1/2}\tau \ll \tau, \quad l_\Phi = \varepsilon^{1/2} l \ll l, \quad N_\Phi = \varepsilon^{-1/2} \gg 1, \quad \varepsilon \ll 1. \tag{1.5.17}$$

В силу условия $\varepsilon \ll 1$ выполняются требования, которые накладываются при определении масштабов l_Φ, τ_Φ и величины N_Φ.

Для состояний, далеких от равновесия, например при сверхзвуковых течениях, наряду с (16) целесообразно использовать и другие соотношения между параметрами l_Φ, τ_Φ. Этим мы хотим еще раз подчеркнуть, что выбор физически бесконечно малых масштабов не может быть универсальным! Он определяется принятым уровнем описания, свойствами рассматриваемой системы и целями исследования.

1.5.3. Кинетическое уравнение Больцмана для сглаженного распределения. В силу условия $N_\Phi \gg 1$ есть основание использовать уравнение Больцмана не для функции $f = \langle \tilde{f} \rangle$, а для самой сглаженной функции распределения $\tilde{f}(x, t)$. Оно совпадает по форме с уравнениями (9) — (11). Таким образом, приходим к уравнению

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t)\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right)\tilde{f}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = I_\text{Б}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t),$$
$$V^{-1}\int \tilde{f}\, d\mathbf{r}\, d\mathbf{p} = 1. \tag{1.5.18}$$

Здесь

$$\tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{F}_0 - n\frac{\partial}{\partial r}\int \Phi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)\tilde{f}(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t)\, d\mathbf{r}'\, d\mathbf{p}'; \tag{1.5.19}$$

$$I_\text{Б}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = n\int_0^\infty \rho\, d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \int d\mathbf{p}_2\, |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2| \times$$
$$\times \left[\tilde{f}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1', t)\tilde{f}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_2', t) - \tilde{f}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1, t)\tilde{f}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_2, t)\right], \tag{1.5.20}$$

которые могут быть исходными для усреднения по ансамблю Гиббса.

Поскольку уравнение (18) и выражение (20) являются нелинейными относительно случайных — пульсирующих функций $\tilde{f}$, $\tilde{F}$, то в результате усреднения мы приходим к цепочке зацепляющихся уравнений для моментов, или соответствующих функций распределения. В отличие от уравнений Боголюбова (ББГКИ) эта новая последовательность уравнений является диссипативной. Диссипация возникает вследствие сглаживания по физически бесконечно малому объему $V_ф$. Таким образом, причина появления необратимости — потеря информации о микроскопическом состоянии частиц в пределах объема $V_ф$. В обосновании такой процедуры сглаживания существенную роль, как мы сейчас увидим, играет динамическая неустойчивость движения атомов газа Больцмана.

Как мы видели, кинетическая теория газов традиционно строится без привлечения основных понятий динамической теории — понятий *динамической неустойчивости*, *динамического хаоса*, *К-энтропии*, *перемешивания*. Покажем, что использование этих понятий позволяет более полно выявить причины возникновения необратимости в динамической системе — системе атомов газа Больцмана, подтвердить обоснованность вывода необратимого кинетического уравнения Больцмана для функций f, $\tilde{f}$.

Первые шаги в этом направлении сделаны в известных работах Н. С. Крылова (*Крылов*, 1950), посвященных обоснованию статистической физики. Значение динамической неустойчивости движения в обосновании необратимых уравнений статистической теории обсуждается в работах (*Пригожин*, 1985; *Пригожин* и *Стенгерс*, 1986, 1988).

Проведем простейшие количественные оценки, позволяющие связать введенный нами временной интервал $\tau_ф$, принятый за физически бесконечно малый, с минимальным временем развития динамической неустойчивости (*Климонтович*, 1987).

Движение атомов-шариков в газе Больцмана, как и шаров в биллиарде Синая, является динамически неустойчивым. Для выделенного атома время развития неустойчивости или, иными словами, характерное время экспоненциального разбегания близких в начальный момент траекторий двух шаров порядка времени свободного

пробега (*Романовский, Степанова, Чернавский*, 1984), т. е.

$$\tau_{\text{неуст}} \sim \tau. \qquad (1.5.21)$$

Эта оценка относится к траектории одного выделенного атома. Примем во внимание, что при сглаживании по физически бесконечно малому объему V_Φ все N_Φ частиц в нем являются равноправными. С учетом этого, наряду с интервалом $\tau_{\text{неуст}}$, можно ввести характерное время развития неустойчивости движения одной, но *любой*, из частиц в объеме V_Φ. Обозначим его через $(\tau_{\text{неуст}})_\Phi$. Оно в N_Φ раз меньше $\tau_{\text{неуст}}$, и следовательно, с учетом определения (21) приходим к следующей оценке минимального характерного времени развития динамической неустойчивости движения атомов газа Больцмана:

$$(\tau_{\text{неуст}})_\Phi \sim \tau_\Phi. \qquad (1.5.22)$$

Таким образом, характерное время развития неустойчивости движения в расчете на одну (любую) из частиц в объеме V_Φ порядка физически бесконечно малого временного интервала τ_Φ. Это и служит дополнительным аргументом в пользу сделанного нами определения τ_Φ.

Для дальнейшего существенно следующее.

Динамическая неустойчивость движения атомов-шариков газа Больцмана ведет к перемешиванию и способствует, тем самым, возможности перехода от обратимых микроскопических уравнений движения — уравнений Гамильтона для атомов — к гораздо более простому уравнению Больцмана для сглаженной функции распределения $\tilde{f}(x, t)$. В этом и проявляется конструктивная роль динамической неустойчивости движения при формулировке статистической теории неравновесных процессов.

Макроскопические характеристики, например функция распределения $\tilde{f}$, которые получаются путем сглаживания по объему V_Φ соответствующих микроскопических характеристик, можно назвать **функциями порядка**, так как они выявляют — описывают более упорядоченное движение на фоне молекулярного — хаотического движения. Иными словами, они выявляют **статистические закономерности**. Классическим примером статистической закономерности может служить распределение Максвелла.

Приведенной иллюстрацией для газа Больцмана конструктивная роль динамической неустойчивости, разумеется, не исчерпывается. Действительно, в статистической теории динамическая неустойчивость может иметь место

не только для атомов, т. е. для микроскопических элементов, но и для макроскопических характеристик рассматриваемой системы. Такая неустойчивость впервые была обнаружена на примере модельных уравнений тепловой конвекции в жидкости — уравнений Лоренца (*Лоренц*, 1963). Примером физически реализуемой системы, в которой при достаточно больших значениях обратной связи проявляется динамическая неустойчивость макроскопических характеристик, является генератор электрических колебаний с инерционной нелинейностью (*Анищенко*, *Астахов*, 1983; *Анищенко*, 1986) (см. 5.2).

В связи с изложенной точкой зрения на конструктивную роль динамической неустойчивости движения атомов газа Больцмана возникают, естественно, вопросы. Может ли быть конструктивной динамическая неустойчивость движения макроскопических характеристик? Ведут ли такого рода неустойчивости к появлению более совершенных диссипативных структур или к «динамическому хаосу»? Каково соотношение физического и динамического хаосов?

Для ответа на эти вопросы и нужна мера относительной степени упорядоченности, организованности (или, напротив, хаотичности) неравновесных состояний в открытых системах. В качестве такой меры, в частности, будет использована энтропия Больцмана — Гиббса — Шеннона, перенормированная к заданному значению средней эффективной энергии — эффективной функции Гамильтона открытой системы. Количественная оценка относительной степени упорядоченности будет проводиться на основе S-теоремы. С ее помощью будет контролироваться правильность выбора управляющих параметров и после этого количественно оцениваться относительная степень упорядоченности. Будет также обсуждаться вопрос об оптимизации поиска наиболее упорядоченных состояний в пространстве управляющих параметров открытых систем.

Основываясь на критериях относительной степени упорядоченности, мы покажем на ряде примеров, что процессы самоорганизации возможны и при наличии динамической неустойчивости движения макроскопических характеристик открытых систем. Прежде, однако, продолжим рассмотрение ряда общих вопросов статистической теории открытых систем.

Начнем с вопроса о новых возможностях, которые открываются при переходе от уравнений в приближении

сплошной среды к уравнениям для сглаженных (пульсирующих) распределений $\tilde{f}$. Естественно продемонстрировать эти новые возможности на примере разреженного газа — газа Больцмана.

1.6. Роль неравновесных флуктуаций в газе Больцмана. Молекулярные и турбулентные источники флуктуаций

При выводе кинетического уравнения Больцмана (5.9)—(5.11) для одночастичной функции распределения $f(x, t)$ использовались *условие полного ослабления начальных корреляций* — условие Боголюбова, а в интеграле столкновений — равенство (5.8), которое является математическим выражением гипотезы Больцмана о молекулярном хаосе.

При условии Боголюбова предполагается, что крупномасштабные флуктуации с характерными масштабами (4.14) не играют существенной роли — пренебрежимо малы. Только при этом и можно использовать кинетическое уравнение Больцмана для усредненного по ансамблю распределения $f(x, t)$ вместо более общего уравнения (5.18) для сглаженного распределения $\tilde{f}(x, t)$.

Пренебрежение крупномасштабными — кинетическими и, следовательно, гидродинамическими и диффузионными флуктуациями приводит к существенному ограничению теории. При этом, как уже отмечалось, выпадают из рассмотрения такие фундаментальные явления, как броуновское движение (оно не может существовать в сплошной среде), рассеяние волн на флуктуациях функции распределения δf, а также турбулентное движение, так как оно определяется пульсациями распределения $\tilde{f}$.

Чтобы включить в рассмотрение и кинетические флуктуации, необходимо при выводе кинетического уравнения заменить условие полного ослабления начальных корреляций — условие Боголюбова *условием частичного ослабления начальных корреляций* (*Климонтович*, 1971 (1), II — IV). Это означает, что ослабляются лишь мелкомасштабные корреляции с характерными масштабами (4.15). При этом вместо кинетических уравнений (5.9)—(5.11) для распределения f надо использовать уравнение Больцмана (5.18) для сглаженного распределения $\tilde{f}$. Напомним, что использование кинетического уравнения для сглаженного распределения $\tilde{f}$ соответствует в интеграле

столкновений пренебрежению корреляциями лишь для сглаженных распределений, т. е. условию (5.7). В такой форме гипотеза Больцмана о молекулярном хаосе является существенно менее ограничительной, чем в форме (5.8), принятой в теории Боголюбова — Борна — Грина — Кирквуда — Ивона.

Проведем в уравнении (5.18) усреднение по ансамблю Гиббса. Введем обозначения для крупномасштабных флуктуаций

$$\delta\tilde{f} = \tilde{f} - f, \qquad \delta\tilde{\mathbf{F}} = \tilde{\mathbf{F}} - \mathbf{F} \tag{1.6.1}$$

и используем тождество

$$\langle\tilde{\mathbf{F}}\tilde{f}\rangle = \mathbf{F}f + \langle\delta\tilde{\mathbf{F}}\delta\tilde{f}\rangle.$$

Введем также определение сглаженной корреляционной функции:

$$\langle\delta\tilde{f}\delta\tilde{f}\rangle_{x,x',t} = \\ = n^{-1}\left(\delta(x-x')f(x,t) - V^{-1}f(x,t)f(x',t)\right) + \tilde{g}_2(x,x',t). \tag{1.6.2}$$

При усреднении интеграла столкновения (5.20) под интегралом возникает дополнительный, помимо произведения одночастичных распределений f, член, описывающий двухчастичную корреляцию $\tilde{g}_2$. Оценим роль этого вклада. Поскольку область интегрирования по координатам $\mathbf{r}$ (по прицельному расстоянию ρ) порядка $r_0^3 = V_0$ и истинная (не сглаженная по объему V_Φ) корреляция g_2 в этой области порядка единицы, то

$$\tilde{g}_2 = \int\limits_{V_0} (g_2(\mathbf{r})/V_\Phi)\, d\mathbf{r} \sim r_0^3/V_\Phi \sim \varepsilon/N_\Phi \sim \varepsilon^{3/2} \ll 1.$$

На этом основании можно отбросить член с $\tilde{g}_2$ в усредненном выражении (5.20). Тогда интеграл (5.20) в этом приближении после усреднения по ансамблю Гиббса совпадает с интегралом столкновений Больцмана (5.11).

В результате приходим к следующему уравнению для функции f:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}(\mathbf{r},t)\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = I_{\text{B}} + \tilde{I}, \tag{1.6.3}$$

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_0 - n\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\int \Phi(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)\, f(\mathbf{r}',\mathbf{p}',t)\, d\mathbf{r}'\, d\mathbf{p}'. \tag{1.6.4}$$

Уравнение (3) отличается от уравнения Больцмана (5.18) наличием в правой части дополнительного «интеграла столкновений» $\tilde{I}$, который определяется коррелятором крупномасштабных флуктуаций:

$$\tilde{I} = -\frac{\partial}{\partial p}\langle \delta\tilde{\mathbf{F}}\delta\tilde{f}\rangle. \qquad (1.6.5)$$

Флуктуации $\delta\tilde{\mathbf{F}}$, $\delta\tilde{f}$ связаны уравнением

$$\delta\tilde{\mathbf{F}} = -n\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\int \Phi(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)\,\delta\tilde{f}(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t)\,d\mathbf{r}'\,d\mathbf{p}'. \qquad (1.6.6)$$

Таким образом, при учете крупномасштабных флуктуаций уравнение для одночастичного распределения $f = \langle\tilde{f}\rangle$ уже не является замкнутым. Уравнение Больцмана справедливо лишь в нулевом приближении по крупномасштабным флуктуациям, когда интеграл $\tilde{I} = 0$.

Систему уравнений (3)—(5) следует дополнить уравнением для флуктуаций $\delta\tilde{f}$. Это уравнение получается путем вычитания (3) из (5.18). Оно нелинейно по $\delta\tilde{\mathbf{F}}$, $\delta\tilde{f}$. Вследствие этого полученное с его помощью уравнение для второго момента $\langle\delta\tilde{f}\delta\tilde{f}\rangle$ содержит третий момент и т. д. В результате возникает бесконечная последовательность уравнений для моментов высших порядков. Ситуация аналогична той, которая имеет место при усреднении уравнения Навье — Стокса в гидродинамике.

Следовательно, как и в теории гидродинамической турбулентности (гл. 6), в кинетической теории при учете крупномасштабных флуктуаций возникает *проблема замыкания* — обрыва бесконечной последовательности уравнений для моментов пульсирующих функций.

Рассмотрим простейший пример замыкания, основанный на предположении малости крупномасштабных флуктуаций $\delta\tilde{f}$, $\delta\tilde{\mathbf{F}}$. Оно оправдано тем, что в объеме сглаживания V_Φ находится много частиц, т. е. выполняется условие $N_\Phi \gg 1$. Надо иметь в виду, что это условие необходимо, но еще недостаточно в общем случае для условия малости флуктуаций в открытых системах, в частности вблизи критических точек (гл. 5).

Итак, примем условие малости флуктуаций и в уравнении для $\delta\tilde{f}$ оставим лишь линейные по флуктуациям члены. В результате уравнение для второго момента $\langle\delta\tilde{f}\delta\tilde{f}\rangle_{x,x',t}$ (через него с помощью уравнения (6) выражается и коррелятор $\langle\delta\tilde{F}\delta\tilde{f}\rangle$) не содержит высших моментов и может быть представлено в виде (*Климонтович*, II,

гл. 4, уравнение (22.21))

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}+\mathbf{v}'\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'}+\mathbf{F}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}+\mathbf{F}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'}+\delta\widehat{I}_{\mathbf{p}}+\delta\widehat{I}_{\mathbf{p}'}\right)\langle\delta\tilde{f}\delta\tilde{f}\rangle_{x,x',t}+$$
$$+\langle\delta\tilde{\mathbf{F}}\delta\tilde{f}\rangle_{\mathbf{r},x't}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}}+\langle\delta\tilde{f}\delta\tilde{\mathbf{F}}\rangle_{x,\mathbf{r}',t}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}'}=n^{-2}A(x,x',t). \quad (1.6.7)$$

Здесь в левой части введено обозначение для линеаризованного оператора столкновений $\delta\widehat{I}_{\mathbf{p}}$. Его действие на произвольную функцию $F(\mathbf{p})$ определяется структурой линеаризованного интеграла столкновений Больцмана (5.11)

$$\delta\widehat{I}_{\mathbf{p}_1}F(\mathbf{p}_1)=-n\int_0^\infty \rho\, d\rho\int_0^{2\pi} d\varphi\int d\mathbf{p}_2\,|\mathbf{v}_1-\mathbf{v}_2|\times$$
$$\times\left[f(\mathbf{p}_1')F(\mathbf{p}_2')+F(\mathbf{p}_1')f(\mathbf{p}_2')-f(\mathbf{p}_1)F(\mathbf{p}_2)-F(\mathbf{p}_1)f(\mathbf{p}_2)\right]_{\mathbf{r},t}. \quad (1.6.8)$$

В это определение введен знак минус с целью подчеркнуть диссипативный характер интеграла столкновений.

Член, стоящий в правой части уравнения (7) для коррелятора флуктуаций, назовем **источником**, так как он может быть представлен в виде действия линейных операторов на одночастичную функцию распределения f (*Климонтович*, II). В отсутствие источника уравнение (7) становится однородным и имеет нулевое установившееся решение.

Источник $A(x, x', t)$ представляется в виде суммы двух вкладов (*Климонтович*, II)

$$A(x,x',t)=A_{\text{Б}}(x,x',t)+\tilde{A}(x,x',t). \quad (1.6.9)$$

Эти два вклада определяют *двойную «надстройку»* над уравнением Больцмана при учете крупномасштабных флуктуаций (*Климонтович*, 1983 (1), II—IV).

Первый «этаж» надстройки характеризуется источником $A_{\text{Б}}$, который учитывает атомарную структуру среды. В приближении сплошной среды он равен нулю. Атомарность среды проявляется в том, что процесс столкновений не является непрерывным, а представляет собой *дробовой эффект*.

Поскольку наличие источника $A_{\text{Б}}$ есть следствие атомарной (или молекулярной) структуры среды, то его можно назвать **молекулярным**. Он определяется как

$$A_{\text{Б}}=[(\delta\widehat{I}_{\mathbf{p}}\widehat{I}_{\mathbf{p}'})-(\delta\widehat{I}_{\mathbf{p}}+\delta\widehat{I}_{\mathbf{p}'})_0]\times$$
$$\times n\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')f(\mathbf{r},\mathbf{p},t) \quad (1.6.10)$$

и тем самым выражается через одночастичное распределение. Индекс «0» у второго члена в квадратных скобках означает, что операторы столкновений действуют только на функцию распределения (не действуют на δ-функцию $\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$).

Второй «этаж» надстройки определяется вкладом крупномасштабных флуктуаций, не связанных непосредственно с молекулярной структурой рассматриваемой системы. Он определяется источником $\tilde{A}$, который можно назвать **турбулентным**, и выражается через интеграл $\tilde{I}$ и распределение f (*Климонтович*, II)

$$\tilde{A} = n\{\delta(x-x')\tilde{I}(x, t) - \\ - V^{-1}[\tilde{I}(x, t)f(x', t) + \tilde{I}(x', t)f(x, t)]\}. \quad (1.6.11)$$

В разных ситуациях роль источников $A_{\text{в}}$, $\tilde{A}$, разумеется, неодинакова. Так, например, можно выделить широкий класс задач, когда крупномасштабные флуктуации, определяющие интеграл $\tilde{I}$ и турбулентный источник $\tilde{A}$, пренебрежимо малы. В этом случае уравнение (5.18) совпадает с уравнением Больцмана. Вследствие этого расчет распределения $f(\underset{\sim}{x}, \underset{\sim}{t})$ производится независимо от расчета флуктуаций $\delta\tilde{f}$, $\delta\tilde{\mathbf{F}}$.

По известному решению уравнения Больцмана согласно (9) можно найти источник $A_{\text{в}}$ и, следовательно, путем решения уравнения (7) произвести расчет крупномасштабных флуктуаций $\delta\tilde{f}$, $\delta\tilde{\mathbf{F}}$, определяемых атомарностью среды. Именно такого рода флуктуации и определяют такие явления, как броуновское движение и молекулярное рассеяние света. Проблемам теории броуновского движения посвящена гл. 4.

Практически очень важен и другой предельный случай, когда турбулентный источник является доминирующим над молекулярным. В этом случае характер крупномасштабных флуктуаций не зависит явно от атомарной структуры среды. Следует, однако, иметь в виду, что разделение источника на молекулярный и турбулентный оправдано лишь вдали от критической точки возникновения турбулентности. В критической — переходной области играют роль оба источника. Вернемся к этому вопросу в гл. 6, посвященной описанию турбулентного движения.

Рассмотрим теперь другой путь построения теории кинетических флуктуаций. Он основан на диссипативных кинетических уравнениях для N-частичных функций распределения.

1.7. Кинетические уравнения для N-частичных функций распределения. Уравнение Леонтовича

Итак, мы рассмотрели два уровня кинетического описания неравновесных процессов в разреженном газе: на основе уравнения Больцмана для статистического распределения $f(x, t)$ и более общего уравнения Больцмана для сглаженного распределения $\tilde{f}(x, t)$. Второе уравнение, как мы видели, может быть использовано и для описания кинетических флуктуаций.

Первой работой, посвященной расчету кинетических флуктуаций на основе уравнения Больцмана, является, по-видимому, работа (*Кадомцев*, 1957). Вместо метода моментов, описанного в 1.6, в ней использован эквивалентный метод Ланжевена. Мы обсудим этот метод в гл. 4, посвященной теории броуновского движения. В работе (*Кадомцев*, 1957) рассматривались флуктуации в равновесном газе, т. е. флуктуации, обусловленные атомарной структурой среды.

Значительно раньше, в 1935 г. была опубликована замечательная работа М. А. Леонтовича «Основные уравнения кинетической теории газов с точки зрения теории случайных процессов», в которой фактически уже были заложены основы кинетической теории флуктуаций, но на основе иного подхода, а именно диссипативного кинетического уравнения для N-частичной функции распределения.

Работа М. А. Леонтовича появилась до работ Ландау, Власова, Боголюбова, Борна, Грина, Кирквуда, посвященных кинетической теории (в частности, обоснованию кинетического уравнения Больцмана), но не затрагивающих вопросы кинетической теории флуктуаций.

Ко времени написания работы М. А. Леонтовича основным и единственным уравнением кинетической теории было уравнение Больцмана. М. А. Леонтович, по-видимому, впервые четко и ясно отметил недостаточность такой теории, в которой основой служит уравнение для детерминированного (неслучайного) распределения. Таким образом, уравнение Больцмана отвечает приближению среды и не описывает флуктуаций распределения.

Сложилась удивительная ситуация. В классических работах Рэлея, Планка, Эйнштейна, Смолуховского было показано, что даже в равновесном состоянии флуктуации макроскопических характеристик играют принципиальную роль (например, в теории броуновского движения,

молекулярного рассеяния света и т. д.). Тем не менее кинетическая теория — теория неравновесных состояний, в которых, казалось бы, флуктуации должны играть существенную роль, не включала последние в «круг своих интересов».

Работа Леонтовича оказалась, к сожалению, практически забытой (см. *Климонтович*, УФН, 1983). Независимо, но значительно позднее, диссипативные кинетические уравнения для N-частичных функций распределения газа Больцмана исследовались многими авторами (*Пригожин*, 1962, 1967; *Кац*, 1967; *Резибуа* и *Де Леенер*, 1981).

В 1.6 приведены два кинетических уравнения для одночастичных распределений $f = \langle \tilde{f} \rangle$, $\tilde{f}$. При этом видно, что уравнение для сглаженного распределения $\tilde{f}(x, t)$ является более общим, так как позволяет описывать и флуктуации функций распределения. Можно ввести и две соответствующих функции распределения $f_N = \langle \tilde{f}_N \rangle$, $\tilde{f}_N$ (см. (4.4), (4.3)). Имеется, однако, существенное отличие — кинетические уравнения для функций $\tilde{f}_N$, f_N в случае газа Больцмана являются линейными. Благодаря этому уравнение для распределения f_N вытекает непосредственно из уравнения для функции $\tilde{f}_N$ при усреднении по ансамблю Гиббса — не возникает проблемы замыкания, как при усреднении уравнения для $\tilde{f}(x, t)$.

Процедура перехода от обратимого уравнения Лиувилля к уравнению для сглаженного распределения для N-частичного распределения описана в работе (*Климонтович*, II, IV). Запишем сразу уравнение для функции распределения $\tilde{f}_N$:

$$\frac{\partial \tilde{f}_N}{\partial t} + \sum_{1 \leqslant i \leqslant N} \left(\mathbf{v}_i \frac{\partial \tilde{f}_N}{\partial \mathbf{r}_i} + \mathbf{F}(\mathbf{r}_i) \frac{\partial \tilde{f}_N}{\partial \mathbf{p}_i} \right) = I_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_N, t), \quad (1.7.1)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}_i) = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \sum_{1 \leqslant j \leqslant N} \Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|).$$

Здесь введено обозначение для соответствующего интеграла столкновений:

$$I_N = \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant N} \int_0^\infty \rho_{ij}\, d\rho_{ij} \int_0^{2\pi} d\varphi_{ij} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) |\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j| \times$$
$$\times \left[\tilde{f}_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i', \ldots, \mathbf{r}_j, \mathbf{p}_j', \ldots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_N, t) - \right.$$
$$\left. - \tilde{f}_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i, \ldots, \mathbf{r}_j, \mathbf{p}_j, \ldots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_N, t) \right]. \quad (1.7.2)$$

Учитываются столкновения всех пар частиц i, j. Импульсы $\mathbf{p}_i'$, $\mathbf{p}_j'$ связаны с импульсами $\mathbf{p}_i$, $\mathbf{p}_j$ законами сохранения импульса и кинетической энергии пары частиц.

Напомним, что для сглаженного распределения $\tilde{f}_N$ можно использовать приближенное равенство (4.12), т. е. функция $\tilde{f}_N(X, t)$ мультипликативна. Подстановка (4.12) в уравнение Леонтовича (1) при условии неразличимости частиц (функция $\tilde{f}(x_i, t)$ не зависит от номера частицы) приводит для сглаженного распределения $\tilde{f}(x, t)$ к уравнению Больцмана (5.18).

Уравнение для функции f_N следует из (1) при усреднении по ансамблю Гиббса. В силу линейности (2) это уравнение имеет такой же вид. Изменяется, однако, смысл условия мультипликативности:

$$f_N(X, t) = \prod_{1 \leq i \leq N} \left(V^{-1} f(x_i, t)\right). \qquad (1.7.3)$$

Оно является более жестким, чем условие мультипликативности (4.12), так как функции распределения удовлетворяют теперь уравнению Больцмана (5.9).

Если корреляции одночастичных распределений — кинетические флуктуации существенны, то равенство (3) становится несправедливым, и необходимо использовать более общее выражение (4.13) для функции распределения f_N. В этом случае вместо уравнения Больцмана возникает цепочка зацепляющихся *диссипативных* уравнений для последовательности функций распределения $f_1 \equiv f$, f_2, ... Диссипация обусловлена мелкомасштабными корреляциями, которые определяют интеграл столкновений Больцмана и более общий интеграл столкновений (2) в кинетическом уравнении Леонтовича для распределения $\tilde{f}_N$.

Можно показать, что полученная таким образом цепочка уравнений эквивалентна цепочке уравнений для моментов случайного распределения $\tilde{f}(x, t)$, которая получается с помощью уравнений (5.18) (*Климонтович*, 1973, II).

Равновесным решением уравнения Леонтовича в отсутствие внешних сил является N-мерное распределение Максвелла

$$f_N(\mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_N) = \\ = (2\pi mkT)^{-3N/2} \exp\left(-(kT)^{-1} \sum_{1 \leq i \leq N} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}\right). \qquad (1.7.4)$$

Процесс релаксации к равновесному состоянию распадается на несколько стадий. Оценим минимальное время релаксации. Оно определяется промежутком времени, через который происходит очередное столкновение одной, по любой из N, частицы газа и который в N раз меньше времени свободного пробега выделенной частицы. Таким образом,

$$(\tau_{\text{рел}})_{\min} \sim \tau/N \sim 1/N. \qquad (1.7.5)$$

Естественно, что столь малые промежутки времени не имеют практического значения в кинетической теории. Соотношение (5) показывает, однако, на сколь малых временных интервалах зарождается необратимость в макроскопических системах. В термодинамическом пределе минимальное время релаксации равно нулю. По этой причине и является непоследовательным использование обратимых уравнений в приближении сплошной среды. Мы еще вернемся к этому вопросу в гл. 2.

Итак, исторически независимо возникли два метода построения флуктуационной кинетической теории. Первый основан на диссипативных уравнениях для N-частичных распределений $\tilde{f}_N$, f_N. Начало развитию этого метода положила работа М. А. Леонтовича. Идеи М. А. Леонтовича опережали свое время, и его работа на долгие годы была забыта (*Климонтович*, УФН, 1983). Это направление возродилось в отмеченных выше работах И. Пригожина, М. Каца, П. Резибуа и др. Исследование неравновесных кинетических флуктуаций проводилось во многих работах (см. *Ганцевич*, *Гуревич*, *Катилюс*, 1969, 1970, 1979; *Коган*, 1972; *Климонтович*, II — IV; *Гречанный*, 1988 и цитированную в этих работах литературу).

Широкое распространение в теории кинетических флуктуаций получил и метод Ланжевена (*Кадомцев*, 1957; *Горьков*, *Дзялошинский*, *Питаевский*, 1960; *Коган*, *Шульман*, 1969; *Фокс*, *Уленбек*, 1970; *Ван Кампен*, 1981; *Кейзер*, 1987). В работах (*Климонтович*, 1971 (1), II — IV) проведено детальное сопоставление различных методов с учетом как молекулярных, так и турбулентных источников флуктуаций.

Рассмотренные методы широко используются для описания кинетических флуктуаций макроскопических переменных и в более сложных системах, например в химически реагирующих газах, частично ионизованной плазме (*Николис*, *Пригожин*, 1979; *Полак*, *Михайлов*, 1983; *Ро-*

мановский, *Степанова*, *Чернавский*, 1984; *Стратонович*, 1985; *Белый*, *Климонтович*, 1978; *Климонтович*, II — IV).

В последующих главах мы еще не раз возвратимся к теории крупномасштабных (кинетических, гидродинамических, диффузионных) флуктуаций. Будет рассмотрена, в частности, диффузионная теория фликкер-шума.

Отметим, наконец, что мы рассмотрели лишь один пример диссипативного уравнения для N-частичной функции распределения — это уравнение Леонтовича для газа Больцмана. Оно справедливо для идеального (в термодинамическом смысле) газа, поэтому равновесным решением является N-мерное распределение Максвелла (4). Известен (*Климонтович*, 1978, III, IV) другой пример кинетического уравнения для N-частичной функции распределения. Оно описывает эволюцию к равновесному состоянию для системы с произвольной функцией Гамильтона. При этом равновесным решением является каноническое распределение Гиббса. Пример такого кинетического уравнения приведен в 2.4.

1.8. Н-теорема Больцмана для сглаженных (пульсирующих) и детерминированных распределений

Название «Н-теорема» установилось не сразу. Оно было предложено английским физиком Бербери в 1884 г. и в следующем году было принято Больцманом. Выбор буквы «Н» определялся написанием английского слова Heat — тепло. Тем самым подчеркивалось, что речь идет об установлении теплового равновесия.

В руководствах по статистической физике утверждается, что Н-теорема Больцмана справедлива *для замкнутой* системы. Это утверждение нуждается в очень существенном для дальнейшего изложения уточнении.

Для доказательства Н-теоремы используются уравнение Больцмана (5.9), свойство интеграла столкновений (5.14) и граничные условия для функции распределения: $f|_S = 0$, $f|_{|\mathbf{p}|=\infty} = 0$. Первое из граничных условий означает невозможность выхода частиц газа за пределы объема системы V, а второе — отсутствие частиц с бесконечными значениями импульса и, следовательно, кинетической энергии. При этом для энтропии Больцмана

$$S_{\text{Б}}(t) = -kn \int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \ln f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)\, d\mathbf{r}\, d\mathbf{p} \qquad (1.8.1)$$

справедливо уравнение баланса энтропии

$$dS_Б/dt = \int \sigma_Б(\mathbf{r}, t)\, d\mathbf{r} \geqslant 0. \qquad (1.8.2)$$

Здесь введено обозначение для производства энтропии

$$\sigma_Б(\mathbf{r}, t) = -kn \int I_Б \ln f\, d\mathbf{p} \geqslant 0. \qquad (1.8.3)$$

Знак равенства в (2) относится к равновесному состоянию, когда $f = f^{(0)}$ является распределением Максвелла.

Таким образом, Н-теорема Больцмана состоит в утверждении, что *в замкнутой (для частиц) системе в процессе эволюции к равновесию энтропия возрастает и остается неизменной при достижении равновесного состояния.*

Для дальнейшего изложения полезна несколько иная формулировка этой теоремы. Для этого, наряду с (5.14), используем и остальные свойства интеграла столкновений (5.13). В процессе эволюции к равновесному состоянию первое из них обеспечивает сохранение нормировки, второе — среднего импульса, а третье — средней кинетической энергии:

$$\langle E \rangle = \langle \mathbf{p}^2/2m \rangle = \text{const}. \qquad (1.8.4)$$

Обозначим разность энтропий равновесного и неравновесного состояний через $\Lambda_S = S_Б^{(0)} - S_Б(t)$. С помощью определения энтропии Больцмана (1), свойств интеграла столкновений (5.13) и неравенства $\ln a \geqslant 1 - 1/a$ (при $a = f/f_0$) приходим к следующему результату:

$$\Lambda_S = S_Б^{(0)} - S_Б(t) =$$
$$= kn \int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \ln [f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)/f^{(0)}(p)]\, d\mathbf{r}\, d\mathbf{p} \geqslant 0. \qquad (1.8.5)$$

Таким образом, разность энтропий $S_Б^{(0)} - S_Б(t)$ является функционалом Ляпунова, поскольку интеграл в (5) знакопостоянен и обращается в нуль лишь для равновесного состояния. Индекс «S» подчеркивает, что введенный функционал Ляпунова определяется именно разностью энтропий. Из (2) следует знакопостоянство и производной Λ_S:

$$\frac{d\Lambda_S}{dt} = \frac{d}{dt}\left(S_Б^{(0)} - S_Б(t)\right) \leqslant 0. \qquad (1.8.6)$$

Поскольку знаки выражений (5), (6) различны, то состояние равновесия с функцией распределения $f^{(0)}$, для которого $\Lambda_s = 0$, является устойчивым. Для него энтропия максимальна.

При установлении результата (5) существенно, что в процессе эволюции к равновесному состоянию средняя энергия сохраняется. Только при наличии этого условия функционалом Ляпунова является именно разность энтропий, а не каких-либо других функций. Существенно и другое.

Условие постоянства средней энергии (4) для уравнения Больцмана — естественное свойство уравнения, а не дополнительное условие. То, что в процессе эволюции сохраняется не сама энергия E, а лишь ее среднее значение $\langle E \rangle$, указывает на «*внутреннюю незамкнутость*» рассматриваемой системы — газа Больцмана. Такая незамкнутость обусловлена не обменом энергией с окружающими телами, а наличием бесконечного (в термодинамическом пределе) резервуара внутренних степеней свободы. Уравнение Больцмана — замкнутое уравнение для первого момента сглаженного распределения $\tilde{f}(x, t)$ содержит лишь относительно малую информацию о микросостоянии системы.

Таким образом, утверждение о том, что H-теорема Больцмана справедлива для замкнутой системы, не является, как мы видим, точным.

Один из способов продвижения вперед по пути получения большей информации о системе — использование вместо уравнения Больцмана (5.9) более общего уравнения (5.18) для сглаженного распределения $\tilde{f}(x, t)$. Тогда вместо (2) получим более общее уравнение баланса для средней энтропии:

$$\frac{d\langle \tilde{S}_{\text{Б}} \rangle}{dt} = -kn \int \langle I_{\text{Б}}\{\tilde{f}\} \ln \tilde{f} \rangle \, d\mathbf{r}\, d\mathbf{p} \equiv$$
$$\equiv \int \langle \tilde{\sigma}_{\text{Б}}(\mathbf{r}, t) \rangle \, d\mathbf{r} \geqslant 0. \qquad (1.8.7)$$

Среднее производство энтропии $\langle \tilde{\sigma}_{\text{Б}} \rangle$ определяется теперь и высшими моментами сглаженного распределения. Естественно, что продвижение в расчете $\langle \tilde{\sigma}_{\text{Б}} \rangle$ возможно лишь при использовании того или иного замыкания уравнений для моментов сглаженного распределения $\tilde{f}$. Об этом речь пойдет в 1.9, а также в гл. 4 и 6.

Основываясь на уравнении для N-частичного распределения $\tilde{f}_N(X, t)$ или $f_N(X, t)$, также можно получить

соответствующее уравнение баланса, но теперь уже для энтропии Гиббса $S_Г$. Так, с помощью уравнения Леонтовича находим

$$dS_Г/dt = -k \int I_N(X, t) \ln f_N(X, t)\, dX \geqslant 0. \quad (1.8.8)$$

Здесь использовано свойство интеграла столкновений $I_N(X, t)$. Знак равенства отвечает равновесному состоянию, когда распределение является N-частичным распределением Максвелла (7.4).

1.9. Энтропия и производство энтропии для сглаженных и детерминированных распределений

1.9.1. Энтропия и производство энтропии без учета крупномасштабных флуктуаций. Рассмотрим усредненное значение энтропии

$$S_Б = \langle S_Б \rangle \quad (1.9.1)$$

и исследуем влияние как степени неравновесности, так и крупномасштабных флуктуаций. «Началом отсчета» служит энтропия для состояния локального равновесия с функцией распределения $f^{(0)}(r, p, t)$:

$$S_Б^{(0)} = -kn \int f^{(0)}(x, t) \ln f^{(0)}(x, t)\, dx. \quad (1.9.2)$$

Преобразуем выражение (2.4) для энтропии Больцмана при малом отклонении от локального равновесия, когда функцию распределения $f(x, t)$ можно представить в виде

$$f(x, t) = f^{(0)}(x, t) + f^{(1)}(x, t), \qquad f^{(1)} \ll f^{(0)}. \quad (1.9.3)$$

Здесь $f^{(0)}$ — локальное распределение Максвелла:

$$nf^{(0)} = \frac{n(\mathbf{r}, t)}{[2\pi mkT(\mathbf{r}, t)]^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{p} - m\mathbf{u}(\mathbf{r}, t))^2}{2mkT(\mathbf{r}, t)}\right). \quad (1.9.4)$$

Из условия нормировки функций f, $f^{(0)}$ следует равенство

$$\int f^{(1)}\, dx = 0. \quad (1.9.5)$$

Используем также равенства

$$\int \varphi(\mathbf{p}) f^{(1)}\, dx = 0 \quad \text{при} \quad \varphi(\mathbf{p}) = 1,\ \mathbf{p},\ \mathbf{p}^2/2m, \quad (1.9.6)$$

которые вытекают из законов сохранения для газа Больцмана:

$$\int \varphi(p) f\, dx = \int \varphi(p) \left(f^{(0)} + f^{(1)}\right) dx = \text{const}. \quad (1.9.7)$$

В результате в первом неисчезающем приближении по $f^{(1)}$ получим

$$S_{\text{Б}} = S_{\text{Б}}^{(0)} - \frac{kn}{2} \int \left(f^{(0)}(x, t)\right)^{-1} \left(f^{(1)}(x, t)\right)^2 dx \leqslant S_{\text{Б}}^{(0)}. \quad (1.9.8)$$

Здесь $S_{\text{Б}}^{(0)}$ энтропия Больцмана для состояния локального равновесия.

Мы видим, что по мере увеличения $f^{(1)}$, т. е. по мере удаления от равновесного состояния, энтропия Больцмана уменьшается. Этот результат справедлив лишь при выполнении условий (6). Одно из них (при $\varphi(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m$) означает, что в (8) значения энтропии $S_{\text{Б}}$, $S_{\text{Б}}^{(0)}$ сравниваются при одинаковых значениях средней энергии. Это условие необходимо, как мы увидим в **1.10**, и для системы с произвольной функцией Гамильтона.

Рассмотрим в том же приближении выражение (8.3) для полного (по всему объему) производства энтропии газа Больцмана: $\sigma_{\text{Б}}(t) = \int \sigma_{\text{Б}}(\mathbf{r}, t)\, d\mathbf{r}$. Подставим в него выражение (3) для распределения f. В линейном приближении по отклонению $f^{(1)}$ интеграл Больцмана можно представить в виде

$$I_{\text{Б}}\{f\} = -\delta\widehat{I}_{\mathbf{p}} f^{(1)}(x, t). \quad (1.9.9)$$

Здесь $\delta\widehat{I}_{\mathbf{p}}$ — линеаризованный оператор столкновений. Его действие на произвольную функцию $F(\mathbf{p})$ определяется равенством (6.8). Для интеграла (9) справедливы равенства, аналогичные (5.13):

$$\int \varphi(\mathbf{p}) I_{\text{Б}}\{f\}\, d\mathbf{p} = 0 \quad \text{при} \quad \varphi(\mathbf{p}) = 1,\ \mathbf{p},\ \mathbf{p}^2/2m. \quad (1.9.10)$$

С учетом этих свойств выражение (8.3) для полного производства энтропии $\sigma_{\text{Б}}(t)$ можно представить в виде

$$\sigma_{\text{Б}}(t) = \frac{kn}{2} \int \frac{\delta(x - x')}{f^{(0)}} \left(\delta\widehat{I}_{\mathbf{p}} + \delta\widehat{I}_{\mathbf{p}'}\right) f^{(1)}(x, t)\, f^{(1)}(x', t)\, dx\, dx' \geqslant 0. \quad (1.9.11)$$

Знак равенства отвечает локальному равновесию, когда $f^{(1)} = 0$. В (11) под знак интеграла введен множитель

$\int \delta(x - x')\,dx' = 1$ и произведена симметризация по переменным x, x'. Такая форма записи, как мы увидим, оказывается полезной при учете флуктуаций $\delta\tilde{f}$.

1.9.2. Производство энтропии с учетом крупномасштабных — кинетических флуктуаций. Формулы для энтропии (8) и производства энтропии (11) получены без учета флуктуаций $\delta\tilde{f}$. При учете флуктуаций возникает вопрос о соотношении вкладов, которые пропорциональны соответственно $(f^{(1)})^2$ и $\langle(\delta f)^2\rangle$.

Используем введенное выше обозначение $N_\Phi = nV_\Phi$ для числа частиц в объеме V_Φ. Для сглаженных по объему V_Φ функций отношение $\delta f/f^{(0)} \sim 1/\sqrt{N_\Phi}$. Отсюда следует, что величины $f^{(1)}$, δf сравниваются по порядку величины при условии

$$f^{(1)}/f^{(0)} \sim 1/\sqrt{N_\Phi} \ll 1 \quad (f^{(1)}/\delta f \sim (f^{(1)}/f^{(0)})\sqrt{N_\Phi} \sim 1). \qquad (1.9.12)$$

Таким образом, даже при малых отклонениях от равновесия, когда выполняется неравенство (3), вклады в энтропию и производство энтропии, определяемые функцией $f^{(1)}$, могут конкурировать с вкладами от крупномасштабных — кинетических флуктуаций. Естественно, что в состоянии равновесия, когда $f^{(1)} = 0$, флуктуационные вклады являются определяющими.

Вернемся к уравнению баланса (8.7) для средней энтропии

$$\frac{d\langle\tilde{S}_\text{Б}\rangle}{dt} = \langle\tilde{\sigma}_\text{Б}\rangle = -kn\int\langle I_\text{Б}\{\tilde{f}\}\ln\tilde{f}\rangle\,dx. \qquad (1.9.13)$$

Выражение для производства энтропии может быть преобразовано двумя способами. Здесь мы используем систему уравнений (6.3), (6.7) для функций f, $\langle\delta\tilde{f}\delta\tilde{f}\rangle$ в приближении малых флуктуаций. В гл. 4 вместо (6.7) использовано уравнение Ланжевена для флуктуации $\delta\tilde{f}$.

Итак, используем уравнение (6.7) для коррелятора флуктуаций

$$\langle\delta\tilde{N}\delta\tilde{N}\rangle_{x,x',t} = n^2\langle\delta\tilde{f}\delta\tilde{f}\rangle_{x,x',t}. \qquad (1.9.14)$$

Для упрощения записи введено обозначение

$$\delta\tilde{N}(x,\ t) = n\delta\tilde{f}(x,\ t). \qquad (1.9.15)$$

Напомним, что для коррелятора (14) источник $A(x,\ x',\ t)$ (6.7) представляется в виде суммы двух вкладов (6.9), характеризующих двойную — молекулярную и

турбулентную, «надстройку» над уравнением Больцмана. В гл. 4, посвященной теории броуновского движения, доказывается, что источник $A(x, x', t)$ совпадает с интенсивностью флуктуаций источника Ланжевена в уравнении для флуктуаций $\delta\tilde{N} = n\delta\tilde{f}$. Там мы продолжим обсуждение структуры отдельных вкладов $A_{\text{в}}$, $\tilde{A}$ в связи с вопросом об источниках Ланжевена в уравнениях Фоккера — Планка и Эйнштейна — Смолуховского, а также в уравнениях гидродинамики.

Выражение для производства энтропии $\langle\sigma_{\text{в}}\rangle$ газа Больцмана при малых значениях функций $f^{(1)}$, $\delta\tilde{f}$ может быть представлено в виде (*Климонтович*, IV, гл. 13)

$$\langle\tilde{\sigma}_{\text{Б}}\rangle = -kn\int I_{\text{Б}}\{f\}\ln f\,dx + \frac{kn}{2}\int I_{\text{Б}}\{f\}f^{-2}\langle\delta\tilde{f}\delta\tilde{f}\rangle_{x,x,t}\,dx + \\ + \frac{k}{2}\int\frac{\delta(x-x')}{\bar{N}(x,t)}[(\delta\tilde{I}_{\text{p}} + \delta\tilde{I}_{\text{p}'})\langle\delta\tilde{N}\delta\tilde{N}\rangle_{x,x',t} - \\ - A(x, x', t)]\,dx\,dx'. \quad (1.9.16)$$

В состоянии локального равновесия первые два члена правой части обращаются в нуль, так как при этом $I_{\text{в}} = 0$. В неравновесном состоянии их можно объединить и записать в виде одного выражения $-kn\int I_{\text{Б}}\{f\}\langle\ln\tilde{f}\rangle\,dx$.

Рассмотрим некоторые следствия выражения (16). Входящий в него коррелятор флуктуаций $\delta\tilde{N}$ может быть всегда представлен в виде

$$\langle\delta\tilde{N}\delta\tilde{N}\rangle_{x,x',t} = \\ = n\left(\delta(x-x')f(x,t) - V^{-1}f(x,t)f(x',t)\right) + n^2\tilde{g}_2(x, x', t) \quad (1.9.17)$$

В состоянии локального равновесия крупномасштабные корреляции пренебрежимо малы ($\tilde{g}_2 = 0$) и, следовательно, выражение (17) принимает вид

$$\langle\delta\tilde{N}\delta\tilde{N}\rangle^{\text{ист}}_{x,x',t} = \\ = n(\delta(x-x')f(x,t) - V^{-1}f(x,t)f(x',t)). \quad (1.9.18)$$

Введенный здесь индекс «ист» подчеркивает, что (18) учитывает только вклад, определяемый атомарной структурой системы.

Вернемся к выражению (16) и учтем, что в состоянии локального равновесия $\langle\tilde{\sigma}_{\text{в}}\rangle = 0$. Из этого уравнения

с учетом равенств (17), (18) находим выражение для источника:

$$A_{\text{Б}}(x, x', t) = (\delta\widehat{I}_{\text{p}} + \delta\widehat{I}_{\text{p}'})\langle\delta\widetilde{N}\delta\widetilde{N}\rangle^{\text{ист}}_{x,x',t}. \quad (1.9.19)$$

А учитывая (18), его можно записать в более явном виде:

$$A_{\text{Б}}(x, x', t) = \\ = (\delta\widehat{I}_{\text{p}} + \delta\widehat{I}_{\text{p}'})\left(n\delta(x - x')f(x, t) - V^{-1}f(x, t)f(x', t)\right). \quad (1.9.20)$$

Заметим, что приведенное ранее выражение (6.10) для источника (6.9) в состоянии локального равновесия совпадает с (20). Таким образом, решение уравнения $\langle\widetilde{\sigma}_{\text{Б}}\rangle = 0$ приводит к правильному выражению для источника $A_{\text{Б}}(x, x', t)$ в состоянии равновесия.

Рассмотрим теперь более общую ситуацию.

Вернемся к выражению (8) для энтропии, которое было получено при условии $\delta\widetilde{f} = 0$, и учтем в нем вклад флуктуаций $\delta\widetilde{f}$. В результате находим

$$S^{(0)}_{\text{Б}} - \langle\widetilde{S}(t)\rangle = \\ = \frac{kn}{2}\int\frac{\delta(x - x')}{f^{(0)}}\left[f^{(1)}(x, t)f^{(1)}(x', t) + \langle\delta\widetilde{f}\delta\widetilde{f}\rangle_{x,x',t}\right] > 0. \quad (1.9.21)$$

Видим, что оба фактора — отклонение от локального равновесия и крупномасштабные флуктуации — приводят к уменьшению энтропии по сравнению с энтропией Больцмана для локального равновесия.

Запишем в том же приближении (16), учтя, что для локального равновесия $\sigma^{(0)}_{\text{Б}} = 0$:

$$\langle\widetilde{\sigma}_{\text{Б}}\rangle = \frac{kn}{2}\int\frac{\delta(x - x')}{f^{(0)}}\{(\delta\widehat{I}_{\text{p}} + \delta\widehat{I}_{\text{p}'}) \times \\ \times \left[f^{(1)}(x, t)f^{(1)}(x', t) + \langle\delta\widetilde{f}\delta\widetilde{f}\rangle_{x,x',t}\right] - n^{-2}A(x, x', t)\}\,dx\,dx'. \quad (1.9.22)$$

Основываясь на этом выражении, можно определить *эффективный источник* из условия равенства нулю производства энтропии $\langle\widetilde{\sigma}_{\text{Б}}\rangle$ в неравновесном состоянии (*Климонтович*, IV):

$$A_{\text{эф}}(x, x', t) = \\ = (\delta\widehat{I}_{\text{p}} + \delta\widehat{I}_{\text{p}'})\left[n^2f^{(1)}(x, t)f^{(1)}(x', t) + \langle\delta\widetilde{N}\delta\widetilde{N}\rangle_{x,x',t}\right]. \quad (1.9.23)$$

Введение эффективного источника дает возможность свести задачу к расчету стационарных, но неравновесных характеристик. Такой подход, как мы увидим, оказывается эффективным в гидродинамике, в частности при описании развитой турбулентности.

В заключение отметим следующее.

Из-за наличия в (16), (22) под знаком интеграла функции $\delta(x - x')$ формулы (19), (23) для источников $A_{\text{в}}(x, x', t)$, $A_{\text{эф}}(x, x', t)$ справедливы лишь при близких (в пределах физически бесконечно малых объемов в фазовом пространстве) точках x, x'. Из выражения для производства энтропии нельзя получить информацию о поведении этих функций в достаточно удаленных точках. В этом отношении метод, изложенный в **1.6**, является более общим, так как при этом не накладываются ограничения на расстояния точек x, x'. Однако метод, основанный на использовании уравнения баланса энтропии, обладает и определенными преимуществами. Он позволяет, например, определить эффективный источник (23) из условия равенства нулю среднего производства энтропии. Более того, мы извлекли информацию лишь из уравнения для среднего значения $\langle S_{\text{в}} \rangle$ случайной функции $S_{\text{в}}$. Исходным при этом служило уравнение баланса энтропии (8.2). Уравнения баланса для высших моментов случайной функции S содержат, разумеется, дополнительную информацию. Они дают возможность, в частности, ввести сглаженные — случайные источники флуктуаций $\tilde{A}(x, x', t)$.

Мы вернемся к этому вопросу при описании гидродинамических флуктуаций, а также при изложении некоторых результатов теории турбулентности в гл. 6.

1.10. Теорема Гиббса

На примере Н-теоремы Больцмана мы видели, что энтропия является функцией Ляпунова при дополнительном условии постоянства средней энергии. Для разреженного газа, эволюция которого к состоянию равновесия описывается уравнением Больцмана, условие постоянства средней энергии является естественным — прямым следствием уравнения Больцмана. Ситуация, однако, существенно усложняется при рассмотрении неидеального газа (*Климонтович*, 1972, II). Доказать Н-теорему для неидеального газа в общем виде не удается.

В открытых системах положение является, естественно, еще более сложным. В тех случаях, когда удается внести понятие эффективной энергии — эффективной функции Гамильтона, среднее значение энергии в процессе временной эволюции к стационарному состоянию не сохраняется. И все же энтропия Больцмана — Гиббса — Шеннона может быть использована для оценки относительной степени упорядоченности состояний открытых систем как при временной эволюции, так и при эволюции в пространстве управляющих параметров.

Рассмотрим теперь теорему Гиббса, при доказательстве которой не делается каких-либо ограничений на характер взаимодействия частиц рассматриваемой системы. В этом отношении результат Гиббса является более общим, чем Н-теорема Больцмана. Гиббс не рассматривает временную эволюцию к равновесному состоянию, и теорема Гиббса не утверждает, что при переходе к равновесному состоянию энтропия системы монотонно возрастает. Гиббс лишь производит сравнение энтропии равновесного состояния с энтропией произвольного состояния, но при одном существенном ограничении: средняя энергия «произвольного» состояния совпадает со средней энергией равновесного состояния. Таким образом, как и при доказательстве Н-теоремы Больцмана, сравнение разных состояний производится при одном и том же значении средней энергии. Здесь, однако, это условие не является естественным свойством какого-либо уравнения, а выступает как дополнительное.

Итак, рассмотрим систему, которая характеризуется произвольной функцией Гамильтона $H(X)$. Здесь X — полный набор переменных, определяющих состояние системы (например, набор координат и импульсов всех частиц системы при произвольном их взаимодействии). Равновесное состояние описывается каноническим распределением Гиббса (1.3.5). Здесь удобно иное обозначение: $f_N \to f_0$. Тогда

$$f_0(X) = \exp\left[(kT)^{-1}(F - H(X))\right], \quad \int f_0(X)\,dX = 1. \quad (1.10.1)$$

Через $f(X)$ обозначим нормированное $\left(\int f\,dX = 1\right)$ распределение произвольного неравновесного состояния *с одним ограничением* — средние значения функции Гамильтона $H(X)$ для распределений f_0, f одинаковы:

$$\int H(X) f_0(X)\,dX = \int H(X) f(X)\,dX. \quad (1.10.2)$$

Обозначим через S_0, S энтропии равновесного и «произвольного» состояний:

$$S_0 = -k\int f_0 \ln f_0\, dX, \qquad S = -k\int f \ln f\, dX. \quad (1.10.3)$$

Тогда согласно теореме Гиббса (доказательство см. *Гиббс*, 1982, гл. II; *Климонтович*, IV, гл. 4, § 5) разность энтропий равновесного и неравновесного состояний

$$S_0 - S = \int f \ln \frac{f}{f_0}\, dX \geqslant 0. \quad (1.10.4)$$

Здесь использовано неравенство $\ln a \geqslant 1 - 1/a$ при $a = f/f_0$.

Во избежание недоразумений отметим следующее. Чтобы представить разность энтропий $S_0 - S$ в виде интеграла, надо использовать два условия: одинаковость условий нормировки f_0, f и дополнительное условие (2)! Дело в том, что неравенство (4) справедливо для произвольных функций f_0, f при одном лишь дополнительном условии одинаковости нормировки, т. е. без дополнительного условия постоянства средней энергии. При этом, однако, интеграл неравенства (4) не равен разности соответствующих энтропий и неравенство (4) не выражает теоремы Гиббса.

В 1.11 мы увидим, что выражение

$$\int f \ln \frac{f}{f_0}\, dX, \quad (1.10.5)$$

в котором функции распределения удовлетворяют лишь одному условию одинаковости нормировки, может играть роль функции Ляпунова в теории броуновского движения, когда роль кинетического уравнения играет уравнение Фоккера — Планка. Выражение (5) может служить функцией Ляпунова в теории марковских процессов и при использовании более общих кинетических уравнений, описывающих броуновское движение.

Итак, согласно теореме Гиббса при условии постоянства средней энергии энтропия максимальна в равновесном состоянии. Поскольку энтропия служит мерой неопределенности при статистическом описании, то равновесное состояние является наиболее хаотическим по сравнению с «произвольным» неравновесным состоянием. Произвол ограничен условием постоянства средней энергии — условием (2).

1.11. Н-теорема для открытых систем. Энтропия Кульбака

Среди открытых систем, которые могут обмениваться энергией, выделяется важный класс систем, движение в которых можно рассматривать как броуновское. Теории броуновского движения посвящена гл. 4. Здесь рассмотрим лишь два примера, для которых сформулируем и докажем Н-теорему.

1. Н-теорема для броуновского движения. Рассмотрим броуновское движение частиц, однородно распределенных по пространству. Функция распределения в этом случае зависит лишь от скорости и времени и удовлетворяет уравнению Фоккера — Планка

$$\frac{\partial f(\mathbf{v}, t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{v}^2} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}(\gamma \mathbf{v} f), \quad D = \gamma\frac{kT}{m}, \tag{1.11.1}$$

γ — коэффициент трения, определяемый, например, формулой Стокса. Поскольку система находится в термостате с заданной температурой T, то можно определить свободную энергию неравновесного состояния следующим образом:

$$F(t) = U(t) - TS(t), \quad U(t) = \int \frac{p^2}{2m} f\,dv,$$
$$S(t) = -k\int f \ln f\,dv. \tag{1.11.2}$$

Здесь $U(t)$ и $S(t)$ — внутренняя энергия и энтропия неравновесного состояния. Соответствующие равновесные характеристики отметим индексом «0». Разность свободных энергий $F(t)$, F_0 определяется выражением

$$\Lambda_F = F(t) - F_0 = kT\int f \ln\frac{f}{f_0}\,dv \geqslant 0. \tag{1.11.3}$$

Оно представляет пример так называемой энтропии Кульбака. В процессе эволюции распределения $f(v, t)$ к равновесному состоянию разность свободных энергий убывает (*Климонтович*, IV, гл. II):

$$\frac{d}{dt}(F(t) - F_0) = -kT\int \frac{D}{f}\left[\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} + \frac{m}{kT}\mathbf{v} f\right]^2 d\mathbf{v} \leqslant 0. \tag{1.11.4}$$

Таким образом, получен результат, аналогичный Н-теореме Больцмана. Теперь, однако, роль функционала Ляпунова играет не Λ_s, а разность свободных энергий: $\Lambda_F = F(t) - F_0$. Этот результат менее содержателен, чем

Н-теорема Больцмана, так как свободная энергия (энтропия Кульбака) не обладает совокупностью свойств, необходимых для использования ее в качестве меры неопределенности.

Покажем, что и здесь можно ввести функционал Ляпунова, определяемый энтропией. Для этого необходима перенормировка решения уравнения (1) к заданному значению средней энергии $\langle E\rangle = \langle p^2/2m\rangle = \mathrm{const}$ (ср. с условием (8.4) для газа Больцмана). Перенормированное решение уравнения (1) имеет вид

$$\tilde{f}(v, t) = \left(\frac{m}{2\pi kT(t)}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{m(v-u(t))^2}{2kT(t)}\right]. \quad (1.11.5)$$

Функции $u(t)$, $T(t)$ в этом выражении определяются формулами

$$u(t) = u_0 e^{-\gamma t}, \quad T(t) = (T_0 - T)e^{-2\gamma t} + T, \quad T_0 = T(t=0). \quad (1.11.6)$$

Условие постоянства средней энергии приводит при $mu^2/2 \leqslant (3/2)kT$ к равенству

$$\frac{mu^2(t)}{2} + \frac{3}{2}kT(t) = \frac{3}{2}kT. \quad (1.11.7)$$

Разность энтропий равновесного ($S_0 = S(t=\infty)$) и произвольного $\tilde{S}(t)$ состояний определяется выражением

$$\Lambda_S = S_0 - \tilde{S}(t) = \frac{3}{2}k\ln\frac{T(t)}{T_0} \geqslant 0. \quad (1.11.8)$$

Временная эволюция функционала Ляпунова $\Lambda_S = S_0 - \tilde{S}(t)$

$$\frac{d\Lambda_S}{dt} = \frac{d}{dt}(S_0 - \tilde{S}(t)) = -3k\gamma\frac{T(t)-T_0}{T(t)}e^{-2\gamma t} \leqslant 0. \quad (1.11.9)$$

Приведенный пример носит иллюстративный характер, так как перенормировка возможна для ограниченной области значений начальных скоростей (см. (7)). Он, однако, показывает принципиальную возможность перенормировки. Рассмотрим теперь более содержательный пример.

2. *Н-теорема для броуновского движения в генераторе Ван дер Поля.* Используем уравнение Фоккера — Планка для распределения энергии колебаний в генераторе (*Климонтович*, IV, гл. 12)

$$\frac{\partial f(E, t)}{\partial t} = D\frac{\partial}{\partial E}\left(E\frac{\partial f}{\partial E}\right) + \frac{\partial}{\partial E}[(-a + bE)Ef]. \quad (1.11.10)$$

Здесь D — заданная интенсивность шума, $a = a_н - \gamma$, где $a_н$ — параметр положительной обратной связи (накачки), γ, b — коэффициенты линейного и нелинейного трения. Стационарное решение имеет вид

$$f_0 = \exp \frac{F_0 - H(E)}{D}, \quad H(E) = -aE + \frac{1}{2} bE^2, \quad \int_0^\infty f\,dE = 1. \tag{1.11.11}$$

Здесь F_0 — соответствующая свободная энергия, $H(E)$ — эффективная функция Гамильтона, D играет роль температуры. Неравновесную свободную энергию определим равенством

$$F(t) = \langle H(E) \rangle - DS(t), \quad S(t) = -\int_0^\infty f \ln f\,dE. \tag{1.11.12}$$

Тогда разность свободных энергий $F(t)$, F_0 дается выражением

$$F(t) - F_0 = D \int_0^\infty f \ln \frac{f}{f_0}\,dE \geqslant 0, \tag{1.11.13}$$

которое, как и (3), служит примером энтропии Кульбака для системы в «термостате» с температурой D. В процессе эволюции к стационарному состоянию свободная энергия монотонно уменьшается (*Климонтович*, IV, гл. 12):

$$\frac{d(F(t) - F_0)}{dt} = -D \int \frac{DE}{f} \left(\frac{\partial f}{\partial E} + \frac{f}{D} \frac{dH}{dE} \right)^2 dE \equiv -\sigma_F \leqslant 0. \tag{1.11.14}$$

Таким образом, снова пришли к Н-теореме. Роль функции Ляпунова и здесь играет свободная энергия (13).

Покажем, что Н-теорему можно сформулировать и для энтропии. Для этого произведем перенормировку, но теперь к заданному значению средней эффективной функции Гамильтона $\langle H(E) \rangle$. Перенормированные функцию распределения и интенсивность шума обозначим через $\tilde{f}(E, t)$, $\tilde{D}\{\tilde{f}(E, t)\}$. Интенсивность шума $\tilde{D}$ функционально зависит от распределения $\tilde{f}$. Эта зависимость находится из условия

$$\int_0^\infty H(E) \tilde{f}(E, t)\,dE = \int_0^\infty H(E) f_0(E)\,dE. \tag{1.11.15}$$

Перенормированное распределение удовлетворяет уравнению, которое теперь является нелинейным (*Климонтович*, IV (2), 1987 (1)):

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} = \tilde{D}\{\tilde{f}\} \frac{\partial}{\partial E}\left(E \frac{\partial \tilde{f}}{\partial E}\right) + \frac{\partial}{\partial E}\left(\frac{dH}{dE} E\tilde{f}\right),$$

$$\int_0^\infty \tilde{f}\, dE \equiv 1, \qquad (1.11.16)$$

$$\tilde{D}\{\tilde{f}\} = \int_0^\infty (-a + bE)^2 E\tilde{f}\, dE \left(\int_0^\infty (-a + 2bE)\tilde{f}\, dE\right)^{-1}$$

Функционал Ляпунова определяется разностью энтропий S_0, $\tilde{S}(t)$:

$$\Lambda_S = S_0 - \tilde{S}(t) = \int_0^\infty \tilde{f}(E, t) \ln \frac{\tilde{f}(E, t)}{f_0}\, dE \geqslant 0. \qquad (1.11.17)$$

В процессе эволюции к стационарному состоянию функционал Ляпунова Λ_S монотонно уменьшается и, следовательно, энтропия $\tilde{S}(t)$ растет (*Климонтович*, IV, (2), гл. 12):

$$\frac{d\Lambda_S}{dt} = \frac{d}{dt}(S_0 - \tilde{S}(t)) \leqslant 0 \quad \text{при} \quad \langle H(E)\rangle = \text{const}. \qquad (1.11.18)$$

Итак, в процессе эволюции к стационарному состоянию перенормированная энтропия $\tilde{S}(t)$ возрастает и остается неизменной при достижении стационарного состояния. Рост энтропии (или уменьшение свободной энергии) в открытых системах есть следствие того, что заданные параметры $a_н$, D определяют лишь стационарное состояние и, следовательно, остается свобода в выборе начального распределения.

Отметим еще раз, что использование функционала Ляпунова, определяемого энтропией, дает определенные преимущества. Во-первых, энтропия может быть определена через функцию распределения для произвольного неравновесного состояния. Существенно и то, что распределение может быть найдено непосредственно по экспериментальным реализациям, т. е. без использования математической модели. Во-вторых, свободная энергия не обладает, в отличие от энтропии, совокупностью свойств, благодаря которым ее можно было бы принять за меру неопределенности при статистическом описании.

1.12. Эволюция в пространстве управляющих параметров. S-теорема

В 1.1 подробно говорилось о роли управляющих параметров в статистической теории открытых систем. Предположим, что управляющие параметры выбраны, и рассмотрим эволюцию открытой системы — последовательность стационарных состояний, отвечающих различным значениям параметров a.

Как и в 1.1, выделим состояния, отвечающие значениям $a = a_0$, $a = a_0 + \Delta a$. Состояние с функцией распределения $f_0(X, a_0)$ примем условно (правильность выбора подлежит проверке) за состояние *физического хаоса*, так как при этом $\Delta a = 0$.

Введем также функцию распределения $f(X, a_0 + \Delta a)$ и представим ее в виде канонического распределения Гиббса

$$f(X, a_0 + \Delta a) = \exp[(F - H(X, a_0 + \Delta a))D^{-1}],$$
$$f_0 = f(X, a_0 + \Delta a)|_{\Delta a = 0}. \qquad (1.12.1)$$

Функции f, f_0 нормированы одинаковым образом:

$$\int f\,dX = \int f_0\,dX = 1. \qquad (1.12.2)$$

Для получения конкретного вида распределения (1) нужна математическая модель рассматриваемой системы. Математическая модель известна не всегда, поэтому в 1.13 будет рассмотрена видоизмененная формулировка критерия относительной степени упорядоченности, которая позволит ввести эффективную функцию Гамильтона непосредственно по экспериментальным данным, т. е. без введения математической модели.

Для использования значений энтропии при оценке относительной степени упорядоченности состояний при разных a необходима перенормировка к заданному значению средней энергии. Она может быть осуществлена двумя способами.

1. В качестве дополнительного условия введем требование постоянства средней энергии $H(X, a_0)$ состояния физического хаоса и перенормируем функцию $f_0 \to \tilde{f}_0$. Функцию $\tilde{f}_0$ представим в виде

$$\tilde{f}_0(X, a_0, \Delta a) = \exp[(\tilde{F}_0 - H(X, a_0))\tilde{D}^{-1}(\Delta a)],$$
$$\int \tilde{f}_0\,dX = 1. \qquad (1.12.3)$$

Дополнительное условие имеет вид

$$\int H(X, a_0)\tilde{f}_0(X, a_0, \Delta a)\,dX = \int H(X, a_0)\, f(X, a_0 + \Delta a)\,dX. \tag{1.12.4}$$

Из решения этого уравнения следует зависимость эффективной температуры $\tilde{D}$ от Δa:

$$\tilde{D} = \tilde{D}(\Delta a), \qquad \tilde{D}(\Delta a)\,|_{\Delta a=0} = D. \tag{1.12.5}$$

Обозначим через $\tilde{S}_0$ энтропию для состояния с распределением $\tilde{f}_0$. Тогда при условиях (2), (4) разность энтропий

$$\Lambda_S = \tilde{S}_0 - S = \int f \ln (f/\tilde{f}_0)\,dX \geqslant 0. \tag{1.12.6}$$

Здесь снова введено обозначение для функции Ляпунова Λ_S.

Итак, получены два результата (5), (6). Вывод о характере изменения степени упорядоченности при переходе $a_0 \to a_0 + \Delta a$ делаем на основе решения (5). Если имеет место неравенство

$$\tilde{D}(\Delta a) > D, \tag{1.12.7}$$

т. е. для выполнения условия (4) эффективная температура в состоянии с $a = a_0$ должна быть повышена, то $a_0 \to a_0 + \Delta a$ есть переход от менее упорядоченного состояния (состояния физического хаоса) в более упорядоченное состояние. При этом разность энтропий служит количественной мерой увеличения степени упорядоченности. Если неравенство (7) не выполняется, то изменение параметра a не является управляющим. Тогда возможен поиск новых управляющих параметров. Таким образом, на основе S-теоремы можно производить контроль правильности выбора управляющих параметров.

2. Для подтверждения сделанного вывода об относительной степени упорядоченности рассматриваемых состояний полезна проверка. Именно, обращаем рассматриваемые состояния: за физический хаос принимаем состояние с $a = a_0 + \Delta a$. Снова производим перенормировку соответствующего распределения; теперь имеем $\tilde{f}(X, a_0 + \Delta a)$ при условии постоянства средней энергии $\langle H(X, a_0 + \Delta a)\rangle$. Если при этом окажется, что для функции $\tilde{f}$ перенормированная эффективная температура $\tilde{D} < D$, то сделанный выше вывод подтверждается. Если же при сделанной инверсии $\tilde{D} > D$, то следует провести дополнительное сопо-

ставление результатов. Естественно в качестве более упорядоченного принять состояние, для которого изменение эффективной температуры $\tilde{D} - D$ оказывается меньшим.

При наличии нескольких управляющих параметров возможна оптимизация поиска наиболее упорядоченных состояний. Примеры рассмотрены в гл. 5.

Первые примеры расчета относительной степени упорядоченности состояний открытых систем по рассмотренному критерию проведены в работах (*Климонтович*, 1983 (3), 1984 (1)). Сформулированное выше утверждение было названо в этих работах «S-теорема». В названии буква S происходит от слова Selforgarization. Этим подчеркивается, что утверждение, составляющее содержание S-теоремы, является *критерием самоорганизации*.

Первый обзор дан в книге (*Эбелинг*, *Климонтович*, 1984). Общее доказательство S-теоремы приведено в работе (*Климонтович*, 1987 (2)). К числу наиболее новых относятся работы (*Энегель — Херберт* и *Эбелинг*, 1988; *Хакен*, 1988; *Климонтович* и *Бониц*, 1988).

При сравнении степени упорядоченности близких (по значениям управляющих параметров) состояний вывод о характере эволюции может быть сделан и на основе анализа функции Ляпунова Λ_S. Для этого наряду с выражением (6) надо рассмотреть производную Λ_S по Δa. Если имеет место неравенство

$$\frac{d\Lambda_S}{d\Delta a} = \frac{d}{d\Delta a}(\tilde{S}_0 - S) \geqslant 0, \qquad (1.12.8)$$

т. е. знаки функции Λ_S и ее производной совпадают, то состояние, принятое за физический хаос, неустойчиво.

1.13. S-теорема. Локальная формулировка

Наряду с (12.6) полезна другая форма записи выражения для разности энтропий $\tilde{S}_0$, S через функции распределения $\tilde{f}_0$, f.

Если на основе математической модели возможно определение эффективной функции Гамильтона $H(X, a)$ при всех значениях управляющих параметров (именно так было в (11.11)), то для состояния с $a = a_0 + \Delta a$ можно записать функцию Гамильтона в виде

$$H(X, a) = H(X, a_0) + U(X, \Delta a), \qquad U|_{\Delta a} = 0 \qquad (1.13.1)$$

и представить распределение $f(X, a)$ также в виде канонического распределения Гиббса (ср. с (12.1))

$$f(X, a_0 + \Delta a) = \exp\left[(F - H(X, a_0) - U(X, \Delta a))\, D^{-1}\right],$$
$$\int f\, dX = 1. \qquad (1.13.2)$$

Тогда выражение для разности энтропий можно записать (*Климонтович*, 1987 (2)) как

$$\tilde{S}_0 - S = \int \tilde{f}_0 (\eta \exp \eta - \exp \eta + 1)\, dX \geqslant 0. \quad (1.13.3)$$

Здесь введено обозначение для вспомогательной функции

$$\eta = \frac{F - H(X, a_0) - U(X, \Delta a)}{D} - \frac{\tilde{F}_0 - H(X, a_0)}{\tilde{D}(\Delta a)},$$
$$\eta(\Delta a = 0) = 0 \qquad (1.13.4)$$

и использовано неравенство

$$\eta \exp \eta - \exp \eta + 1 \geqslant 0. \qquad (1.13.5)$$

Рассмотрим два близких состояния a_0, $a_0 + \Delta a$ и проведем разложение на Δa около состояния, принятого за физический хаос. Обратимся к выражению (5). В первом неисчезающем приближении по Δa получим

$$\eta \exp \eta - \exp \eta + 1 = \eta^2/2, \qquad (1.13.6)$$

и, следовательно, разность энтропий определяется выражением

$$\tilde{S}_0 - S = \langle ((\partial\eta/\partial\Delta a_i)_0 \Delta a_i)^2 \rangle / 2. \qquad (1.13.7)$$

В выражении (7) производную удобно представить в виде

$$(\partial\eta/\partial\Delta a_i)_0 = D^{-1}(F_{\text{эф}\,i} - \langle F_{\text{эф}\,i} \rangle) = D^{-1}\delta F_{\text{эф}\,i}. \qquad (1.13.8)$$

Здесь введено обозначение для эффективной обобщенной силы

$$F_{\text{эф}\,i} = F_i + F_{Di}, \qquad (1.13.9)$$

в котором первое слагаемое связано с «потенциальной энергией»

$$F_i = -(\partial U/\partial\Delta a_i)_0, \qquad (1.13.10)$$

а второе с перенормированной интенсивностью шума

$$F_{Di} = -D^{-1} H(X, a_0)\, (\partial\tilde{D}/\partial\Delta a_i)_0, \quad (\partial\tilde{D}/\partial\Delta a_i)_0 < 0. \qquad (1.13.11)$$

Последнее неравенство — следствие условия (12.7).

Таким образом, уменьшение энтропии при переходе из состояния «1», принятого за физический хаос, в состояние «2» выражается через коррелятор эффективной силы:

$$\Lambda_S = \tilde{S}_0 - S = (1/2)\langle \delta F_{\text{эф}\,i} \delta F_{\text{эф}\,j} \rangle \Delta a_i \Delta a_j. \qquad (1.13.12)$$

Рассмотрим пример, когда имеется лишь один управляющий параметр. Тогда производная функции Ляпунова по Δa определяется выражением

$$d\Lambda_S / d\Delta a = \Delta a \langle (\delta F_{\text{эф}})^2 \rangle \geqslant 0, \qquad \Delta a \geqslant 0. \qquad (1.13.13)$$

Таким образом, если знак управления $\Delta a \geqslant 0$, то знаки функции Ляпунова и ее производной совпадают, поэтому состояние с $a = a_0$, принятое за физический хаос, неустойчиво. Это дает основание сделать заключение о начале процесса самоорганизации. Напротив, при $\Delta a < 0$ состояние физического хаоса устойчиво.

Отметим еще раз, что оценка относительной степени упорядоченности по S-теореме производится для состояний, переходы между которыми осуществляются при изменении управляющих параметров a. В тех случаях, когда управляющие параметры отсутствуют, надо использовать другие критерии для сравнения обсуждаемых состояний. Рассмотрим простейший пример.

Сравним состояния, которые описываются распределениями Максвелла с разными температурами:

$$f_0 = \left(\frac{m}{2\pi k T_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2kT_0}\right), \quad f_1 = \left(\frac{m}{2\pi k T_1}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2kT_1}\right). \qquad (1.13.14)$$

Примем условно состояние «0» за физический хаос. Сравнение состояний «0» и «1» может быть проведено по значениям энтропии (или информации) Шеннона (см. п. 5.1.5). Использование критерия на основе S-теоремы здесь невозможно, так как после перенормировки

$$\tilde{f}_0 = f_1 \quad \text{и, следовательно,} \quad \tilde{S}_0 = S_1. \qquad (1.13.15)$$

Состояния «0» и «1», однако, все же различны. Это различие выявляется путем использования функционала Ляпунова (11.3), определяемого разностью свободных энергий. Примем в (11.3) состояние «1» с f_1 за неравновесное. Тогда при малой разности температур

$$\Lambda_F = F_1 - F_0 = kT_0 \int f_1 \ln \frac{f_1}{f_0}\, d\mathbf{v} = \frac{k}{4} \frac{(T_0 - T_1)^2}{T_0} \geqslant 0. \qquad (1.13.16)$$

Отсюда находим производную функции Ляпунова:

$$d\Lambda_S/dT_0 = -d\Lambda_S/dT_1 = -\frac{k}{2}\frac{(T_1 - T_0)}{T_0}. \quad (1.13.17)$$

Таким образом, состояние «0» устойчиво при $T_1 > T_0$. Напротив, при $T_1 < T_0$ оно неустойчиво. Это означает, что при использовании термостата с температурой T_1 идет процесс выравнивания температур ($T_0 \to T_1$).

1.14. Сравнение относительной степени упорядоченности состояний открытых систем по S-теореме на основе экспериментальных данных

Для практического использования критерия относительной степени упорядоченности на основе S-теоремы (по приведенной выше схеме) необходима информация о структуре эффективной функции Гамильтона. Поскольку во многих случаях построение математических моделей затруднительно, то необходимы критерии, которые основываются непосредственно на экспериментальных данных. Тем самым отпадает необходимость использования математических моделей.

К числу таких критериев относятся К-энтропия, полей затруднительно, то необходимы критерии, которые могут быть найдены по реализациям рассматриваемых процессов. Покажем, что обработка экспериментальных данных с целью выявления относительной степени упорядоченности неравновесных состояний может быть проведена и на основе критерия S-теоремы (*Климонтович*, 1988).

Как и выше, начнем с выбора управляющего параметра a. Снова состояние с $a = a_0$ примем за состояние физического хаоса и сравним с ним степень упорядоченности состояния с $a_0 + \Delta a$ при $\Delta a > 0$.

Для выбранного набора внутренних параметров X рассматриваемого процесса используем найденные экспериментально реализации $X(t, a_0)$, $X(t, a_0 + \Delta a)$. Они выбираются достаточно длинными для возможности получения на их основе функций распределения

$$f(X, a_0), \quad f(X, a_0 + \Delta a), \quad \int f_0\, dX = \int f\, dX = 1. \quad (1.14.1)$$

По распределению f_0, отвечающему (по предварительному предположению) состоянию физического хаоса,

находим функцию

$$H_{эф} = -\ln f_0 \qquad (f_0 = \exp(-H_{эф})), \qquad (1.14.2)$$

которая в перенормированном распределении $\tilde{f}_0$ будет играть роль *эффективной функции Гамильтона*. Из (1), (2) следует, что для нахождения функции $H_{эф}$ не нужна дополнительная информация, кроме знания реализации $X(t, a_0)$. Среднее значение эффективной энергии по распределениям (1) зависит в общем случае от Δa. Произведем перенормировку к заданному значению $\langle H_{эф} \rangle$. Для этого введем перенормированное распределение $\tilde{f}_0$. Представим его в виде канонического распределения

$$\tilde{f}_0(X, a_0, \Delta a) = \exp\left[D^{-1}(\Delta a)(F(D) - H_0(X, a_0))\right], \quad \int \tilde{f}_0\, dX = 1. \qquad (1.14.3)$$

Зависимость эффективной свободной энергии от температуры $F(D)$ определим из условия нормировки функции $\tilde{f}_0$. Зависимость же эффективной температуры D от управления Δa находим путем решения уравнения

$$\int H_{эф}(X, a_0)\, \tilde{f}_0(X, a_0, \Delta a)\, dX = \int H_{эф} f(X, a_0 + \Delta a)\, dX, \qquad (1.14.4)$$

т. е. из условия постоянства среднего значения эффективной функции Гамильтона $H_{эф}$. После решения этого уравнения получим искомую функцию

$$D(\Delta a); \quad D(\Delta a)|_{\Delta a = 0} = 1, \qquad \Delta a \geqslant 0. \qquad (1.14.5)$$

Сравним выражения (2), (5) с соответствующими выражениями (12.1), (12.7) для распределений в состоянии физического хаоса и функций $D(\Delta a)$, $\tilde{D}(\Delta a)$, определяющих эффективные температуры в зависимости от Δa.

Мы видим, что формула (2) совпадает с (12.1) при частном выборе эффективной температуры $D = 1$. Вследствие этого значение свободной энергии в (2) и равно нулю. Такой «произвол» не является существенным при практическом использовании критерия. Ниже мы еще вернемся к этому вопросу при обсуждении практического использования предлагаемой схемы оценки относительной степени упорядоченности неравновесных состояний произвольной открытой системы.

Теперь, как и в **1.12**, по распределениям $\tilde{f}_0$, f находим разность энтропий:

$$\tilde{S}_0 - S = \int f \ln(f/\tilde{f}_0)\, dX \geqslant 0 \qquad (\langle H_{эф}(X, a_0)\rangle = \text{const}). \tag{1.14.6}$$

Если решение уравнения (4) таково, что

$$D(\Delta a) > 1, \quad D(\Delta a)|_{\Delta a=0} = 1, \tag{1.14.7}$$

то состояние при $a = a_0 + \Delta a$ является более упорядоченным, чем состояние с $a = a_0$, принятое ниже за состояние физического хаоса. Для подтверждения сделанного вывода необходима, однако, проверка, о которой уже шла речь в конце **1.12**. Она здесь еще более необходима в силу большего «произвола» в выборе эффективной функции Гамильтона $H_{эф}$.

Для проверки, как уже было сказано в **1.12**, надо провести расчеты для «прямого» (от a_0 к $a_0 + \Delta a$) и «обратного» (от $a_0 + \Delta a$ к a_0) процессов. Обозначим соответствующие перенормированные интенсивности шума — эффективные температуры через $\underset{\rightarrow}{D}$, $\underset{\leftarrow}{D}$. Наиболее «спорная» ситуация возникает, когда оба значения эффективной температуры больше единицы:

$$\underset{\rightarrow}{D}(\Delta a) > 1, \quad \underset{\leftarrow}{D}(\Delta a) > 1. \tag{1.14.8}$$

В этом случае естественным является следующее решение: процесс самоорганизации, т. е. переход к более упорядоченному состоянию, идет по направлению («по стрелке»), для которого перенормированная эффективная температура имеет большее значение.

В качество «затравочной» эффективной температуры в (2) можно, конечно, принять величину D, отличную от единицы. Выбор D_0 может быть проведен из условия удобства интерпретации результатов численного эксперимента.

В заключение, рассмотрим простой иллюстративный пример. Пусть распределения, найденные по экспериментальным реализациям, можно представить в виде одномерных распределений Максвелла (распределений Гаусса) с $H_{эф} = v^2/2 + \ln\sqrt{2\pi}$ (ср. (13.14)):

$$\begin{aligned} f_0 &= (2\pi)^{-1/2} \exp(-v^2/2), \\ f_1 &= (2\pi T)^{-1/2} \exp(-(v-u)^2/2T). \end{aligned} \tag{1.14.9}$$

Состояние «0» примем за физический хаос. В состоянии

«1» роль управляющего параметра играет u — средняя скорость. После перенормировки к заданному значению $\langle v^2 \rangle$ ($f_0 \to \tilde{f}_0$) получим

$$D \equiv \tilde{T} = T + u^2, \; \tilde{S}_0 - S = (1/2)\ln[(T+u^2)/T] \geqslant 0. \quad (1.14.10)$$

Условие «нагрева» (7) имеет, таким образом, вид $T + u^2 > 1$.

При нулевом значении управляющего параметра ($u = 0$) распределение $\tilde{f}_0 = f_1$ и, следовательно, состояния «0» и «1» по S-теореме неразличимы, поскольку имеют одинаковую структуру. В этом случае сравнение состояний «0» и «1» может быть проведено по значениям энтропии Кульбака (см. 1.11) или энтропии Шеннона (см. п. 5.1.5).

В гл. 5 рассмотрены более содержательные примеры и проведено сопоставление критерия, выражаемого S-теоремой, с другими критериями степени упорядоченности.

1.15. Динамическое и статистическое описание сложных движений. К-энтропия, показатели Ляпунова. Нелинейные характеристики расходимости траекторий

Ранее отмечено, сколь драматичным было «соперничество» динамической и статистической теорий при описании сложных движений в открытых макроскопических системах. Хотя «накал страстей» в настоящее время существенно ослаб, эти два направления и по сей день развиваются в значительной степени независимо, несмотря на значительные усилия в направлении их объединения (*Крылов*, 1950; *Заславский*, 1984; *Чириков*, 1985; *Пригожин*, 1985; *Климонтович*, Послесловие к книге Пригожина и 1987 (6)). В этих работах рассматриваются вопросы о роли динамической неустойчивости в зарождении необратимости и в обосновании статистической теории. Частично эти вопросы уже обсуждались в 1.5. Продолжим это обсуждение.

Начнем с некоторого уточнения терминологии.

Выделим два класса систем: динамические и стохастические (статистические). Такое разделение, как, впрочем, и любое другое, является условным и, конечно, не общепринятым. Так, например, известная работа Я. Г. Синая (*Синай*, 1979) называется «Стохастичность динамических систем». Иная классифи-

кация предложена и в книге (*Неймарк*, *Ланда*, 1987). На каком же основании возможно такое разделение?

Его можно провести на основе численного эксперимента. В основу классификации положим свойство воспроизводимости движения по заданным начальным условиям. Тогда, по определению, к динамическим относятся *воспроизводимые*, а к стохастическим (статистическим) — *невоспроизводимые* по начальным данным движения в диссипативных системах.

Естественно, что в реальных системах, когда шумы неизбежны, все процессы в той или иной степени являются стохастическими. При численном же эксперименте с динамическими диссипативными системами возможно точное повторение (в рамках заданной разрядности) начальных условий. При этом воспроизводимость зависит лишь от структуры математической модели. Если уравнения не содержат случайных источников, то процесс воспроизводим и движение является динамическим, хотя оно может быть и *непредсказуемым* из-за его сложности.

При исследовании стохастических процессов путем численного эксперимента надо иметь в виду следующее.

Источники случайных чисел в компьютерах построены по определенному алгоритму и являются поэтому фактически детерминированными. Они могут рассматриваться и как случайные, если характерные времена повторения для них много больше характерных времен релаксации рассматриваемой динамической диссипативной системы.

Сложные движения в динамике были обнаружены первоначально в гамильтоновых системах. Для их характеристики и было введено понятие «динамический хаос». В настоящее время этот термин широко используется и для характеристики сложных движений в диссипативных динамических системах. Рассмотрим основные черты динамического хаоса.

Основной особенностью динамического хаоса является *динамическая неустойчивость движения* — экспоненциальная расходимость близких в начальный момент траекторий, вследствие чего имеется высокая чувствительность к изменению начальных условий. Мерой экспоненциальной расходимости и служит К-энтропия (энтропия Крылова — Колмогорова — Синая). К-энтропия связана со средней скоростью разбегания близких в начальный момент траекторий и, следовательно, с показателями Ляпунова. В явном виде эта связь установлена в работе (*Песин*, 1977). К-энтропия выражается через

положительные показатели Ляпунова по формуле

$$K = \sum_i \lambda_i \qquad (\lambda_i > 0). \tag{1.15.1}$$

Таким образом, К-энтропия равна нулю, если нет положительных показателей Ляпунова.

Рассмотрим для примера одномерное движение, устойчивость которого характеризуется одним показателем Ляпунова. Если он положителен, то $K = \lambda > 0$. Для непрерывного процесса величины K, λ определяются выражением (см., например, (2.7) в книге: *Шустер*, 1988)

$$K = \lambda = \lim_{t\to\infty} \lim_{D(0)\to 0} t^{-1} \ln [D(t)/D(0)]. \tag{1.15.2}$$

Здесь $D(t) = [(x_1(t) - x_2(t))^2]^{1/2}$, $D(0)$ — расстояния между траекториями в текущий t и в начальный $t = 0$ моменты времени. Для нелинейной диссипативной системы величины K, λ определяются путем численного эксперимента и, следовательно, при использовании той или иной дискретной схемы. В связи с этим возникает вопрос определения этих величин, когда предельный переход $D(0) \to 0$ не может быть осуществлен из-за конечности $D_{\min}$.

Возможны разные формы записи логистического уравнения. Здесь выбираем ту, которая диктуется структурой уравнения для энергии генерации в дискретном времени (см. 5.4):

$$x_{n+1} = F(x_n), \quad F(x) = (a + 1 - x)x, \\ 0 \leqslant x \leqslant 4, \quad 0 \leqslant a + 1 \leqslant 4. \tag{1.15.3}$$

Для логистического уравнения показатель Ляпунова определяется не зависимым от (2) выражением (см., например, Шустер, 1988, формула (2.9))

$$K = \lambda = \lim_{n\to\infty} n^{-1} \sum_{k=0}^{n-1} \ln \left| \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{x_k}. \tag{1.15.4}$$

Вывод этого выражения из (2) не является последовательным, так как при конечном $D_{\min}$ и при конечном (для логистического уравнения) размере аттрактора величина K равна нулю. По этой причине выражение (4) и можно принять *за независимое определение показателя Ляпунова* для процесса в дискретном времени с единичным шагом.

Показатель Ляпунова характеризует (в среднем) роль отклонений на отдельных шагах процесса при нулевом начальном расстоянии на каждом шаге. Это позволяет

выделить усредненный вклад участков, на которых происходит экспоненциальное разбегание траекторий. В этом смысле (4) — критерий по малым отклонениям.

Характерным для такого приближения является обращение показателя Ляпунова в нуль в точках бифуркации, что отвечает бесконечным временам корреляции. В этом, в частности, и проявляется ограниченность критерия по линейному приближению. Детали перехода в этом приближении выпадают из рассмотрения.

Наряду с (4) для роцесса в дискретном времени можно использовать следующую нелинейную характеристику расходимости траекторий:

$$K_{\text{нл}} = \lim_{n\to\infty} n^{-1} \sum_{k=1}^{n} \ln \frac{D(k)}{D(0)},$$
$$D(k) = \sqrt{(x_1(k) - x_2(k))^2}. \qquad (1.15.5)$$

Это выражение определяет среднее по времени значение логарифма отношения расстояний между траекториями в текущий и в начальный моменты времени. В отличие от (4) в (5) сохраняется зависимость от начального расстояния. При численном эксперименте величину $D(0)$ можно выбрать в соответствии с целью эксперимента.

Следствием экспоненциальной расходимости близких в начальный момент траекторий — динамической неустойчивости движения, является свойство перемешивания, важная роль которого в обосновании статистической теории выявлена в работах Н. С. Крылова (*Крылов*, 1950).

Существуют и другие характеристики динамического хаоса (непрерывность спектра, конечность времени корреляции). Они, однако, являются следствием динамической неустойчивости движения, критерием которой и служит К-энтропия.

В **1.16** мы рассмотрим еще одну важную характеристику расхождения траекторий — функцию распределения расстояний при разных значениях управляющего параметра $f(D, a)$, а также соответствующее временное распределение $f(D, t)$.

Основываясь на этих критериях, мы покажем на ряде примеров, что процессы самоорганизации возможны в открытых системах и при наличии динамической неустойчивости движения макроскопических характеристик.

В заключение сделаем небольшой экскурс в историю вопроса.

После классических работ А. Пуанкаре можно выделить два этапа особенно бурного развития динамической теории диссипативных систем.

Первый связан с возникновением радиотехники, с необходимостью развития теории автоколебаний. Существенный прогресс здесь достигнут в работах Ван дер Поля, А. А. Андронова, А. А. Витта, Л. С. Понтрягина, Н. М. Крылова и Н. Н. Боголюбова.

Второй этап развития динамической теории в значительной степени стимулировался проблемами теории турбулентности и связанными с ней проблемами долгосрочного прогноза погоды. В этот период выполнены замечательные работы А. Н. Колмогорова, Л. Д. Ландау, Д. Биркгофа, Дж. Неймана, Э. Хопфа, Д. В. Аносова, В. И. Арнольда, Ю. Мозера, Я. Синая, М. Фейгенбаума, Э. Лоренца, Д. Рюэлля, Ф. Такенса, Ю. И. Неймарка, Л. П. Шильникова. Естественно, что этот список можно существенно продолжить.

Почти все основные работы этого периода собраны в сборнике «Хаос» (*Хао Бай Линь* (ред.), 1985). Термины «динамический хаос», «детерминистический хаос» в последние годы стали чрезвычайно популярными. Отметим четыре книги, которые целиком или в значительной мере посвящены проблемам динамического хаоса (*Холден* (ред.), 1986; *Шустер*, 1984; *Лихтенберг*, *Либерман*, 1984; *Неймарк*, *Ланда*, 1987).

Особо стоит отметить книгу Джеймса Глейка (*Глейк*, 1988), которая не является научным исследованием. В ней не предлагаются пути решения давно назревших проблем долгосрочного прогноза различных процессов в системах со сложным движением. В книге дается интересное, содержательное и яркое описание бурного развития новых представлений о взаимоотношении хаоса и порядка, описание того, как это происходило; рассказано о многих людях, которые внесли существенный вклад в развитие современных представлений о хаосе и порядке.

1.16. Критерии динамической неустойчивости движения в статистической теории

1.16.1. Функция распределения расстояний между траекториями. В 1.15 К-энтропия использовалась в качестве количественной характеристики динамической неустойчивости движения — экспоненциального разбегания траекторий. На примере одномерного логистического уравне-

ния (15.3) были получены два выражения для К-энтропии. Первое из них, (15.4), определяет среднее по траектории расхождение траекторий на одном шаге дискретного времени. При наличии экспоненциальной расходимости показатель Ляпунова и, следовательно, К-энтропия положительны. Второе выражение, (15.5), определяет соответствующую нелинейную характеристику $K_{нл}$ — среднее по времени значение логарифма отношения расстояний между траекториями в текущий и в начальный моменты времени. Эта характеристика полностью отражает нелинейность движения и при наличии динамической

Рис. 1. Зависимость К-энтропии (показателя Ляпунова λ) от управляющего параметра $A = a + 1$ для области значений $3{,}5 \leqslant A \leqslant 4$. Кривая *1* — расчет проведен согласно (1.15.4), кривая *2* — согласно (1.15.5); для кривой *2* область около $A = 3{,}83$ отвечает наиболее широкой области упорядоченности

неустойчивости значительно превышает линейную характеристику (15.4). Для сравнения на рис. 1 приведены обе характеристики K (кривая *1*) и $K_{нл}$ (кривая *2*) в зависимости от управляющего параметра.

В статистической теории для описания расходимости траекторий — динамической неустойчивости реальных систем, т. е. систем с учетом внутренних и внешних шумов, естественно использовать функцию распределения расстояний между траекториями. Наиболее простой является ситуация, когда по двум достаточно длинным реали-

зациям выбранного процесса $x_1(k, a)$, $x_2(k, a)$, отвечающим начальным условиям $x_1(0, a)$, $x_2(0, a)$, можно построить двухточечное стационарное распределение, т. е. найти инвариантную меру

$$f(x_1, x_2, a), \qquad \int f(x_1, x_2, a)\, dx_1\, dx_2 = 1. \qquad (1.16.1)$$

Это распределение находится по экспериментальным данным, поэтому оно учитывает все статистические факторы, связанные как с динамической неустойчивостью, так и с внутренними и внешними шумами. По распределению (1) определим стационарное распределение расстояний между траекториями

$$f(D, a) = \int \delta\left(D - \sqrt{(x_1 - x_2)^2}\right) f(x_1, x_2, t)\, dx_1\, dx_2. \quad (1.16.2)$$

Оно в свою очередь используется для определения соответствующей энтропии Шеннона

$$S(a) = -\int f(D, a) \ln f(D, a)\, dD. \qquad (1.16.3)$$

Энтропия Шеннона может быть использована для оценки сравнительной степени упорядоченности состояний, отвечающих различным значениям управляющего параметра a, по критерию S-теоремы. Для этого надо провести расчеты по схеме 1.14.

На рис. 2 для иллюстрации приведены графики распределения функции $f(D, a)$, построенные по решениям логистического уравнения (15.3). Распределения $f(D, a)$ на рис. 2*а*, *б*, *е* отвечают областям простых аттракторов: *а* — предельный цикл с 2-кратным периодом; *б* — предельный цикл с 8-кратным периодом; *е* — предельный цикл с 3-кратным периодом (наиболее широкая область упорядоченности). Распределения на рис. 2*в* — *д*, *ж*, *з* — примеры непрерывных распределений для областей странного аттрактора при различных значениях управляющего параметра A. Распределение на рис. 2*з* отвечает состоянию наибольшего динамического хаоса ($A = 4$).

При применении критерия, основанного на S-теореме, для оценки относительной степени упорядоченности состояний системы с несколькими степенями свободы (система Лоренца, генератор с инерционной нелинейностью (см. 5.2)) выбор функции распределения, по которой строится энтропия, естественно, неоднозначен. Можно предположить, что для систем, в которых сложные движения в значительной степени обусловлены наличием

Рис. 2. Серия стационарных (инвариантных) распределений $f(D; A)$ ($A = a + 1$), полученных по решениям логистического уравнения (1.15.3) для области значений управляющего параметра $3{,}5 \leqslant A \leqslant 4$

динамической неустойчивости, функция распределения расстояний $D = \left(\sum_{1<i<n} (x_{1i} - x_{2i})^2\right)^{1/2}$ в n-мерном фазовом пространстве будет одной из наиболее информативных. Однако всегда остается возможность использования и функции распределения полного набора переменных.

1.16.2. К-энтропия и производство энтропии в статистической теории. Снова рассмотрим две траектории в фазовом пространстве системы, отвечающие двум различным начальным условиям, и введем соответствующее динамическое распределение

$$f^{(д)}(x_1, x_2, t, a) = \delta(x_1 - x_1(t, a))\,\delta(x_2 - x_2(t, a)), \quad (1.16.4)$$

с помощью которого найдем распределение, сглаженное по временному интервалу:

$$f^{(T)}(x_1, x_2, t) = T^{-1} \int_t^{t+T} \delta(x_1 - x_1(t', a))\,\delta(x_2 - x_2(t', a))\,dt'. \quad (1.16.5)$$

Предположим, что выполнено локальное условие эргодичности (4.19). Тогда можно ввести соответствующее распределение по ансамблю $f(x_1, x_2, t)$. Если временной интервал сглаживания меньше времени установления стационарного распределения (инвариантной меры), то введенные функции распределения зависят от времени. Тогда от времени будет зависеть и распределение расстояний между траекториями

$$f(D, t, a) = \int \delta\left(D - \sqrt{(x_1 - x_2)^2}\right) f(x_1, x_2, t)\,dx_1\,dx_2. \quad (1.16.6)$$

Если для функции распределения можно найти кинетическое уравнение с интегралом столкновений $I(D, t)$, то для энтропии Шеннона можно записать соответствующее уравнение баланса:

$$dS/dt = \int (-\ln f(D, t))\,I(D, t)\,dD \equiv \sigma(t). \quad (1.16.7)$$

Поскольку, однако, такого рода кинетические уравнения еще не рассматривались, то приходится использовать более огрубленное описание. Именно, с помощью распределения $f(D, t)$ введем две характеристики: среднее расстояние в момент времени t и эффективное расстояние $\Delta D(t)$. Эти величины определяются выражениями

$$\langle D(t)\rangle = \int D f(D, t)\,dD, \quad \Delta D(t) = f^{-1}(\langle D\rangle, t). \quad (1.16.8)$$

При малых отклонениях $D-\langle D\rangle$ от выражения для энтропии

$$S(t) = -\int f(D, t)\ln f(D, t)\,dD \qquad (1.16.9)$$

можно перейти к приближенной «формуле Больцмана»

$$S(t) = \ln \Delta D(t). \qquad (1.16.10)$$

С ее помощью находим равенство

$$S(t) - S(t_0) = \ln[\Delta D(t)/\Delta D(t_0)]. \qquad (1.16.11)$$

Видно, что с ростом энтропии, характеризующей неопределенность задания расстояний между траекториями, увеличивается и эффективное расстояние $\Delta D(t)$. С помощью (11) определим среднюю скорость изменения энтропии за интервал $t-t_0$ — статистический аналог К-энтропии:

$$K_{\text{стат}} = \frac{S(t) - S(t_0)}{t - t_0} = \frac{1}{t - t_0}\ln\frac{\Delta D(t)}{\Delta D(t_0)}. \qquad (1.16.12)$$

Таким образом, $K_{\text{стат}}$ определяет среднее за конечный промежуток времени изменение энтропии. Локальное изменение энтропии определяется уравнением, которое следует из (10) и имеет вид

$$dS/dt = d(\ln \Delta D(t))/dt \equiv \sigma(t). \qquad (1.16.13)$$

Мы видим, что производство энтропии не является здесь знакоопределенным: оно возрастает, если возрастает со временем среднее эффективное расстояние между траекториями, и уменьшается в противоположном случае. Изменение энтропии прекращается, когда устанавливается стационарное состояние с распределением расстояний, не зависящим от времени. При этом при заданном значении управляющего параметра прекращается и изменение эффективного расстояния между траекториями $\Delta D(t)$. Выражение для энтропии принимает тогда вид

$$S(a) = \ln \Delta D(a). \qquad (1.16.14)$$

Чтобы сравнить относительную степень упорядоченности состояний, отвечающих различным значениям управляющего параметра, можно воспользоваться снова критерием, основанным на S-теореме. Как и выше (см. 1.12, 1.14), эта задача может быть решена двумя способами. Первый способ основан на использовании стационарного решения кинетического уравнения для функции

распределения $f(D, t)$. Такого рода уравнения пока еще не рассматривались. Второй способ основан непосредственно на экспериментальных данных. Расчеты могут быть проведены по схеме, описанной в 1.14. Полученные таким путем результаты полезно сопоставить с найденными по другим критериям, например с помощью расчета К-энтропии или соответствующих показателей Ляпунова. Такое сопоставление на конкретном примере проводится в п. 5.4.2.

1.17. Энтропия — мера разнообразия в процессах биологической эволюции

Напомним, что были выявлены различные роли энтропии Больцмана — Гиббса — Шеннона. Энтропия обладает совокупностью свойств, позволяющих принять ее за меру неопределенности в статистической теории и теории информации.

Поскольку, например, в изолированном газе Больцмана в процессе эволюции к равновесному состоянию энтропия монотонно возрастает, то свойства энтропии дают основания считать, что равновесное состояние является наиболее хаотическим.

К выводу о максимальной степени хаотичности равновесного состояния приводит и теорема Гиббса. И этот вывод также основан на свойствах энтропии, позволяющих использовать ее в качестве меры неопределенности при статистическом описании.

Как мы видели, роль энтропии существенно расширяется при решении задачи об относительной степени упорядоченности неравновесных состояний открытых систем. Здесь нет выделенного равновесного состояния и нет канонического распределения Гиббса, которое определяется функцией Гамильтона. Можно, однако, рассматривать эволюцию в пространстве управляющих параметров и по значениям энтропии, перенормированным к заданному значению эффективной функции Гамильтона, судить об относительной степени упорядоченности разных неравновесных состояний. Это дает возможность отличить процессы самоорганизации от процессов дезорганизации, ведущих к более хаотичным состояниям.

Такие вопросы не ставились в традиционной статистической физике и в теории информации.

Покажем теперь на простейшем примере, что энтропия может играть еще одну роль: служить мерой

разнообразия состояний — «видов», необходимого для естественного отбора и, следовательно, для существования (по Дарвину) самого процесса биологической эволюции.

Несмотря на существенный прогресс, проблема биологической эволюции относится, несомненно, к числу самых интересных нерешенных проблем. В предложенных к настоящему времени моделях биологической эволюции (*Эйген*, 1973; *Эбелинг*, *Фейстель*, 1982; *Волькенштейн*, 1984) широко используются понятия и методы современной статистической теории неравновесных процессов, о которых шла речь выше. При этом биологическая эволюция, в частности самоорганизация, представляется как последовательность неравновесных фазовых переходов, в результате которых могут возникать более упорядоченные и более высокоорганизованные структуры.

Сформулируем простейшую замкнутую математическую модель, отражающую некоторые существенные черты биологической эволюции.

Как и выше, обозначим через X набор переменных, характеризующих состояние рассматриваемой системы, через $f(X, t)$ — соответствующую функцию распределения, а через Ω — объем области, в которой заключены значения X. При однородном распределении по всем переменным функция распределения $f(X) = \Omega^{-1}$.

В работе (*Эбелинг*, *Энгель*, 1986) при описании биологической эволюции для функции $f(X, t)$ использовалось уравнение реакционно-диффузионного типа (см. гл. 5)

$$\frac{\partial f(X, t)}{\partial t} = (E(X) - \langle E(X)\rangle) f(X; t) + D\frac{\partial^2 f}{\partial X^2}. \quad (1.17.1)$$

Оно является аналогом уравнения Фишера и Эйгена в дискретном пространстве. Величина D характеризует интенсивность случайных воздействий, приводящих к мутациям. Первый член правой части имитирует воспроизводимость (саморепродукцию) «видов», а второй — отбор (селекцию). Оба процесса определяются функцией «ландшафта» $E(X)$, которая является весьма сложной. В общем случае функция $E(X)$, естественно, неизвестна, поэтому уравнение не является замкнутым.

Замыкание уравнения возможно лишь при допущении обратного воздействия на «ландшафт». Рассмотрим простейшую возможность такого замыкания. Именно, допустим, что «ландшафт» функционально зависит от распре-

деления $f(X, t)$ через функцию, которую мы примем за *меру разнообразия.*

Систему, как и выше, характеризуем функцией распределения $f(X, t)$. Наряду со средней энтропией $S \equiv \langle S \rangle = -\int f \ln f \, dX$ введем неусредненную — локальную энтропию $S(X, t) = -\ln f(X, t)$. В качестве меры разнообразия примем выражение

$$W(X, t) = \ln(\Omega f(X, t)), \quad \langle W \rangle = \ln \Omega - \langle S \rangle. \quad (1.17.2)$$

При однородном распределении $f(X) = \Omega^{-1}$ и разнообразие равно нулю.

Естественно, что для процесса эволюции, основанного на принципе естественного отбора, важно не только среднее значение разнообразия $\langle W \rangle$, но и распределение значений разнообразия (или энтропии) $f(W, t)$. Оно связано с распределением $f(X, t)$ равенством (ср. 1.3)

$$f(W, t) = \int \delta(W - \ln(\Omega f)) f(X, t) \, dX. \quad (1.17.3)$$

С помощью этого распределения можно найти, в частности, $\langle W \rangle$.

Чтобы замкнуть (1), определим функцию «ландшафта» выражением $E = \alpha \ln(\Omega f)$. Здесь α — *параметр эволюции.* В результате приходим к следующему уравнению:

$$\partial f / \partial t = \alpha(\ln f - \langle \ln f \rangle) f + D \, \partial^2 f / \partial X^2. \quad (1.17.4)$$

Запишем соответствующее уравнение баланса энтропии

$$dS/dt = -\alpha(\langle (\ln f)^2 \rangle - \langle \ln f \rangle^2) + D \int f^{-1} (\partial f / \partial X)^2 \, dX, \quad (1.17.5)$$

которое при $\alpha < 0$ можно представить в виде

$$dS/dt = \sigma(t) \geqslant 0. \quad (1.17.6)$$

Здесь введено обозначение для производства энтропии

$$\sigma(t) = |\alpha| (\langle W^2 \rangle - \langle W \rangle^2) + D \int f^{-1} (\partial f / \partial X)^2 \, dX. \quad (1.17.7)$$

Отсюда вытекает, что в установившемся состоянии распределение однородно и разнообразие отсутствует:

$$f = \Omega^{-1} \quad \text{и, следовательно,} \quad W = \ln(\Omega f) = 0. \quad (1.17.8)$$

При $\alpha = 0$ происходит эволюционный фазовый переход — *фазовый переход к разнообразию.* При $\alpha > 0$ возможен процесс эволюции; он ведет к стационарному (неравновесному) распределению, если существует устойчивое

решение уравнения

$$D\, d^2f/dX^2 + \alpha f \ln f = \alpha f \langle \ln f \rangle. \qquad (1.17.9)$$

Собственные значения этого уравнения определяют возможные значения среднего разнообразия $\langle W \rangle$ (или энтропии $\langle S \rangle$). Из уравнения (5) при $\alpha > 0$ находим дисперсию разнообразия (или энтропии) в стационарном состоянии:

$$\langle (W - \langle W \rangle)^2 \rangle = \frac{D}{\alpha} \int f^{-1} \left(\frac{\partial f}{\partial X} \right)^2 dX. \qquad (1.17.10)$$

Она пропорциональна интенсивности D, вызывающей мутации. В этом проявляется положительная роль случайных процессов, приводящих к мутациям.

Наличие дисперсии разнообразия (или энтропии) и определяет саму возможность выбора пути развития в процессе эволюции, так как делает возможным естественный (без внешнего вмешательства) отбор.

Итак, мы рассмотрели простейшую *математическую модель эволюционного фазового перехода*. Естественно, что эта модель дает лишь самое упрощенное описание возникновения процесса эволюции, но она все же полезна, так как позволяет продемонстрировать еще одну возможную роль энтропии. Теперь энтропия служит мерой разнообразия, необходимого для естественного отбора и, следовательно, для существования самого процесса биологической эволюции.

В дальнейшем мы многократно возвратимся к вопросу о роли энтропии при рассмотрении эволюции в открытых системах. В заключение гл. 1 покажем, что поведение производства энтропии при неравновесных фазовых переходах также может служить критерием самоорганизации.

1.18. Принцип минимума производства энтропии в процессах самоорганизации

В работах И. Пригожина по неравновесной термодинамике (*Пригожин*, 1960; см. также *Стратонович*, 1985, § 14, 27) сформулирован «Принцип минимума производства энтропии в стационарных состояниях». Он может быть выражен неравенством

$$d^2S/dt^2 = d\sigma/dt \leqslant 0, \qquad \sigma_{ст} \leqslant \sigma(t). \qquad (1.18.1)$$

Здесь $\sigma_{ст}$ — производство энтропии в стационарном состоянии, $\sigma(t)$ — производство энтропии в момент t процесса

установления стационарного состояния. Справедливость неравенства (1) была доказана для линейных необратимых процессов, т. е. в рамках линейной термодинамики.

Оставался открытым вопрос: можно ли обобщить результат Пригожина на случай нелинейных термодинамических систем? Проведенные исследования показали, что такой возможности нет (см., например, *Стратонович*, 1985). Точнее можно сказать, что обобщение возможно, но при условиях, которые могут реализоваться лишь в частных ситуациях.

При использовании неравенства (1) речь идет о временной эволюции. Рассмотрим другую возможность.

Как и при формулировке S-теоремы (см. 1.12—1.14), рассмотрим эволюцию стационарных состояний открытой системы в пространстве управляющих параметров a. Предположим, что точка $a_{кр}$ является критической для неравновесного фазового перехода, в результате которого устанавливается новое устойчивое стационарное решение. Производство энтропии в устойчивом состоянии при $a > a_{кр}$ обозначим через $\sigma_{уст}$. Мысленно продолжим в эту область и «старое» стационарное состояние, которое было устойчивым лишь при $a < a_{кр}$. Производство энтропии этого мысленного (неустойчивого при $a > a_{кр}$) состояния обозначим через $\sigma_{неуст}$. Можно ли сделать какое-либо общее заключение о соотношении величин $\sigma_{уст}$, $\sigma_{неуст}$?

В гл. 6, посвященной теории турбулентного движения, проведен расчет производства энтропии течения Пуазейля в трубке при разных значениях числа Рейнольдса Re. При $\mathrm{Re} < (\mathrm{Re})_{кр}$ стационарный поток является ламинарным, а при $\mathrm{Re} > (\mathrm{Re})_{кр}$ — турбулентным потоком. Производство энтропии в стационарном турбулентном потоке обозначим через $\sigma_{турб}$. Оно соответствует введенной выше величине $\sigma_{уст}$. Производство энтропии в воображаемом (неустойчивом при $\mathrm{Re} > (\mathrm{Re})_{кр}$) ламинарном потоке обозначим через $\sigma_{лам}$; $\sigma_{лам}$ соответствует введенной выше величине $\sigma_{неуст}$.

В гл. 6, посвященной теории турбулентности, проведен, в частности, расчет величин $\sigma_{турб}$, $\sigma_{лам}$ при выполнении некоторого дополнительного условия. Оно аналогично фиксации средней эффективной энергии при расчете энтропии по S-теореме. Выбор дополнительного условия при расчете производства энтропии диктуется структурой выражения, определяющего производство энтропии. На этом основании при расчете производства энтропии турбулентного и воображаемого (неустойчивого) ламинар-

ного потока фиксируется напряжение на стенках трубы. Расчет показал, что при указанном дополнительном условии выполняется неравенство

$$\sigma_{турб} \leqslant \sigma_{лам}. \qquad (1.18.2)$$

Следовательно, устойчивому состоянию отвечает меньшее значение производства энтропии, чем продолженному в неустойчивую область ламинарному потоку.

Основываясь на этом конкретном результате, можно сформулировать более общее утверждение, которое назовем «Принцип минимума производства энтропии в процессах самоорганизации». Смысл утверждения состоит в следующем.

Рассмотрим процесс самоорганизации как результат неравновесного фазового перехода. Это может быть, конечно, и последовательность фазовых переходов. Используя введенные выше обозначения $\sigma_{уст}$, $\sigma_{неуст}$, выразим сформулированный выше принцип неравенством

$$\sigma_{уст} \leqslant \sigma_{неуст}. \qquad (1.18.3)$$

Таким образом, производство энтропии в новом устойчивом состоянии, возникшем после очередного неравновесного фазового перехода, меньше производства энтропии старого, но продолженного в неустойчивую область состояния системы. Расчет величин $\sigma_{уст}$, $\sigma_{неуст}$ производится при дополнительном условии, которое диктуется структурой выражения для производства энтропии.

Приведенный принцип минимума производства энтропии сформулирован на основе частного примера. Вопрос об общем доказательстве остается открытым. Мы вернемся к нему в гл. 6.

Глава 2

ПЕРЕХОД ОТ ОБРАТИМЫХ УРАВНЕНИЙ МЕХАНИКИ К НЕОБРАТИМЫМ УРАВНЕНИЯМ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ

В гл. 1 на примере газа Больцмана обсуждались некоторые вопросы обоснования статистической теории неравновесных процессов. Исходными служили уравнения движения для атомов — уравнения Гамильтона и соответствующие уравнения для динамических распределений $N(x, t)$, $f_N^{(д)}(X, t)$ (1.2.1), (1.2.5).

Для газа Больцмана были определены физически бесконечно малые масштабы $l_ф$, $\tau_ф$. Сглаживание по объему $V_ф$ определило начальный этап от обратимых уравнений к необратимым.

На примере газа Больцмана была продемонстрирована и конструктивная роль динамической неустойчивости движения атомов, которая определяет возможность и необходимость перехода от микроскопических обратимых уравнений к значительно более простым уравнениям для макроскопических характеристик, в частности, к уравнениям для функций распределения $f(x, t)$, $\tilde{f}(x, t)$. Здесь эти вопросы обсуждаются и анализируются на широком классе систем.

Заметим, что функция Гамильтона играет при переходе к статистическому описанию двоякую роль. Она определяет вид исходных уравнений Гамильтона для частиц газа и она же определяет вид канонического распределения Гиббса, которое описывает равновесное состояние и устанавливается в процессе релаксации к равновесию.

Соответственно этому существуют и два вида обратимых процессов. Одни описываются обратимыми уравнениями движения — уравнениями Гамильтона, а другие

формируются последовательностью равновесных состояний — *квазистатические процессы.*

Между этими двумя видами обратимых процессов имеется глубокая связь, анализ которой и составляет основное содержание настоящей главы. Эта связь состоит прежде всего в том, что обратимые процессы по уравнениям Гамильтона порождают вследствие динамической неустойчивости движения необратимые процессы, которые описываются кинетическими уравнениями. Диссипативные кинетические уравнения и описывают релаксацию к равновесному состоянию. Таким образом, сам переход от первого вида обратимых процессов ко второму лежит через необратимость.

2.1. Два вида обратимых процессов. Свойства симметрии функций распределения

В 1.2 было введено динамическое распределение $f_N^{(д)}(X, t)$ (1.2.5). Уравнение для этого распределения является прямым следствием уравнений Гамильтона для элементарных объектов рассматриваемой системы и может быть записано в виде

$$\frac{\partial f_N^{(д)}}{\partial t} + [Hf_N^{(д)}] = 0,$$
$$[\cdots] = \sum_{1 \leqslant i \leqslant N} \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} \frac{\partial f_N^{(д)}}{\partial \mathbf{r}_i} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} \frac{\partial f_N^{(д)}}{\partial \mathbf{p}_i} \right). \tag{2.1.1}$$

Здесь использовано обозначение для скобок Пуассона.

Рассмотрим уравнения для динамического распределения $N(x, t)$ в 6-мерном фазовом пространстве координат и импульсов (см. (1.2.1)). Уравнение для этой функции в силу определения (1.2.1) также является прямым следствием уравнений Гамильтона для частиц системы. Его удобно записать в виде системы двух уравнений для функции $N(x, t)$ и микроскопической силы $\mathbf{F}^{м}(\mathbf{r}, t)$, которая сама определяется динамическим распределением $N(x, t)$:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial N}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}^{м}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial N}{\partial \mathbf{p}} = 0, \tag{2.1.2}$$

$$\mathbf{F}^{м}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \int \Phi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) N(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t)\, d\mathbf{r}'\, d\mathbf{p}'.$$

Уравнения для динамических распределений, как и исходные уравнения Гамильтона, являются инвариант-

ными по отношению к преобразованию

$$t \to -t; \quad \mathbf{r}_i \to \mathbf{r}_i, \ \mathbf{p}_i \to -\mathbf{p}_i, \quad i = 1, 2, \ldots, N. \qquad (2.1.3)$$

При этом сами динамические распределения обладают временной симметрией:

$$f_N^{(\text{д})}(\ldots, \mathbf{r}_i, \ldots, \mathbf{p}_i, \ldots, t) = f_N^{(\text{д})}(\ldots, \mathbf{r}_i, \ldots, -\mathbf{p}_i, \ldots, -t), \qquad (2.1.4)$$

$$N(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = N(\mathbf{r}, -\mathbf{p}, -t), \qquad \mathbf{F}^{\text{м}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{F}^{\text{м}}(\mathbf{r}, -t). \quad (2.1.5)$$

При использовании условий временной симметрии уравнений Гамильтона для элементов системы и для динамических распределений надо, конечно, иметь в виду, что *понятие направления времени есть понятие более первичное, чем понятия обратимости и необратимости.* Замена $t \to -t$ в Природе невозможна. Речь может идти лишь о «возвращении домой», т. е. о возвращении частиц через удвоенный промежуток времени $2(t - t_0)$ в исходное положение $\mathbf{r}_{10}, \ldots, \mathbf{r}_{N0}$, но с обратимыми импульсами $-\mathbf{p}_{10}, \ldots, -\mathbf{p}_{N0}$ при условии, что в момент $t - t_0$ проведено изменение знаков импульсов всех частиц.

Вернемся теперь к вопросу о двух видах обратимых процессов.

Примером обратимых процессов второго вида служат квазистатические процессы в термодинамике — процессы столь медленные, что они могут представляться приближенно как последовательности равновесных состояний. Расчет термодинамических функций проводится при этом на основе канонического распределения Гиббса (1.3.5). При преобразовании (3) распределение Гиббса имеет симметрию:

$$f_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_N) = f_N(\mathbf{r}_1, -\mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, -\mathbf{p}_N). \quad (2.1.6)$$

Для газа Больцмана известны диссипативные кинетические уравнения — уравнения Леонтовича и Больцмана, которые описывают в изолированном газе установление равновесного состояния. Для N-частичного распределения $f_N(X, t)$, удовлетворяющего уравнению Леонтовича, равновесное состояние описывается N-частичным распределением Максвелла (1.7.4). При использовании уравнения Больцмана равновесным является распределение Максвелла.

Уравнения Леонтовича и Больцмана — уравнения механики сплошной среды соответственно для распределе-

ний $\tilde{f}_N(X, t)$, $\tilde{f}(x, t)$. Более детальное представление о равновесном состоянии может быть получено при использовании не только первых моментов сглаженных распределений $\tilde{f}_N(X, t)$, $\tilde{f}(x, t)$, но и высших, которые определяют и флуктуации в состоянии равновесия. Высшие моменты в состоянии равновесия также обладают свойствами симметрии (6).

2.2. Уравнения Лиувилля и Власова. Приближение первых моментов и «бесстолкновительное» приближение

2.2.1. Уравнение Лиувилля при разных определениях ансамбля Гиббса. Используем в качестве исходного уравнение Лиувилля (1.1) для динамического распределения $f_N^{(д)}(X, t)$, эквивалентное системе уравнений Гамильтона для частиц системы.

Допустим, что неопределенность статистического описания полностью определяется распределением начальных условий $f_N(X_0)$, а уравнения движения Гамильтона остаются неизменными. Статистическое распределение связано с динамическим распределением равенством (см. (1.4.1))

$$f_N(X, t) = \langle f_N^{(д)} \rangle_{X_0} = \int \delta(X - X(X_0, t - t_0)) f_N(X_0)\, dX_0. \tag{2.2.1}$$

Уравнение для статистического распределения в этом случае совпадает по форме с динамическим уравнением (1.1). Таким образом,

$$\partial f_N / \partial t + [H(X) f_N(X, t)] = 0. \tag{2.2.2}$$

Это уравнение для статистического распределения, как и исходное уравнение (1.1), обратимо, так как уравнения характеристик совпадают с уравнениями Гамильтона. Обратимый — недиссипативный характер уравнения (2) проявляется в том, что энтропия Гиббса (1.2.7) при эволюции по уравнению Лиувилля (2) остается неизменной, т. е.

$$dS_Г / dt = 0. \tag{2.2.3}$$

Таким образом, неопределенность, задаваемая распределением начальных условий, переносится по траекториям

частиц без изменения. Это и выражается условием неизменности энтропии во времени (3).

Вернемся к вопросу выбора ансамбля Гиббса при переходе от обратимого описания к необратимому. Он уже обсуждался в 1.4. Был сделан вывод, что ансамбль Гиббса, в котором неопределенность микросостояний систем ансамбля полностью определяется распределением начальных условий $f_N(X_0)$, не является наиболее подходящим при построении статистической теории неравновесных процессов. Для этого, как было отмечено, имеются, по меньшей мере, две причины. Во-первых, это динамическая неустойчивость движения атомов, приводящая к перемешиванию, и, во-вторых, наличие всегда неконтролируемых внешних условий, что проявляется в возникновении в уравнениях движения хотя бы и очень малых неконтролируемых случайных внешних сил.

Как мы видели, в этой ситуации более реальным является задание неопределенности микросостояний систем путем сглаживания по физически бесконечно малому объему $V_ф$ (или временному интервалу $\tau_ф$). В результате исходное динамическое уравнение (1.1) сводится к диссипативному уравнению для сглаженной функции распределения $\tilde{f}_N(X, t)$. Примером служили уравнения (1.7.1), (1.7.2) для сглаженного распределения частиц газа Больцмана.

Уравнение для сглаженного распределения газа Больцмана является линейным по распределению $\tilde{f}_N$, поэтому усреднение его по ансамблю Гиббса не приводит к изменению уравнения. В результате приходим к уравнению Леонтовича для статистического распределения $f_N(X, t)$:

$$\partial f_N/\partial t + [H(X) f_N(X, t)] = I_N(X, t). \qquad (2.2.4)$$

Интеграл столкновений совпадает с (1.7.2) при замене $\tilde{f}_N \to f_N$.

Итак, двум разным определениям ансамбля Гиббса отвечают два уравнения (2), (4) для статистических распределений: $f_N = \langle f_N^{(д)} \rangle_{X_0}$, $f_N = \langle \tilde{f}_N \rangle$. Принципиальное отличие этих уравнений состоит в том, что уравнение Лиувилля (2) является обратимым, а уравнение Леонтовича (4) необратимым. Естественно, что с помощью уравнения (4) может быть учтена и неопределенность распределения начальных условий $f_N(X_0)$. В дополнение к этому, однако, при сглаживании по объему $V_ф$ происходит потеря информации о мелкомас-

штабных (с $r_{кор} < l_ф$) корреляциях. Такой выбор ансамбля Гиббса оправдан наличием перемешивания из-за динамической неустойчивости движения атомов в пределах объема $V_ф$.

Можно формально вернуться от уравнения Леонтовича для газа Больцмана (4) к уравнению Лиувилля (2). Для этого в (4) положим

$$I_N(X, t) \equiv 0, \tag{2.2.5}$$

т. е. считаем интеграл столкновений тождественно равным нулю. Такая процедура возвращает нас к ансамблю Гиббса с распределением $f_N(X_0)$. Она, однако, радикально меняет временную симметрию уравнения и может привести к нефизическим результатам даже при очень малых значениях диссипации. С такими примерами мы встретимся ниже.

При малой диссипации более оправданным является так называемое «бесстолкновительное» приближение. Это означает, что при малой диссипации соответствующий диссипативный параметр (например, эффективная частота столкновений) стремится к нулю лишь в самом решении; в этом случае временная симметрия сохраняется.

Принципиальное отличие уравнений Лиувилля (2) и Леонтовича (4) (в применении к одной и той же системе — идеальному газу) проявляется в том, что для уравнения Леонтовича справедлива H-теорема

$$dS_\Gamma/dt = -k \int I_N(X, t) \ln f_N(X, t)\, dX \geqslant 0. \tag{2.2.6}$$

Знак равенства отвечает равновесному состоянию, когда функция f_N есть N-мерное распределение Максвелла (1.7.4).

Мы уже отмечали в **1.7**, что минимальное время релаксации для уравнения Леонтовича очень мало (пропорционально $1/N$) и, следовательно, равно нулю в термодинамическом пределе. Тем самым необратимость в макроскопических системах зарождается на очень малых временах. Это показывает некорректность условия (5), приводящего формально от необратимого уравнения Леонтовича (4) к обратимому уравнению Лиувилля (2).

2.2.2. Недиссипативные и диссипативные цепочки уравнений для последовательности функций распределения. Напомним (см. **1.5**), что впервые вывод кинетического уравнения Больцмана на основе динамических

уравнений был проведен в 1946 г. в работах Н. Н. Боголюбова, М. Борна и Х. Грина, Дж. Кирквуда. Задача была сведена к приближенному решению цепочки зацепляющихся уравнений для последовательности функций распределения f_1, f_2, ... переменных одной, двух и т. д. частиц. Исходным служило уравнение Лиувилля (2) для статистического распределения (1). Следуя Боголюбову, определим через $f_N(X, t)$ функции f_1, f_2, ... следующим образом:

$$f_1 \equiv f = V \int f_N \, dx_2 \ldots dx_N, \quad f_2 = V^2 \int f_N \, dx_3 \ldots dx_N. \quad (2.2.7)$$

Первое уравнение цепочки удобно записать в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \\ = n \int \frac{\partial \Phi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} g_2(x, x', t) \, dx', \quad (2.2.8)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = -n \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \int \Phi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f(x', t) \, dx, \quad \frac{N-1}{V} \to n.$$

Здесь использовано обозначение для двухчастичной корреляционной функции

$$f_2(x, x', t) = f(x, t) f(x', t) + g_2(x, x', t). \quad (2.2.9)$$

Видно, что взаимодействие частиц определяет среднюю силу — силу Власова (см. (1.5.10)), а также правую часть, которую, по аналогии с уравнением Больцмана, назовем «интеграл столкновений».

Уравнение (8) не является, однако, замкнутым, так как интеграл столкновений выражается через неизвестную пока функцию g_2. Уравнение для g_2 содержит трехчастичную корреляционную функцию g_3 и т. д. В результате приходим к цепочке уравнений Боголюбова — Борна — Грина — Кирквуда — Ивона (ББГКИ), которая завершается исходным уравнением Лиувилля (2). Эта цепочка уравнений, как и исходное уравнение, обратимо, поскольку не было сделано никаких дополнительных допущений, меняющих исходный ансамбль Гиббса, для которого введено распределение (1).

Цепочка уравнений ББГКИ может быть получена и иным путем. В качестве исходного вместо уравнения Лиувилля (2) можно принять динамические уравнения (1.2) для фазовой плотности $N(x, t)$ и силы $F^{\text{м}}(r, t)$.

Первый момент случайной функции $N(x, t)$ определяет одночастичную функцию распределения $\langle N(x, t)\rangle = nf$. Средняя сила $F = \langle F^{м}\rangle$.

Путем усреднения уравнений (1.2) получаем уравнения

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}(\mathbf{r}, t)\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right)\langle N(x, t)\rangle = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\langle \delta\mathbf{F}\delta N\rangle \equiv \equiv nI(x, t), \quad (2.2.10)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\int \Phi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)\langle N(x', t)\rangle\, dx'.$$

Уравнение для $\langle N(x, t)\rangle$ отличается от первого уравнения цепочки ББГКИ лишь формой записи «интеграла столкновений» (*Климонтович*, IV).

Уравнение (10) также незамкнуто, так как в правую часть входит второй момент флуктуаций δN, δF. Уравнение для второго момента содержит третий. В результате приходим к системе уравнений для моментов, которая эквивалентна цепочке уравнений ББГКИ.

Переход от динамических уравнений (2), (1.2) к цепочкам уравнений для функций распределения или моментов не приводит еще к каким-либо упрощениям. По трудности задача по-прежнему эквивалентна задаче решения системы уравнений Гамильтона для частиц системы.

Рассмотрим теперь другую последовательность уравнений для функций распределения, которая следует не из обратимого уравнения Лиувилля (2), а из кинетических уравнений (1.7.1), (1.7.2) для сглаженной функции распределения. Тем самым мы переходим от ансамбля Гиббса с распределением (1) к другому ансамблю Гиббса, в котором неопределенность микросостояний систем ансамбля задается сглаживанием по объему $V_ф$ и, следовательно, «рабочим» является распределение $\tilde{f}_N$, а не $\langle f_N^{(д)}\rangle_{x_0}$.

Напомним, что для сглаженного распределения $\tilde{f}_N$ можно использовать приближенное равенство (1.4.12), т. е. считать функцию распределения $\tilde{f}_N$ мультипликативной:

$$\tilde{f}_N(X, t) = \prod_{1<i<N}\left(V^{-1}\tilde{f}(x_i, t)\right), \quad V^{-1}\int \tilde{f}\, dx = 1. \quad (2.2.11)$$

С учетом неразличимости частиц подстановка этого распределения в уравнения (1.7.1), (1.7.2) приводит к кинетическим уравнениям (1.5.18)—(1.5.20) для сглаженных функций $\tilde{f}$, $\tilde{F}$. Для удобства сравнения перепишем

уравнения (1.5.18), (1.5.19) еще раз:

$$\frac{\partial \tilde{N}}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial \tilde{N}}{\partial \mathbf{r}} + \tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t)\frac{\partial \tilde{N}}{\partial \mathbf{p}} = nI_{\text{Б}}\{\tilde{f}\tilde{f}\}, \qquad \tilde{N} = n\tilde{f},$$
$$\tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\int \Phi(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)\,\tilde{N}(x', t)\,dx'. \tag{2.2.12}$$

Здесь $I_{\text{Б}}$ — интеграл столкновений Больцмана, определяемый сглаженным распределением $\tilde{f}$.

В отличие от динамического уравнения (1.2) для функции $N(x, t)$ уравнение (12) является приближенным и диссипативным. Диссипация обусловлена потерей информации о мелкомасштабных корреляциях с $r_{\text{кор}} < l_{\text{ф}}$. Поскольку из-за динамической неустойчивости движения атомов такая потеря информации практически неизбежна, то естественно для функции $N(x, t)$ в качестве исходного вместо (1.2) использовать уравнение (12). Тогда при усреднении по новому ансамблю получается новая цепочка теперь уже диссипативных уравнений.

При статистическом описании обе функции $N(x, t)$, $\tilde{N}(x, t)$ являются, таким образом, случайными функциями. Однако усреднение при переходе к уравнениям для моментов функций $N(x, t)$, $\tilde{N}(x, t)$ производится, как мы уже отмечали, по разным ансамблям Гиббса.

2.2.3. Уравнения Власова и Больцмана — Власова — приближения первых моментов. Итак, на основе уравнений (1.2), (12) можно построить две цепочки уравнений для моментов случайных функций $N(x, t)$, $\tilde{N}(x, t)$. Первая из них обратима и эквивалентна цепочке ББГКИ, а вторая необратима (см. 1.6). Рассмотрим для обоих случаев соответствующие приближения первых моментов.

Начнем с цепочки уравнений ББГКИ. Первое уравнение цепочки может быть записано в двух эквивалентных формах (8), (10). Согласно (10) приближение первых моментов отвечает тождественному приближению корреляциями и, следовательно, условию

$$I(x, t) \equiv 0. \tag{2.2.13}$$

В результате приходим к замкнутым уравнениям для функций $\langle N\rangle = nf$, F — уравнениям Власова:

$$\frac{\partial \langle N(x, t)\rangle}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial \langle N\rangle}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}(\mathbf{r}, t)\frac{\partial \langle N\rangle}{\partial \mathbf{p}} = 0, \tag{2.2.14}$$
$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\int \Phi(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)\,\langle N(x', t)\rangle\,dx',$$
$$\langle N(x, t)\rangle = nf(x, t).$$

Уравнения такого типа были впервые предложены А. А. Власовым в 1938 г. на примере полностью ионизованной электрон-ионной плазмы. Это — уравнения статистических распределений электронов и ионов $\langle N_{e,i}(x, t)\rangle = n_{e,i} f_{e,i}$ и средних напряженностей электромагнитного поля $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$.

Согласно уравнению (8) условие (13) эквивалентно пренебрежению корреляцией: $g_2 \equiv 0$. Тем самым полагаются тождественно равными нулю и высшие корреляции. Используя это условие, можно получить уравнение Власова непосредственно из уравнения Лиувилля (2). Действительно, принимая для уравнения (2) условие мультипликативности (ср. с условиями (1.7.3), (11))

$$f_N(X, t) = \langle f_N^{(\text{д})}\rangle_{X_0} = \prod_{1 \leqslant i \leqslant N} (V^{-1} f(x_i, t)), \qquad (2.2.15)$$

что отвечает пренебрежению корреляциями, с учетом неразличимости частиц придем снова к уравнениям Власова (14). Условие (15) означает, что корреляции равны нулю и в начальный момент времени t_0.

Уравнение Власова, как и уравнение Лиувилля, является обратимым. Это проявляется, в частности, в том, что энтропия Больцмана $S_{\text{Б}}$ (1.2.4), определяемая через функцию $f(x, t)$ в уравнении Власова, остается в процессе эволюции неизменной:

$$dS_{\text{Б}}/dt = 0. \qquad (2.2.16)$$

Таким образом, в статистической теории используются два типа обратимых уравнений: уравнение Лиувилля и уравнение Власова. В обоих случаях используется ансамбль Гиббса, в котором неопределенность микросостояний систем ансамбля задается начальным распределением $f_N(X_0)$. При этом оба уравнения обратимы, так как не нарушаются уравнения Гамильтона частиц системы. Для перехода от уравнения Лиувилля к уравнению Власова необходимо дополнительное условие (15) — условие пренебрежения корреляциями.

Вернемся к уравнению (12) для сглаженного распределения $\tilde{N} = n\tilde{f}$. Представим случайные функции $\tilde{N}$, $\tilde{\mathbf{F}}$ в виде

$$\tilde{N} = \langle \tilde{N}\rangle + \delta\tilde{N}, \qquad \tilde{\mathbf{F}} = \langle \tilde{\mathbf{F}}\rangle + \delta\tilde{\mathbf{F}}. \qquad (2.2.17)$$

Таким образом введем крупномасштабные флуктуации. Подставим выражения (17) в уравнения (12) и *пренебрежем крупномасштабными флуктуациями* $\delta\tilde{N}$, $\delta\tilde{\mathbf{F}}$. Тем

самым мы снова приходим к уравнениям для первых моментов, но теперь уже для другого ансамбля Гиббса. Это — уравнения Больцмана — Власова (1.5.9), (1.5.10):

$$\frac{\partial \langle N(x, t)\rangle}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial \langle N\rangle}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}(\mathbf{r}, t)\frac{\partial \langle N\rangle}{\partial \mathbf{p}} = nI_{\text{В}}\{ff\}, \quad (2.2.18)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\int \Phi(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)\langle N(x', t)\rangle\, dx',$$

$$\langle N(x, t)\rangle = nf(x, t).$$

Эти уравнения в отличие от уравнений Власова необратимы. Необратимость связана с потерей информации о мелкомасштабных корреляциях $r_{\text{кор}} < l_{\text{ф}}$, определяющих интеграл столкновений Больцмана.

Можно формально от уравнений Больцмана — Власова перейти снова к уравнениям Власова. Для этого надо в уравнении (17) положить

$$I_{\text{В}}(x, t) \equiv 0, \quad (2.2.19)$$

т. е. считать интеграл столкновений тождественно равным нулю. Такая процедура меняет временную симметрию уравнения — оно становится обратимым. Более последовательным при малой диссипации является переход к «бесстолкновительному» приближению. Это означает, что диссипативный параметр — эффективная частота столкновений стремится в решении к нулю.

Такой переход к «бесстолкновительному» приближению оправдан при наличии резонансов. Он позволяет учесть диссипацию в резонансных точках. Так, например, в полностью ионизованной плазме переход к «бесстолкновительному» приближению позволяет учесть затухание Ландау, а в системе атомов, взаимодействующих с электромагнитным полем,— доплеровское уширение (*Климонтович*, IV, гл. 15).

Итак, мы рассмотрели два класса уравнений в приближении первых моментов: 1. Уравнения Лиувилля и Власова; 2. Уравнения Леонтовича и Больцмана — Власова. Мы видели, что они отвечают разным ансамблям Гиббса.

Уравнения для первых моментов — примеры уравнений механики сплошной среды в кинетической теории. Это означает, что в соответствующих ансамблях Гиббса флуктуации распределений не принимаются во внимание. Учет флуктуаций, как уже отмечалось выше, является во многих случаях принципиальным. Об этом речь пойдет в гл. 3.

2.3. Обратимые уравнения в квантовой статистической теории

2.3.1. Чистый ансамбль. Микроскопическая матрица плотности. Динамическое описание в квантовой теории проводится двумя способами: на основе уравнения Шредингера для волновой функции $\Psi_N(\mathbf{R}, t)$ системы N частиц, $\mathbf{R}=(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$ — $3N$-мерный вектор координат частиц, и на основе уравнения для микроскопической матрицы плотности

$$\rho_N(\mathbf{R}', \mathbf{R}'', t) = \Psi_N^*(\mathbf{R}'', t)\Psi_N(\mathbf{R}', t), \qquad (2.3.1)$$

которая удовлетворяет уравнению

$$\partial\rho_N/\partial t + \{\widehat{H}, \rho_N\} = 0. \qquad (2.3.2)$$

Здесь $\widehat{H}$ — оператор Гамильтона, $\{\ \}$ — квантовые скобки Пуассона. Это уравнение соответствует классическому уравнению (1.1) и также является обратимым. Матрица же плотности (1) соответствует динамическому (микроскопическому) распределению $f_N^{(\text{д})}(X, t)$ (1.2.5).

Статистический ансамбль в квантовой теории при полном описании называется *чистым ансамблем*, а состояние системы — *чистым квантовомеханическим состоянием*.

2.3.2. Смешанный ансамбль. Уравнение для матрицы плотности. Введем теперь усредненную по ансамблю Гиббса матрицу плотности

$$f_N(\mathbf{R}', \mathbf{R}'', t) = \langle\rho_N(\mathbf{R}', \mathbf{R}'', t)\rangle, \qquad (2.3.3)$$

соответствующую классической функции распределения (1.2.12).

Если неполнота квантовомеханического описания связана лишь с неопределенностью начальных условий, то уравнение для матрицы (3) совпадает по виду с (2), т. е.

$$\partial f_N/\partial t + \{\widehat{H}, f_N\} = 0. \qquad (2.3.4)$$

Это — уравнение фон Неймана. Уравнение (4), как и (2), является обратимым. При этом энтропия в процессе эволюции квантовой системы по уравнению (4) остается неизменной.

2.3.3. Различные представления матрицы плотности. Наряду с *координатным представлением* матрицы плотности (3) широко используются и другие представления. Выбор определяется ясностью физической интерпретации результатов и удобством проведения расчетов.

Наиболее близким по форме к классическому является смешанное представление, когда вместо матрицы (3) вводится *функция Вигнера*. Она определяется равенством

$$f_N(\mathbf{R}, \mathbf{P}, t) = (2\pi)^{-3N} \int V^{-N} f_N(\mathbf{R} + \hbar\gamma/2, \mathbf{R} - \hbar\gamma/2, t) \times$$
$$\times \exp(-i\gamma\mathbf{P})(2\pi\hbar)^{3N} d\gamma. \qquad (2.3.5)$$

Условия нормировки функций $f_N(\mathbf{R}, \mathbf{P}, t)$, $f_N(\mathbf{R}', \mathbf{R}'', t)$ имеют вид

$$(2\pi\hbar)^{-3N} \int f_N \, d\mathbf{R} \, d\mathbf{P} = \int V^{-N} f_N(\mathbf{R}, \mathbf{R}, t) \, d\mathbf{R} = 1. \qquad (2.3.6)$$

В отличие от классической функции распределения (1.2.6) «квантовая функция распределения» не является в общем случае положительной и поэтому не может быть принята за функцию распределения. Положительными во всех случаях являются лишь более простые распределения $f_N(\mathbf{R}, t)$, $f_N(\mathbf{P}, t)$.

Рассмотрим, наконец, еще одно представление, которое в основном и используется в дальнейшем изложении.

Пусть $\Psi_n(\mathbf{R})$ (n — $3N$-мерный вектор) — ортонормированный и полный набор собственных функций некоторого оператора $\widehat{L}$. Тогда соответствующая матрица плотности определяется выражением

$$f_{nm}(t) = \int V^{-2N} f_N(\mathbf{R}', \mathbf{R}'', t) \, \Psi_n^*(\mathbf{R}') \, \Psi_m(\mathbf{R}'') \, d\mathbf{R}' \, d\mathbf{R}''. \qquad (2.3.7)$$

Представление называется *импульсным*, если $\Psi_p(\mathbf{R})$ ($n \to p$) — собственная функция оператора импульса, и *энергетическим*, если $\Psi_n(\mathbf{R})$ — собственная функция оператора энергии.

В равновесном состоянии матрица плотности f_{nm} в энергетическом представлении является диагональной:

$$f_{nm} = \delta_{nm} f_{nn} = \delta_{nm} f_n. \qquad (2.3.8)$$

При этом функция f_n — квантовое каноническое распределение Гиббса

$$f_n = Z^{-1} \exp(-E_n/kT), \quad Z = \sum_n \exp(-E_n/kT). \qquad (2.3.9)$$

Вернемся к уравнению (4). При условии мультипликативности функции f_N, т. е. при условии полного пренебрежения корреляциями, из (4) для одночастичных матриц плотности следуют обратимые уравнения, которые являются квантовым аналогом уравнения Власова (2.14). Такое приближение возможно в любом представ-

лении матрицы плотности. Во всех случаях оно отвечает полному пренебрежению корреляциями.

Рассмотрим теперь примеры кинетических уравнений с учетом «столкновений». Эти уравнения являются необратимыми и в замкнутых системах описывают процессы установления равновесного состояния.

2.4. Два типа диссипативных кинетических уравнений для N-частичных распределений

Выше неоднократно уже отмечалось (см., например, 1.4), что непосредственное использование уравнений для динамических распределений $f_N^{(д)}$, $N(x, t)$ при описании процессов в макроскопических системах оказывается практически невозможным. Причины этого были разделены на два вида: внешние и внутренние. Внешние причины приводят к необходимости использования статистического — неполного описания. К числу внутренних причин относится динамическая неустойчивость движения атомов, приводящая к перемещиванию в малых объемах, принимаемых за физически бесконечно малые. Сглаживание по объему $V_ф$ ведет к потере информации и, следовательно, к необратимости.

Факторы, определяющие неполноту описания при использовании уравнений Леонтовича и Больцмана, являются *внутренними*. Именно благодаря этому уравнение Леонтовича для N-частичного распределения является линейным по функции распределения. Нелинейность возникает лишь при переходе к уравнению Больцмана — кинетическому уравнению для одночастичного распределения. Поясним это важное для нас сейчас обстоятельство подробней.

Микроскопическое состояние газа Больцмана характеризуется набором всех координат и импульсов частиц X. Уравнение Леонтовича — уравнение для функции распределения $f_N(X, t)$, т. е. для распределения полного набора переменных. Неполнота описания — результат пренебрежения информацией о деталях движения в пределах физически бесконечно малого объема $V_ф$. Таким образом, происходит выделение более плавных движений в системе, характеризуемой набором X и соответствующим распределением $f_N(X, t)$.

Ситуация может быть существенно иной, когда необходимость перехода к статистическому описанию определяется внешними факторами. К числу внешних причин

возникновения необратимости движения рассматриваемой системы, характеризуемой набором переменных X, относятся неконтролируемые внешние воздействия. В качестве примера рассмотрим систему атомов, которые взаимодействуют через флуктуационное электромагнитное поле. Воздействие этого поля и является для системы атомов внешним неконтролируемым воздействием.

Пусть $H(X)$ — функция Гамильтона системы из N атомов с произвольным взаимодействием, например, по закону Ленарда — Джонса. Таким образом, это взаимодействие не предполагается слабым и, следовательно, степень неидеальности может быть сколь угодно большой. При квантовом описании функция Гамильтона заменяется соответствующим оператором $\widehat{H}$. Пусть n — полный набор квантовых чисел системы атомов, E_n — собственные значения оператора Гамильтона $\widehat{H}$.

Пусть также между атомами есть еще дополнительное слабое взаимодействие через флуктуирующее — случайное электромагнитное поле. Это и есть случайный, внешний по отношению к атомам фактор.

Из-за неконтролируемости состояния электромагнитного поля полная функция Гамильтона атомов с учетом их взаимодействия через поле является случайной пульсирующей. Обозначим ее через $\widetilde{H}$, $\widetilde{\widehat{H}}$ — соответствующий оператор Гамильтона в квантовой теории. Функцию распределения атомов обозначим через $\widetilde{f}_N(X, t)$. При квантовом описании $\widetilde{\rho}_N(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t)$ — соответствующая матрица плотности. Уравнения для них по виду совпадают с уравнениями (1.1), (3.2).

Проведем усреднение этих уравнений по ансамблю Гиббса. Предполагаем, что неопределенность статистического описания определяется лишь флуктуационным характером электромагнитного поля. Неопределенность за счет внутренних факторов можно учесть на следующем этапе. Обозначим через δf_N, δH флуктуации распределения и функции Гамильтона. В результате придем к следующему уравнению для статистического распределения и к соответствующему уравнению для матрицы плотности:

$$\partial f_N(X, t)/\partial t + [H(X) f_N] = \langle -[\delta H \delta f_N] \rangle \equiv I_N(X, t), \quad (2.4.1)$$

$$\partial f_N(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t)/\partial t + \{\widehat{H}, f_N\} = \langle -\{\delta H \delta f_N\} \rangle \equiv I_N(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t). \quad (2.4.2)$$

Здесь введены обозначения для «интегралов столкновений». Для возврата к обратимым уравнениям Лиувилля

(2.2) и фон Неймана (3.4) надо считать интегралы столкновений тождественно равными нулю:

$$I_N(X, t) \equiv 0, \quad I_N(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t) \equiv 0. \qquad (2.4.3)$$

Из-за наличия действия неконтролируемого поля такой шаг не является, однако, оправданным.

Преобразуем уравнение (2) для матрицы плотности к более удобному для приложений виду. Для этого используем для матрицы плотности энергетическое представление (3.7). При этом E_n — собственные значения осредненного оператора Гамильтона $\widehat{H}$. Предположим, что отклонения от равновесного состояния не являются значительными. Тогда матрица плотности f_{nm} в энергетическом представлении близка к диагональной, т. е. $f_{nm} = \delta_{nm} f_n$. Для функции f_n можно получить замкнутое кинетическое уравнение (*Климонтович*, 1978, III, IV)

$$\partial f_n / \partial t = I_n(t), \quad \sum_n f_n = 1. \qquad (2.4.4)$$

Напомним, что n — набор квантовых чисел для системы из N атомов. Интеграл столкновений определяется выражением

$$I_n = \frac{4}{9V\hbar} \sum_{mn_1m_1} \int d\omega\, d\mathbf{k}\, |D_{nm}(-\mathbf{k})|^2\, \delta(\omega - \omega_{nm}) \times$$

$$\times\, \delta(E_n + E_{m_1} - E_{n_1} - E_m) \frac{2\omega^4}{|\omega^2 \varepsilon(\omega, \mathbf{k}) - c^2\mathbf{k}^2|^2} (f_m f_{n_1} - f_n f_{m_1}). \qquad (2.4.5)$$

Здесь $\varepsilon(\omega, k)$ — диэлектрическая проницаемость системы атомов, D_{nm} — матричный элемент дипольного момента всей системы.

Рассмотрим некоторые свойства этого кинетического уравнения. Отметим прежде всего, что оно является нелинейным по функции распределения f_n состояний системы атомов. Уравнение (4) описывает эволюцию к равновесному состоянию с квантовым распределением Гиббса (3.9). Интеграл столкновений (5) обладает свойством

$$-k \sum_n \ln f_n(t)\, I_n(t) \geqslant 0. \qquad (2.4.6)$$

Оно обеспечивает закон возрастания энтропии (Н-теорема) при эволюции к равновесному состоянию:

$$dS/dt \geqslant 0, \qquad S(t) = -k \sum_n f_n \ln f_n. \qquad (2.4.7)$$

От кинетического уравнения (4) для N-частичного квантового распределения можно перейти к цепочке зацепляющихся уравнений для последовательности квантовых распределений одного, двух и т. д. атомов. При пренебрежении крупномасштабными флуктуациями получается замкнутое уравнение для одночастичного квантового распределения. Его можно и удобно для приложений записать в форме, впервые предложенной Эйнштейном. При этом выделяются индуцированный и спонтанный вклады в интеграл столкновений (см. 3.6).

2.5. Мера неполноты статистического описания

В рамках классической теории наиболее полное описание состояний макроскопической системы дается, в принципе, динамическим распределением $f_N^{(\text{д})} = \delta(X - X(t))$. Для его конкретизации необходимо решение уравнений Гамильтона $X(X_0, t - t_0)$. Такой путь не является реальным, поэтому мы перешли к статистическому описанию.

Для количественной оценки степени неопределенности при статистическом описании использовалась энтропия Больцмана — Гиббса — Шеннона.

При оценке относительной степени неопределенности (хаотичности) можно использовать две «точки отсчета». Во-первых, за точку отсчета можно принять динамическое описание на основе уравнений Гамильтона, когда неопределенность, в принципе, сводится к нулю. Во-вторых, за точку отсчета можно принять состояние теплового равновесия, отвечающее максимальной степени неопределенности и, как следствие, максимальному значению энтропии.

Напомним, что при расчетах в 1.9 за точку отсчета было принято состояние локального равновесия. Было проведено сравнение трех выражений для энтропии: для состояния локального равновесия; для неравновесного состояния, но без учета крупномасштабных флуктуаций; для неравновесного состояния при учете дополнительной информации о крупномасштабных флуктуациях. Были сделаны, таким образом, два «шага» от состояния локального равновесия в сторону полного динамического описания. «Контролером» правильности нашего движения к полному описанию была энтропия, которая на каждом из этих шагов уменьшалась.

Будем теперь двигаться с обратной стороны, т. е. от полного динамического описания в сторону неполного описания, используя при этом другой критерий неполноты — не столь универсальный, как энтропия, но, в отличие от интегрального энтропийного критерия, являющийся локальным в фазовом пространстве. Этот критерий будет использован в гл. 3 при формулировке флуктуационно-диссипационных соотношений.

Итак, «стартуем» с динамического описания

$$f_N^{(\text{д})}(X, t) = \delta(X - X(t)), \qquad X(t) = X(X_0, t - t_0). \quad (2.5.1)$$

Переходим к некоторому ансамблю Гиббса и вводим соответствующее статистическое распределение $f_N(X, t)$. Степень неполноты статистического описания характеризуем коррелятором отклонений (флуктуаций) статистического распределения от динамического

$$\delta f_N = f_N^{(\text{д})} - f_N, \quad (2.5.2)$$

т. е. величиной (*Климонтович*, 1982, IV)

$$\langle \delta f_N \delta f_N \rangle_{X, X', t} = (2\pi\hbar)^{3N} \delta(X - X') f_N(X, t) - \\ - f_N(X, t) f_N(X', t). \quad (2.5.3)$$

В частности, при $X = X'$ с учетом равенства

$$(2\pi\hbar)^{3N} \delta(X - X')|_{X=X'} = 1$$

из (3) следует выражение для среднего квадрата флуктуаций:

$$\langle (\delta f_N(X, t))^2 \rangle = f_N(X, t) - f_N^2(X, t) \geqslant 0. \quad (2.5.4)$$

Знак равенства относится к полному описанию, когда $f_N = f_N^{(\text{д})}$.

Квантовое выражение, аналогичное (3), имеет вид

$$\langle \delta f_N(\mathbf{R}_1', \mathbf{R}_1'', t)\, \delta f_N(\mathbf{R}_2', \mathbf{R}_2'', t) \rangle = \\ = V^N \delta(\mathbf{R}_1' - \mathbf{R}_2'') f_N(\mathbf{R}_2', \mathbf{R}_1'', t) - \\ - f_N(\mathbf{R}_1', \mathbf{R}_1'', t) f_N(\mathbf{R}_2', \mathbf{R}_2'', t). \quad (2.5.5)$$

Чтобы сделать переход от (5) к классическому выражению (3), надо от координатного представления перейти к представлению Вигнера (3.5), а затем произвести предельный переход к классическому описанию.

Из (5) следует выражение для дисперсии флуктуаций плотности:

$$\langle(\delta f_N(\mathbf{R}, \mathbf{R}, t))^2\rangle = f_N(\mathbf{R}, \mathbf{R}, t) - f_N^2(\mathbf{R}, \mathbf{R}, t) \geqslant 0. \quad (2.5.6)$$

Знак равенства относится к чистому ансамблю, т. е. отвечает полному квантовомеханическому описанию.

Для дальнейшего наиболее удобным будет представление матрицы плотности в виде (3.7). Соответствующий коррелятор флуктуаций есть

$$\langle\delta f_{nm}(t)\,\delta f_{n_1m_1}(t)\rangle = \delta_{nm_1} f_{n_1m}(t) - f_{nm}(t)\, f_{n_1m_1}(t). \quad (2.5.7)$$

Отсюда, в частности, следует, что

$$\langle(\delta f_{nn})^2\rangle = f_{nn} - f_{nn}^2 \geqslant 0. \quad (2.5.8)$$

Знак равенства и здесь относится к чистому ансамблю.

Приведенные выражения для одновременных корреляторов флуктуаций функции распределения и матрицы плотности характеризуют *меру неполноты статистического описания* в классической и квантовой теории. Эти корреляторы выражаются соответственно через функцию распределения $f_N(X, t)$ и матрицу плотности $f_N(\mathbf{R}', \mathbf{R}'', t)$ (или $f_{nm}(t)$). В таком виде приведенные формулы являются общими.

Конкретизация начинается при выборе того или иного ансамбля Гиббса, приводящего к соответствующим кинетическим уравнениям. Приведенные здесь формулы используются в гл. 3 в качестве «начальных условий» при решении уравнений для двухвременных корреляторов. Это позволит найти спектральные плотности флуктуаций и установить самые общие флуктуационно-диссипационные соотношения. Будет проведен также анализ флуктуационно-диссипационных соотношений для классических и квантовых систем на всех уровнях описания.

Итак, при формулировке необратимых кинетических уравнений исходными могут служить обратимые динамические уравнения. Однако заложенные в них потенциальные возможности полного описания не могут быть реализованы при описании процессов в макроскопических системах. Динамические обратимые уравнения в статистической теории используются лишь для «старта» при переходе к необратимым уравнениям. Принципиальным для перехода к необратимым уравнениям является выбор ансамбля Гиббса — выбор, согласованный с целью и возможностями экспериментального исследования.

Такой подход на сегодняшний день, во всяком случае для описания физических систем, является достаточно общим. Пока не видно принципиального ограничения такого развития теории.

2.6. Иерархия уравнений механики сплошной среды

2.6.1. Кинетические уравнения. Поясним смысл термина «флуктуационно-диссипационные соотношения» на примере рассмотренных выше кинетических уравнений.

На примере газа Больцмана рассмотрены два типа диссипативных кинетических уравнений: 1. Уравнение для N-частичного распределения — уравнение Леонтовича; 2. Уравнение для одночастичного распределения — уравнение Больцмана. Отметим еще раз характерные черты этих уравнений.

1. Диссипативные кинетические уравнения служат примером уравнений механики сплошной среды соответственно в 6-мерном и $6N$-мерном фазовых пространствах.

2. Диссипативные кинетические уравнения — замкнутые уравнения для первых моментов соответствующих сглаженных распределений $\tilde{f}_N$, $\tilde{f}$. Крупномасштабные — кинетические флуктуации, определяющие высшие моменты этих распределений, не учитываются.

3. Диссипативные кинетические уравнения — уравнения для макроскопических характеристик. Имеется иерархия уравнений для макроскопических характеристик. Простейшими в этой иерархии являются динамические уравнения — нелинейные уравнения в обыкновенных производных.

Все перечисленные характерные черты отражают тот факт, что флуктуации сглаженных (пульсирующих) распределений $\tilde{f}_N$, $\tilde{f}$, т. е. крупномасштабные — кинетические флуктуации, во внимание не принимаются. Такое приближение оправдано для широкого круга явлений. Однако, как мы уже отмечали, существует широкий класс явлений, которые невозможно описать без учета крупномасштабных флуктуаций.

Существенно при этом, что источники флуктуаций, как это показано в 1.6 на примере газа Больцмана, сами определяются интегралами столкновений, т. е. диссипативными характеристиками. Видно, что диссипация влечет за собой флуктуации т. е. имеются флуктуационно-диссипационные соотношения. Они существуют на всех уровнях статистической теории макроскопических систем.

Источники флуктуаций были представлены в виде двух вкладов (см. (1.6.9)): молекулярные и турбулентные. Можно указать два предвестника появления турбулентного движения: критический рост (по обобщенному закону Кюри) крупномасштабных флуктуаций, определяемых молекулярными источниками; неустойчивость макроскопических характеристик при использовании уравнений сплошной среды — уравнений для первых моментов. Мы вернемся к этим вопросам в гл. 5, 6.

Выше основное внимание уделялось кинетическим уравнениям, стоящим на верху иерархии уравнений механики сплошной среды. Сейчас будем спускаться по этой иерархии уравнений вниз.

2.6.2. Уравнения гидродинамики. Запишем уравнения гидродинамики в виде законов сохранения плотности вещества, плотности импульса и плотности внутренней энергии, т. е. для функций

$$\rho(\mathbf{r}, t), \quad \rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t), \quad \rho\mathbf{u}^2/2 + \rho\varepsilon(\mathbf{r}, t). \qquad (2.6.1)$$

Здесь ε — внутренняя энергия, отнесенная к одной частице единичной массы, $\mathbf{u}$ — скорость гидродинамического течения. Законы сохранения для этих функций могут быть записаны в следующем виде (*Ландау*, *Лифшиц*, 1985; *Климонтович*, IV, гл. 13):

уравнения непрерывности

$$\partial\rho/\partial t + \operatorname{div}\rho\mathbf{u} = 0, \qquad (2.6.2)$$

уравнения баланса компонент вектора плотности импульса

$$\frac{\partial\rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial\rho u_i u_j}{\partial r_j} = -\frac{\partial p}{\partial r_i} - \frac{\partial\pi_{ij}}{\partial r_j} + \rho F_i; \qquad (2.6.3)$$

уравнения баланса плотности энергии

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\rho\mathbf{u}^2}{2} + \varepsilon\right) + \frac{\partial}{\partial r_i}\left[u_i\left(\frac{\rho\mathbf{u}^2}{2} + \rho\varepsilon + \rho\right) + \pi_{ij}u_j + S_i\right] = \rho\mathbf{F}\mathbf{u}. \qquad (2.6.4)$$

Замыкание уравнений (2)—(4) основано на двух гипотезах.

1. Существование *локального термодинамического равновесия*. Это позволяет использовать второй закон термодинамики для локальных характеристик, справедливый для квазистатических процессов:

$$Tds = d\varepsilon + pd\rho^{-1}, \quad S(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t)s(\mathbf{r}, t), \qquad (2.6.5)$$

и определяемые экспериментально уравнения состояния

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}(\rho, T), \quad \varepsilon = \varepsilon(\rho, T). \tag{2.6.6}$$

2. Наличие двух линейных диссипативных соотношений: выражения Ньютона для силы внутреннего трения и соотношения Фика для вектора теплового потока S. Соотношение Ньютона используется в обобщенной форме для тензора вязких напряжений π_{ij}. Эти соотношения имеют вид

$$\pi_{ij} = -\eta\left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial u_k}{\partial r_k}\right) - \xi\delta_{ij}\frac{\partial u_k}{\partial r_k},$$
$$S_i = -\lambda\frac{\partial T}{\partial r_i}. \tag{2.6.7}$$

Первое связывает тензор вязких напряжений с производными скорости, а второе — компоненту вектора теплового потока с производной температуры. Вязкости η, ξ и теплопроводность λ в рамках феноменологической теории берутся из экспериментальных данных. В результате приходим к замкнутой системе уравнений для гидродинамических функций ρ, $\mathbf{u}$, T (или ρ, $\mathbf{u}$, s).

Для газа уравнения гидродинамики — *газовой динамики* могут быть обоснованы с помощью уравнений Больцмана (1.5.9), (1.5.18) для функций распределения f, $\tilde{f}$. При этом получаются два типа уравнений: для первых моментов — средних гидродинамических характеристик; они связаны с функцией распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ соотношениями

$$\rho = mn\int f d\mathbf{p}, \quad \mathbf{u} = \frac{n}{\rho}\int \mathbf{p} f d\mathbf{p}, \quad \frac{3}{2}kT = \frac{mn}{\rho}\int\frac{m(\mathbf{v}-\mathbf{u})^2}{2} f d\mathbf{p}; \tag{2.6.8}$$

для сглаженных (пульсирующих) гидродинамических характеристик, они выражаются через сглаженное распределение $\tilde{f}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$:

$$\tilde{\rho} = mn\int \tilde{f} d\mathbf{p}, \quad \tilde{\mathbf{u}} = \frac{n}{\tilde{\rho}}\int \mathbf{p}\tilde{f} d\mathbf{p}, \quad \frac{3}{2}k\tilde{T} = \frac{mn}{\tilde{\rho}}\int\frac{m(\mathbf{v}-\tilde{\mathbf{u}})^2}{2}\tilde{f} d\mathbf{p}. \tag{2.6.9}$$

Переход от уравнений Больцмана к соответствующим газодинамическим уравнениям возможен при дополнительных условиях

$$K = l/L \ll 1; \quad 1/\mathrm{Re} = \nu/uL \sim K/M \ll 1. \tag{2.6.10}$$

Здесь K — число Кнудсена (l — длина свободного пробега атомов газа, L — характерный масштаб при гидродинамическом описании; Re — число Рейнольдса, M — число Маха (u — характерная скорость гидродинамического течения, ν — кинематическая вязкость).

Как и в кинетической теории, из уравнений газовой динамики для пульсирующих функций (9) следует цепочка уравнений для моментов. Тем самым учитываются крупномасштабные — гидродинамические флуктуации, роль которых особенно существенна при турбулентном движении. Гидродинамические флуктуации могут быть существенны и в области ламинарных движений. Они определяют, например, броуновское движение маленьких макроскопических частиц в жидкости, молекулярное рассеяние света (*Климонтович*, IV, гл. 11; *Фабелинский*, 1965).

В жидкостях нет четких границ, разделяющих области кинетического и гидродинамического описания, так как параметр плотности $\varepsilon = nr_0^3$ порядка единицы. Однако остается в силе представление о двух уровнях описания: более общем — на основе уравнений гидродинамики для сглаженных (пульсирующих) функций (9) и на основе уравнений для первых моментов гидродинамических функций (8).

Естественно, что в гидродинамике выбор объема сглаживания — физически бесконечно малого объема $V_ф$ и интервала $\tau_ф$ — производится иначе, чем в газе. Основное различие в том, что связь масштабов $l_ф$, $\tau_ф$ осуществляется теперь не по формуле $l_ф = V_т\tau_ф$ (1.5.16), а по соотношению $l_ф^2 = D\tau_ф$, характерному для диффузионного процесса. Здесь D — обобщенный коэффициент диффузии. При вязком течении эту роль играет кинематическая вязкость ν. Таким образом, $l_ф^2 = \nu\tau_ф$. Приведем окончательные выражения для $l_ф^{(г)}$, $\tau_ф^{(г)}$, $N_ф^{(г)}$ (Климонтович, IV, гл. 7, § 6). Они имеют вид

$$l_ф^{(г)} \sim \frac{L}{N^{2/5}} \ll L, \quad \tau_ф^{(г)} \sim \frac{\tau_D}{N^{1/5}} \ll \tau_D, \quad N \gg N_ф \sim N^{2/5} \gg 1. \tag{2.6.11}$$

Индекс «г» указывает, что это гидродинамические характеристики.

2.6.3. Н-теорема в гидродинамике. С помощью уравнений гидродинамики и второго закона термодинамики (5) можно найти уравнение баланса для плотности энтропии $S = \rho s$ (*Ландау*, *Лифшиц*, 1985; *Климонтович* IV, гл. 13). Приведем здесь более общее уравнение, которое следует из уравнений гидродинамики для пульсирующих функций (9). Введем в нем сразу обозначение для локального производства энтропии:

$$\frac{\partial \tilde{\rho}\tilde{s}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\left(\tilde{\rho}\tilde{s}\tilde{\mathbf{u}} - \frac{\lambda}{\tilde{T}}\operatorname{grad}\tilde{T}\right) = \tilde{\sigma}(\mathbf{r}, t) \geqslant 0, \quad (2.6.12)$$

$$\tilde{\sigma} = \frac{\eta}{2\tilde{T}}\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial r_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial r_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial r_k}\right)^2 + \frac{\xi}{\tilde{T}}\left(\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial r_k}\right)^2 + \lambda\left(\frac{\operatorname{grad}\tilde{T}}{\tilde{T}}\right)^2. \quad (2.6.13)$$

Ниже, в гл. 6, посвященной теории турбулентности, нам понадобится более простое выражение производства энтропии несжимаемой жидкости:

$$\tilde{\sigma} = \frac{\eta}{2T}\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial r_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial r_i}\right)^2 \equiv \frac{\eta}{2T}\tilde{u}_{ij}^2, \qquad \eta = \rho\nu. \quad (2.6.14)$$

В приближении первых моментов, т. е. при пренебрежении гидродинамическими флуктуациями $\delta\tilde{\rho}$, $\delta\tilde{\mathbf{u}}$, $\delta\tilde{T}$, выражения (12), (13) совпадают с формулами, используемыми в гидродинамике. Это приближение недостаточно, однако, для описания турбулентности.

Путем усреднения по ансамблю Гиббса из (14) получим более общее выражение для среднего производства энтропии в гидродинамике:

$$\langle\tilde{\sigma}\rangle = \frac{\rho\nu}{2T}\left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i}\right)^2 + \left\langle\left(\frac{\partial \delta\tilde{u}_i}{\partial r_j} + \frac{\partial \delta\tilde{u}_j}{\partial r_i}\right)^2\right\rangle\right]. \quad (2.6.15)$$

Второй вклад, определяемый гидродинамическими пульсациями скорости, при развитой турбулентности оказывается доминирующим. Через него может быть выражена турбулентная вязкость (гл. 6).

2.6.4. Диффузия. Н-теорема. Без учета крупномасштабных — диффузионных флуктуаций диффундирующие частицы образуют сплошную среду с распределением

$$nf(\mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, t), \qquad V^{-1}\int f(\mathbf{r}, t)\,d\mathbf{r} = 1, \quad (2.6.16)$$

которое удовлетворяет уравнению диффузии

$$\partial f/\partial t = D\Delta_r f, \qquad D = kT/m\gamma. \tag{2.6.17}$$

Из него следует соответствующее уравнение баланса энтропии

$$\begin{gathered} dS/dt = \int \sigma(\mathbf{r}, t)\, d\mathbf{r} \geqslant 0, \\ S(t) = -kn \int f(\mathbf{r}, t) \ln f(\mathbf{r}, t)\, d\mathbf{r}, \\ \sigma(\mathbf{r}, t) = knDf^{-1} (\operatorname{grad} f)^2 \geqslant 0. \end{gathered} \tag{2.6.18}$$

Знак равенства отвечает равновесному — пространственно однородному распределению диффундирующих частиц.

Для описания крупномасштабных флуктуаций при диффузионном движении используем уравнение для сглаженного распределения

$$\partial \tilde{f}/\partial t = D\Delta_r \tilde{f}, \qquad V^{-1} \int \tilde{f}\, dr = 1. \tag{2.6.19}$$

Уравнение баланса энтропии следует из (18) при замене $S \to \tilde{S}$, $\sigma \to \tilde{\sigma}$. Усредненное производство энтропии, как и в гидродинамике, представляется в виде суммы двух вкладов:

$$\langle \tilde{\sigma} \rangle = knDf^{-1} (\operatorname{grad} f)^2 + \sigma_{\text{турб}}. \tag{2.6.20}$$

Через $\sigma_{\text{турб}}$ выражается коэффициент турбулентной диффузии.

2.6.5. Диффузия частиц в ограниченной системе. Фликкер-шум. Время диффузии $\tau_D = L^2/D$ определяет время установления равновесного состояния — однородного распределения частиц ($f = 1$) по объему системы V. Среднее распределение $f(\mathbf{r}, t)$ не дает, однако, достаточно полного представления о процессе. Для учета крупномасштабных флуктуаций — флуктуаций распределения $\delta\tilde{f} = \tilde{f} - f$ — надо обратиться к уравнению (19). В равновесном состоянии, когда $f = 1$, оно совпадает с уравнением для флуктуаций $\delta\tilde{f}$.

Для флуктуационного процесса можно выделить две области:

$$\tau_{\text{кор}} \ll \tau_D, \quad \tau_{\text{кор}} \gg \tau_D. \tag{2.6.21}$$

Для первой области ограниченность системы мало влияет на характер флуктуаций. Спектр в этом случае практически совпадает с выражением для спектра безграничной системы.

Ситуация существенно меняется в другом предельном случае, когда времена корреляции много больше времени диффузии. Реальный объем V в этом случае пренебрежимо мал по сравнению *с эффективным объемом диффузии* $V_{эф}$. При исследовании соответственно временных корреляций и временного спектра объем $V_{эф}$ определяется характерными длинами

$$(D\tau)^{1/2}, \qquad (D/\omega)^{1/2}. \tag{2.6.22}$$

Мы увидим, что в этой области временные корреляции очень слабо (логарифмически) зависят от времени — возникают «*остаточные корреляции*», а спектр пропорционален $1/\omega$. Таким образом, в области $\tau_{кор} \gg \tau_D$ имеет место фликкер-шум (шум $\ll 1/f \gg$) (*Климонтович*, IV, 1983).

Мы еще не раз будем возвращаться к вопросу о фликкер-шуме. Так в 3.12 будут рассмотрены спектральные и временные характеристики и уравнение Ланжевена, а в Дополнении связь двух замечательных явлений: естественного фликкер-шума и сверхпроводимости.

В работе (*Климонтович*, *Боон*, 1987) рассматриваемая теория использована для объяснения существования фликкер-шума в музыке. Отметим также обзоры (*Коган*, 1985; *Вейссман*, 1988), в которых обсуждаются различные возможные механизмы фликкер-шума.

Глава 3

ФЛУКТУАЦИОННО-ДИССИПАЦИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ

Настоящая глава занимает по объему второе место в книге. Правомерен вопрос: насколько оправдано столь большое внимание к флуктуационно-диссипационным соотношениям в книге, посвященной статистической теории открытых систем?

Дело в том, что эти соотношения играют принципиальную роль в статистической теории любых макроскопических систем. Действительно, в предыдущих главах было показано, что при описании процессов в макроскопических системах переход к необратимым уравнениям является неизбежным. При этом для описания необратимых процессов имеется целая иерархия диссипативных динамических уравнений — уравнений «механики» сплошной среды. К числу наиболее общих относятся кинетические уравнения для N-частичных функций распределения, а к наиболее «простым» — уравнения реакционно-диффузионного типа. Последние на временах, превышающих времена диффузии, сводятся к системе обыкновенных нелинейных диссипативных уравнений — к канонической системе уравнений *динамической теории*.

Флуктуационно-диссипационные соотношения (ФДС) показывают, что в диссипативных системах флуктуации неизбежны. Это означает, что динамическое описание диссипативных процессов на любом уровне теории является неполным. Разумеется, степень этой неполноты во многих случаях может быть пренебрежимо малой. Существуют, однако, многочисленные явления, для описания которых даже малые флуктуации играют принципиальную роль: броуновское движение (гл. 4), неравновесные фазовые переходы (гл. 5), зарождение турбулентных движений (гл. 6). Именно это и оправдывает столь большое внимание, которое уделяется ФДС.

3.1. Примеры флуктуационно-диссипационных соотношений

3.1.1. Простейшие примеры ФДС. Формулы Эйнштейна и Найквиста. Первое ФДС фактически установлено Эйнштейном в теории броуновского движения. Это рассмотренная в дальнейшем формула (4.1.2), которая связывает коэффициент диффузии D с коэффициентом трения γ. Каково, однако, основание считать эту формулу примером ФДС?

Известны два способа описания броуновского движения: на основе уравнения Фоккера — Планка и на основе соответствующих уравнений Ланжевена — стохастических уравнений для случайных функций $x(t)$, $v(t)$. Соотношение этих двух подходов подробно обсуждается в гл. 4. Здесь же приведем лишь простейшие примеры уравнений Ланжевена.

При броуновском движении свободной частицы в вязкой среде на нее действуют две силы: регулярная сила — сила трения — γv и случайная (нерегулярная) сила — сила Ланжевена, которую обозначим через $F(t) \equiv my(t)$. В приближении, когда справедливо уравнение Фоккера — Планка (1.11.1), статистические свойства силы Ланжевена определяются двумя первыми моментами (приближение Гаусса):

$$\langle y \rangle = 0, \quad \langle y_i(t) y_j(t') \rangle = 2D\delta_{ij}\delta(t-t'), \quad D = \gamma kT/m. \tag{3.1.1}$$

Отсюда следует, что *спектральная плотность силы Ланжевена* в расчете на одну степень свободы определяется выражением

$$(1/3)\,(yy)_\omega = 2D = 2\gamma\, kT/m \tag{3.1.2}$$

и, следовательно, пропорциональна коэффициенту диффузии D. Это равенство и служит простейшим примером ФДС, связывая спектральную плотность флуктуационной силы — силы Ланжевена с диссипативным коэффициентом γ.

Выражение (1) для второго момента отвечает нулевому приближению по параметру

$$\tau_{\text{кор}}/\tau_{\text{рел}} = \tau_{\text{кор}}\gamma, \tag{3.1.3}$$

который определяется отношением времени корреляции случайной силы к времени релаксации. В рассматриваемом примере $\tau_{\text{рел}} = \gamma^{-1}$. В этом приближении время кор-

реляции предполагается равным нулю. Соответственно этому спектральная плотность силы Ланжевена (2) не зависит от частоты ω и, следовательно, представляет собой *белый шум*.

Итак, для описания броуновского движения в вязкой среде можно использовать уравнения Ланжевена:

$$dr/dt = v, \quad dv/dt + \gamma v = F(t)/m \equiv y(t). \qquad (3.1.4)$$

Запишем соответствующее уравнение Ланжевена для описания тепловых колебаний в электрическом контуре с индуктивностью L, емкостью C и электрическим сопротивлением R:

$$dq/dt = J, \quad LdJ/dt + RJ + C^{-1}q = \mathscr{E}(t). \qquad (3.1.5)$$

Спектральная плотность случайной ЭДС (аналог силы Ланжевена) определяется выражением (*Найквист*, 1928)

$$(\mathscr{E}^2)_\omega = 2RkT, \qquad (3.1.6)$$

которое называется формулой Найквиста. Как и в (2), спектральная плотность источника Ланжевена не зависит от частоты; снова получаем *белый шум*. Чтобы убедиться в эквивалентности формул (2) и (6), можно использовать электромеханическую аналогию:

$$q \leftrightarrow x, \quad J \leftrightarrow v, \quad L \leftrightarrow m, \quad R/L \leftrightarrow \gamma, \ \mathscr{E}/L \leftrightarrow f/m = y. \qquad (3.1.7)$$

В дальнейшем вместо (5) будет удобней использовать эквивалентные уравнения Ланжевена для одномерного осциллятора с собственной частотой:

$$\begin{gathered} dx/dt = v, \quad dv/dt + \gamma v + \omega_0^2 x = y, \\ \langle yy\rangle_\tau = 2\gamma(kT/m)\,\delta(\tau), \quad (y^2)_\omega = 2\gamma(kT/m). \end{gathered} \qquad (3.1.8)$$

С помощью этих уравнений находим спектральную плотность скорости $(v^2)_\omega$ и средний квадрат скорости $\langle v^2\rangle$:

$$\begin{gathered} (v^2)_\omega = \frac{2\gamma}{(\omega-\omega_0^2/\omega)^2+\gamma^2}\,\frac{kT}{m}, \\ \frac{m\langle v^2\rangle}{2} = \frac{m}{2}\int\limits_{-\infty}^{\infty}(v^2)_\omega\frac{d\omega}{2\pi} = \frac{kT}{2}. \end{gathered} \qquad (3.1.9)$$

Таким образом, средняя кинетическая энергия броуновской частицы определяется температурой.

Аналогичные результаты следуют и из уравнения Ланжевена (4) для «свободной» броуновской частицы:

$$(\mathbf{v}^2)_\omega = \frac{2\gamma}{\omega^2+\gamma^2}\cdot 3\frac{kT}{m}, \qquad \frac{m\langle \mathbf{v}^2\rangle}{2} = \frac{3}{2}kT. \qquad (3.1.10)$$

Коэффициент «три» возник вследствие трехмерности движения.

Для дальнейшего полезна другая форма записи выражения (9).

Обозначим через $\chi(\omega)$ *восприимчивость* (или через $\sigma(\omega)$ — *проводимость*), определяющую отклик $v(\omega)$ на случайное воздействие $y(\omega)$. Тогда для скорости классического одномерного гармонического осциллятора получим

$$v(\omega) = \chi(\omega)\, y(\omega), \qquad \chi(\omega) = \left[\gamma - i\left(\omega - \omega_0^2/\omega\right)\right]^{-1}, \qquad (3.1.11)$$

а выражение для спектральной плотности $(v^2)_\omega$ можно записать в виде

$$(v^2)_\omega = 2\,\mathrm{Re}\,\chi(\omega)\,kT/m. \qquad (3.1.12)$$

Если вместо восприимчивости (проводимости) ввести соответствующую *поляризуемость*

$$\alpha(\omega) = (i/\omega)\,\chi(\omega) = \left[\left(\omega_0^2 - \omega^2\right) - i\omega\gamma\right]^{-1},$$
$$x(\omega) = \alpha(\omega)\, y(\omega), \qquad (3.1.13)$$

то для спектральной плотности $(x^2)_\omega$ получим выражение

$$(x^2)_\omega = (2/\omega)\,\mathrm{Im}\,\alpha(\omega)\,kT/m. \qquad (3.1.14)$$

Для электрического контура восприимчивости соответствует комплексный импеданс $Z(\omega)$:

$$\chi(\omega) = 1/Z(\omega), \quad Z(\omega) = R - i\left[L\omega - (C\omega)^{-1}\right]. \qquad (3.1.15)$$

Выражения для спектральной плотности $(J)^2_\omega$ и среднего квадрата тока $\langle J^2\rangle$ определяются формулами, аналогичными (9):

$$(J^2)_\omega = \frac{2R}{|Z(\omega)|^2}kT, \qquad \frac{L\langle J^2\rangle}{2} = \frac{L}{2}\int\frac{2RkT}{|Z(\omega)|^2}\frac{d\omega}{2\pi} = \frac{kT}{2}. \qquad (3.1.16)$$

Рассмотрим теперь возможные квантовые обобщения формул (6), (16).

3.1.2. Два квантовых обобщения классической формулы Найквиста. В литературе предложены два квантовых обобщения классической формулы Найквиста (6) для

спектральной плотности случайной ЭДС. Первое (*Найквист*, 1928) сводится (с дополнительным учетом вклада нулевых колебаний) к замене в (6) средней тепловой энергии осциллятора kT на среднюю энергию квантового осциллятора, частота которого — текущая частота спектра!? Таким образом производится замена

$$kT \to (1/2)\hbar\omega \operatorname{cth}(\hbar\omega/2kT) \equiv kT_\omega. \qquad (3.1.17)$$

В соответствии с этим для спектральной плотности случайной ЭДС получаем выражение

$$(\mathscr{E}^2)_\omega = 2RkT_\omega \qquad (3.1.18)$$

— квантовую формулу Найквиста. Формулы (16) принимают теперь вид

$$(J^2)_\omega = \frac{2R}{|Z(\omega)|^2} kT_\omega, \qquad \frac{L\langle J^2\rangle}{2} = \frac{L}{2}\int \frac{2RkT_\omega}{|Z(\omega)|^2}\frac{d\omega}{2\pi}. \qquad (3.1.19)$$

Имеется, однако, и вторая возможность обобщения классической формулы Найквиста (6) на квантовый случай (*Климонтович*, III, IV; *Хакен*, 1988). Она вместо (17) предполагает замену kT на среднюю энергию квантового осциллятора на собственной (не на текущей!) частоте ω_0:

$$kT \to (1/2)\hbar\omega_0 \operatorname{cth}(\hbar\omega_0/2kT) \equiv kT_{\omega_0}. \qquad (3.1.20)$$

При этом *квантовое обобщение формулы Найквиста* (6) имеет вид

$$(\mathscr{E}^2)_\omega = 2RkT_{\omega_0}. \qquad (3.1.21)$$

Сравним два квантовых обобщения формулы Найквиста.

1. Спектральная плотность при постоянном R не является белым шумом, а представляет распределение по ω, которое *не зависит от свойств вещества* и характеризуется двумя временами:

$$\tau^{(0)} \sim 1/\omega, \qquad \tau^{(T)} \sim \hbar/kT. \qquad (3.1.22)$$

Первое характеризует вклад нулевых колебаний, а второе — теплового движения.

В отличие от (18) спектр (21) при постоянном R представляет белый шум. При этом распределение по спектру не является универсальным: интенсивность шума зависит от параметра ω_0 и, следовательно, от модели вещества.

2. Переход к классическому приближению в (18) не является определенным, так как условие $kT \gg \hbar\omega$ для нулевых колебаний не может быть удовлетворено при высоких частотах, при которых вклад в интеграл (19) является доминирующим. Такая трудность не возникает при использовании формулы (21).

3. Интеграл по частотам в (19), определяющий средний квадрат тока в состоянии теплового равновесия, зависит не только от температуры и недиссипативных параметров L, C, но и от диссипативного фактора — электрического сопротивления R.

Этот результат противоречит статистической теории, согласно которой в состоянии равновесия одновременные корреляторы, например $\langle J^2 \rangle$, $\langle q^2 \rangle$, являются функциями состояния и поэтому не могут зависеть от диссипативных характеристик. В противном случае эти функции зависели бы от пути перехода между состояниями, что привело бы к противоречию со вторым законом термодинамики.

Такого рода несоответствие следствий квантовой формулы Найквиста в статистической теории равновесного состояния обсуждалось уже давно (*Горелик*, 1951) на примере RC-цепочки. Это, однако, не поколебало веру в правильность квантовой формулы Найквиста (18) (*Гинзбург*, 1952, 1975, 1981, 1988).

Вопрос о правильном написании квантовой формулы Найквиста является принципиальным, поскольку представляет простейший пример общей проблемы определения интенсивности источников Ланжевена и соответствующих коэффициентов диффузии в кинетических уравнениях при описании квантовых систем. Мы увидим в 3.8 на примере лэмбовского сдвига уровней атома водорода, что подобные проблемы возникают и в квантовой электродинамике.

Вследствие этого в работе (*Климонтович*, 1987) проведен анализ ФДС на всех уровнях статистического описания. Показано, в частности, что приведенные в литературе способы обоснования квантовой формулы Найквиста (18) не являются убедительными. Противоположная точка зрения вновь была подтверждена в работах (*Гинзбург*, *Питаевский*, 1987; *Татарский*, 1987).

Для иллюстрации нефизических следствий квантовой формулы Найквиста (18) приведем вклады в интеграл (19) для среднего квадрата тока, определяемый нулевыми колебаниями. Поскольку соответствующий интеграл по частотам расходится, то введем обрезание области интег-

рирование на частоте ω_{max}. Результаты слабо зависят от выбора ω_{max}, так как ω_{max} входит под знак логарифма при большом значении аргумента. Приведем результаты для двух случаев: LR-цепочки ($C \to \infty$) и электрического контура с собственной частотой ω_0:

$$L\langle J^2\rangle = (2\pi)^{-1}\hbar\frac{R}{L}\ln\frac{\omega_{max}}{R/L},$$

$$L\langle J^2\rangle = (2\pi)^{-1}\hbar\frac{R}{L}\ln\frac{\omega_{max}}{\omega_0}.$$

Мы видим, что средняя кинетическая энергия в состоянии равновесия *линейно* зависит от диссипативного параметра R. От R зависит в (19) и другая часть интеграла, определяемая тепловыми флуктуациями.

Ниже проведен анализ ФДС на всех уровнях статистического описания. Наиболее общими являются ФДС для флуктуаций многочастичных матриц плотности (см. 3.2). При формулировке этих соотношений выявляется связь вопроса о ФДС с проблемой обоснования получения необратимых уравнений статистической теории из обратимых уравнений классической и квантовой механики.

Проблема ФДС имеет принципиальное значение и для статистической теории открытых систем (в частности, теории самоорганизации). Это обусловлено тем, что все уравнения теории самоорганизации являются *диссипативными*. Из ФДС следует, что *в силу* неизбежной *связи диссипации* и *флуктуаций* флуктуационное движение является неотъемлемой частью движения в открытых системах. По этой причине *динамическое описание открытых систем*, в частности процессов самоорганизации, *является принципиально неполным*. Динамическое описание может быть достаточным лишь вдали от точек бифуркации — критических точек при неравновесных фазовых переходах. Однако адекватное описание процессов вблизи критических точек и, тем более, в самих критических точках на основе динамических уравнений, т. е. без учета флуктуаций, оказывается невозможным.

Именно по этой причине мы так много внимания уделяем ФДС на всех уровнях статистического описания.

Покажем, что оказывается полезным деление ФДС на два класса:

а) ФДС для флуктуаций с бесконечными временами корреляции — «бесстолкновительное» приближение. Ему

отвечают бесконечно узкие резонансы в спектрах флуктуаций; б) ФДС для флуктуаций с конечными временами корреляции — «столкновительное» приближение. Соответствующие спектральные плотности имеют конечные ширины спектров, определяемые «интегралами столкновений» в соответствующих кинетических уравнениях. Среди ФДС первого класса наиболее известной является формула Каллена — Вельтона. Она связывает квантовые спектральные плотности внутренних термодинамических параметров с диссипативными частями соответствующих восприимчивостей.

Ко второму классу относится, в частности, квантовая формула Найквиста (21). «Интеграл столкновений» определяет в ней ширину спектра, например спектральную плотность флуктуаций тока:

$$(J^2)_\omega = \frac{2R}{|Z(\omega)|^2} kT_{\omega_0},$$
$$L\langle J^2\rangle = L\int (J^2)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = kT_{\omega_0}, \qquad (3.1.23)$$

т. е. сопротивление R.

В ходе изложения подробно анализируются вопросы, по которым в литературе нет единого мнения, а именно: условия применимости формулы Каллена — Вельтона, квантовое обобщение классической формулы Найквиста.

Известны два «обоснования» квантовой формулы Найквиста (18). Первое из них «базируется» на втором законе термодинамики и некоторых дополнительных соображениях. Оно проанализировано в работе (*Климонтович*, 1987). Второе «опирается» на формулу Каллена — Вельтона. Оно разобрано ниже.

Перейдем к рассмотрению наиболее общих ФДС, а после разберем ряд конкретных примеров.

3.2. ФДС для N-частичных функций распределения

3.2.1. Двухвременной коррелятор флуктуаций матрицы плотности. В 2.4 обсуждались примеры классических и квантовых кинетических уравнений для детерминированных N-частичных распределений. Эти уравнения отвечают приближению «сплошной среды» для ансамбля невзаимодействующих систем — ансамбля Гиббса.

Теперь наша задача состоит в том, чтобы выйти за рамки приближения сплошной среды и учесть структуру ансамбля Гиббса. Эта структура аналогична структуре иде-

ального газа, в котором роль атома играет макроскопическая система с функцией Гамильтона $H(X)$.

Отражением этой «атомарной» структуры ансамбля Гиббса и являются выражения (2.5.3)—(2.5.8) для одновременных корреляторов N-частичных классических и квантовых распределений.

Эти корреляции обращаются в нуль в двух случаях. 1. В случае полного описания, когда среднее по ансамблю совпадает с соответствующим микроскопическим распределением и, следовательно, флуктуации δf_N равны нулю. 2. В случае приближения сплошной среды, когда флуктуации δf_N полагаются равными нулю просто в силу принятого приближения. Пренебрежение флуктуациями δf_N (условие равенства нулю корреляторов (2.5.3)—(2.5.8)) означает лишь, что «атомарная» структура ансамбля Гиббса во внимание не принимается.

Таким образом, наша ближайшая цель — расчет флуктуаций δf_N, $\delta\rho_{nm}$.

При отличных от нуля одновременных корреляторах (2.5.3)—(2.5.8) отличны от нуля и двухвременные корреляторы, а следовательно, и спектральные плотности флуктуаций. Они, как мы увидим, связаны с соответствующими диссипативными характеристиками. Эти связи и представляют собой искомые ФДС.

Расчеты проведем на примере кинетического уравнения для матрицы плотности в энергетическом представлении (см. 2.3). В равновесном состоянии матрица плотности имеет структуру (2.3.8); f_n — квантовое каноническое распределение Гиббса (2.3.9).

Для учета флуктуаций используем кинетическое уравнение для сглаженной матрицы плотности $\bar{f}_{nm}$. При малых отклонениях от равновесного состояния представим соответствующий интеграл столкновений в виде

$$I_{nm} = -\gamma_{nm}(\bar{f}_{nm} - \delta_{nm}f_n) = -\gamma_{nm}\delta f_{nm}, \qquad (3.2.1)$$

где γ_{nm} — матрица диссипативных коэффициентов. Тогда уравнение для функций δf_{nm} имеет следующий вид:

$$(\partial/\partial t + i\omega_{nm} + \gamma_{nm})\,\delta f_{nm}(t) = 0. \qquad (3.2.2)$$

Умножим его на $\delta f^*_{nm}(t')$ и усредним. В результате получим уравнение для двухвременного коррелятора флуктуаций:

$$(\partial/\partial t + i\omega_{nm} + \gamma_{nm})\langle\delta f_{nm}(t)\,\delta f^*_{n_1m_1}(t')\rangle = 0. \qquad (3.2.3)$$

К нему надо добавить «начальное условие» — значение коррелятора при $t = t'$. Оно определяется выражением (2.5.7), которое для равновесного состояния, когда $f_{nm} = \delta_{nm} f_n$, принимает вид

$$\langle \delta f_{nm}(t)\, \delta f^*_{n_1 m_1}(t) \rangle = \delta_{nn_1}\delta_{mm_1} \frac{f_m + f_n}{2} - \delta_{nm}\delta_{n_1 m_1} f_n f_{n_1}. \tag{3.2.4}$$

3.2.2. Спектральная плотность флуктуаций. ФДС. «Бесстолкновительное» приближение. Решение уравнения (3) с начальным условием (4) приводит к следующему выражению для спектральной плотности флуктуаций δf_{nm}:

$$(\delta f_{nm} \delta f_{n_1 m_1})_\omega = \\ = \frac{2\gamma_{nm}}{(\omega - \omega_{nm})^2 + \gamma_{nm}^2} \left(\delta_{nn_1}\delta_{mm_1} \frac{f_n + f_m}{2} - \delta_{nm}\delta_{n_1 m_1} f_n f_{n_1} \right). \tag{3.2.5}$$

Одновременной коррелятор связан со спектральной плотностью равенством

$$\langle \delta f_{nm}(t)\, \delta f^*_{n_1 m_1}(t) \rangle = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} (\delta f_{nm} \delta f_{n_1 m_1})_\omega \, d\omega. \tag{3.2.6}$$

При подстановке в правую часть выражения (5) и после интегрирования по ω приходим, естественно, к (4).

Для интеграла столкновений мы использовали самую простую модель (1), когда диссипация характеризуется набором постоянных коэффициентов трения γ_{nm}. В более общем случае величины γ_{nm} заменяются операторами столкновений. В равновесном случае интегрирование по ω в (6) должно всегда приводить к выражению (4).

Отметим специально, что правая часть равенства (4) определяется квантовым каноническим распределением Гиббса и, следовательно, не содержит диссипативных характеристик. Вследствие этого и одновременной коррелятор флуктуаций δf_{nm} является *недиссипативной характеристикой.*

Мы подчеркиваем это в связи с проведенным выше обсуждением двух квантовых обобщений (1.18), (1.21) классической формулы Найквиста (1.6). Напомним, что выражение (1.18) следует из (1.6) путем замены (1.17). При этом нарушается только что обсуждавшееся условие. Действительно, интеграл по частотам от спектральной

плотности флуктуаций электрического тока (см. (1.19))

$$(J^2)_\omega = 2R|Z(\omega)|^{-2}kT_\omega, \qquad (3.2.7)$$

определяющий одновременной коррелятор $\langle J^2(t)\rangle$, зависит от сопротивления, т. е. от диссипативной характеристики. Это противоречит указанному условию.

Мы вернемся к обсуждению этого вопроса в 3.6.

Обратимся снова к формуле (5) и рассмотрим «бесстолкновительное» приближение, которому отвечает предельный переход $\gamma_{nm} \to 0$. В результате получим следующее выражение для спектральной плотности флуктуаций:

$$(\delta f_{nm}\delta f_{n_1m_1})_\omega = \pi\delta(\omega - \omega_{nm})\,\delta_{nn_1}\delta_{mm_1}(f_m + f_n), \quad \omega \neq 0. \qquad (3.2.8)$$

Здесь не выписывается вклад от второго члена из круглых скобок в (5), так как он отличен от нуля лишь при $\omega = 0$.

Выражение (8) можно переписать в виде ФДС, если ввести поляризуемость

$$\alpha_{nmn_1m_1}(\omega) = \\ = -\delta_{nn_1}\delta_{mm_1}\frac{f_m - f_n}{\hbar(\omega - \omega_{nm} + i\gamma_{nm})}, \qquad \gamma_{nm} \to 0, \qquad (3.2.9)$$

которая характеризует отклик $\delta f_{nm}(t)$ на флуктуацию функции Гамильтона, т. е. на $(\delta H)_{n_1m_1}$:

$$\delta f_{nm} = \alpha_{nmn_1m_1}(\omega)(-\delta H)_{n_1m_1}. \qquad (3.2.10)$$

Для дальнейшего нам нужно выражение для мнимой части поляризуемости:

$$\operatorname{Im}\alpha_{nmn_1m_1}(\omega) = (\pi/\hbar)\,\delta(\omega - \omega_{nm})\,\delta_{nn_1}\delta_{mm_1}(f_m - f_n). \qquad (3.2.11)$$

Умножим и поделим теперь правую часть (8) на $f_m - f_n$ и воспользуемся равенством

$$\delta(\omega - \omega_{nm})\frac{f_m + f_n}{f_m - f_n} = \delta(\omega - \omega_{nm})\operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2kT}. \qquad (3.2.12)$$

Оно справедливо при двух условиях: при условии равновесия, когда функция f_n — квантовое каноническое распределение Гиббса, и при бесконечно узком резонансе, который определяется наличием функции $\delta(\omega - \omega_{nm})$. Используя равенство (12) и формулу (11), выражение (8)

можно переписать в виде ФДС:

$$(\delta f_{nm}\delta f_{n_1m_1})_\omega = \hbar \operatorname{Im} \alpha_{nmn_1m_1}(\omega) \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2kT}. \quad (3.2.13)$$

Оно связывает спектральную плотность флуктуаций δf_{nm} с мнимой частью поляризуемости $\alpha_{nmn_1m_1}(\omega)$.

В классическом приближении $\hbar \to 0$ ФДС (13) принимает вид

$$(\delta f_{nm}\delta f_{n_1m_1})_\omega = (2/\omega) \operatorname{Im} \alpha_{nmn_1m_1}(\omega) kT. \quad (3.2.14)$$

Сравним это выражение с ФДС (1.14), которое было получено на простейшем примере броуновского движения классического одномерного гармонического осциллятора. Видим, что эти формулы имеют одинаковую структуру.

Надо, однако, отметить следующее.

В формуле (1.14) функция $\operatorname{Im} \alpha(\omega)$ имеет вид резонансной кривой с конечной шириной резонанса γ. Формула же (14) получена как следствие квантовой формулы (13). При выводе же квантовой формулы существенным является равенство (12), которое справедливо лишь при условии, что ширина резонансной кривой, которая определяется функцией $\operatorname{Im} \alpha_{nmn_1m_1}$, равна нулю.

В классической теории ФДС (14) в отличие от квантового ФДС (13) остается справедливым при любой ширине резонанса. В этом отношении оно является более общим.

Так, например, классические формулы (1.10), (1.9) для спектральных плотностей $(v^2)_\omega$ соответственно «свободной» и связанной (в осцилляторе) броуновской частицы справедливы при любых значениях коэффициента трения γ. Это относится и к формуле (1.14) для спектральной плотности смещения осциллятора, и к (1.16) для спектральной плотности тока. В классическом случае последняя формула справедлива при произвольном электрическом сопротивлении.

3.3. Термодинамическая форма ФДС. Формула Каллена — Вельтона

3.3.1. Формула Каллена — Вельтона. Формула Каллена — Вельтона является одним из наиболее общих флуктуационно-диссипационных соотношений. Ее можно установить разными способами.

Наибольшее распространение имеет вывод, эквивалентный предложенному в основополагающей работе (*Каллен*,

Вельтон, 1951). Он излагается с небольшими вариациями в различных руководствах (*Ландау* и *Лифшиц*, 1976, 1978; *Левин* и *Рытов*, 1967; *Зубарев*, 1971; *Стратонович*, 1985). Воспроизведем кратко этот вывод с целью выявления ограничений (условий), которые делаются при установлении этого фундаментального соотношения. Будем следовать при этом работам (*Климонтович*, 1978, III, IV, УФН, 1987).

Рассмотрим макроскопическую систему N частиц, которая характеризуется оператором Гамильтона

$$\widehat{H}(X) + \widehat{H}_1, \qquad \widehat{H}_1 = -\sum_i \widehat{A}_i(X) F_i(t). \tag{3.3.1}$$

Здесь $H(X)$ — функция Гамильтона рассматриваемой системы без внешнего воздействия, $F_i(t)$ — внешние силы, зависящие от времени, $A_i(X)$ — соответствующие внутренние параметры.

Обозначим через $\psi_n(\mathbf{R})$ полный набор ортонормированных собственных функций оператора $\widehat{H}(\mathbf{R}, \mathbf{P})$,

$$A_{nm} = \int \psi_n^*(\mathbf{R})\, \widehat{A} \psi_m(\mathbf{R})\, d\mathbf{R} \tag{3.3.2}$$

— матричный элемент оператора $\widehat{A}$, отвечающего внутреннему параметру $\mathbf{A}(X)$.

Используем уравнение для матрицы плотности системы с гамильтонианом (1). Поскольку задача состоит в установлении *флуктуационно-диссипационного соотношения*, то надо использовать необратимое кинетическое уравнение для матрицы плотности f_{nm} с «интегралом столкновений» I_{nm}:

$$(\partial/\partial t + i\omega_{nm}) f_{nm} = \\ = (i/\hbar) \sum_{n_1} \sum_j \left[(A_j)_{nn_1} f_{n_1 m}(t) - f_{nn_1}(t) (A_j)_{n_1 m} \right] F_j(t) + I_{nm}. \tag{3.3.3}$$

Оно может быть получено с помощью уравнения (2.4.3) при использовании представления (2.3.7), в котором $\psi_n(\mathbf{R})$ — собственные функции оператора H. Знак «~» в (3) и ниже опускаем.

При выводе формулы Каллена — Вельтона используем «бесстолкновительное» приближение, поэтому результат не зависит от явного вида интеграла столкновений I_{nm}.

Внешние силы предполагаются малыми, поэтому решение уравнения (3) представляется в виде

$$f_{nm} = \delta_{nm} f_n + f_{nm}^{(1)}, \qquad I_{nm} = -\gamma_{nm} f_{nm}^{(1)}, \tag{3.3.4}$$

где f_n — каноническое распределение Гиббса для системы с функцией Гамильтона $H(X)$, $f_{nm}^{(1)}$ — неравновесная часть функции f_{nm}. В линейном приближении по $f_{nm}^{(1)}$, F_i уравнение (3) принимает вид

$$(\partial/\partial t + \gamma_{nm} + i\omega_{nm}) f_{nm}^{(1)} = (i/\hbar) \sum_j (A_j)_{nm} (f_m - f_n) F_j(t). \tag{3.3.5}$$

Решаем его методом Фурье и находим связь компонент Фурье $f_{nm}^{(1)}$, F_j. Это в свою очередь позволяет установить связь среднего значения $\langle A_i \rangle$ на частоте ω с функцией $F_j(\omega)$, т. е. *отклик системы на внешнее воздействие:*

$$\langle A_i \rangle_\omega = \sum_{nm} (A_i)_{mn} f_{nm}^{(1)}(\omega) \equiv \sum_j{}' \alpha_{ij}(\omega) F_j(\omega). \tag{3.3.6}$$

Здесь введено обозначение для тензора поляризуемости (ср. с (2.9))

$$\alpha_{ij}(\omega) = -\hbar^{-1} \sum_{nm} \frac{(A_i)_{mn} (A_j)_{nm}}{\omega - \omega_{nm} + i\gamma_{nm}} (f_m - f_n). \tag{3.3.7}$$

Отсюда следует выражение для мнимой части тензора поляризуемости:

$$\operatorname{Im} \alpha_{ij}(\omega) = \hbar^{-1} \sum_{nm} (A_i)_{mn} (A_j)_{nm} \frac{\gamma_{nm}}{(\omega - \omega_{nm})^2 + \gamma_{nm}^2} (f_m - f_n). \tag{3.3.8}$$

Перейдем, наконец, к «бесстолкновительному» приближению ($\gamma_{nm} \to 0$). Тогда (8) принимает вид

$$\operatorname{Im} \alpha_{ij}(\omega) = (\pi/\hbar) \sum_{nm} (A_i)_{mn} (A_j)_{nm} \delta(\omega - \omega_{nm}) (f_m - f_n). \tag{3.3.9}$$

Нам осталось решить другую часть задачи — найти спектральную плотность флуктуаций внутренних параметров. Для этого используем равенство

$$\delta A_i = \sum_{nm} (A_i)_{mn} \delta f_{nm}, \tag{3.3.10}$$

которое определяет квантовомеханическое среднее флуктуаций внутреннего параметра через флуктуацию матрицы плотности. Используем соответствующее соотношение спектральных плотностей:

$$(\delta A_i \delta A_j)_\omega = \sum_{nm} \sum_{n_1 m_1} (A_i)_{mn} (A_j)^*_{m_1 n_1} (\delta f_{nm} \delta f_{n_1 m_1})_\omega. \tag{3.3.11}$$

В «бесстолкновительном» приближении спектральная плотность флуктуаций матрицы плотности определяется выражением (2.8). Подстановка (2.8) в (11) приводит к искомому выражению:

$$(\delta A_i \delta A_j)_\omega = \pi \sum_{nm} (A_i)_{mn} (A_j)_{nm} \delta(\omega - \omega_{nm}) (f_m + f_n). \quad (3.3.12)$$

Теперь сопоставим полученные формулы (12), (9) для спектральной плотности флуктуаций внутренних параметров и мнимой части тензора поляризуемости, которая определяет отклик системы на внешнее воздействие. Умножим и поделим в (12) под знаком двойной суммы на $f_m - f_n$ и воспользуемся равенством (2.12), которое справедливо для равновесного состояния и при условии бесконечно узких резонансов на всех переходах («бесстолкновительное» приближение). В результате выявляется связь

$$(\delta A_i \delta A_j)_\omega = \hbar \operatorname{Im} \alpha_{ij}(\omega) \operatorname{cth}(\hbar\omega/2kT), \quad (3.3.13)$$

представляющая искомое ФДС. Это и есть формула Каллена — Вельтона.

Итак, формула Каллена — Вельтона получена при следующих условиях: 1. Внешние силы малы; 2. *Система в отсутствие внешних сил находится в равновесном состоянии*; 3. Диссипация учитывается в «бесстолкновительном» приближении. Это означает, что предельный переход $\gamma_{nm} \to 0$ осуществляется в окончательных результатах. Тем самым выделяются бесконечно узкие резонансы.

3.3.2. Флуктуационная трактовка формулы Каллена — Вельтона. ФДС (13) может быть установлено и без использования внешних воздействий, поскольку оно выражает фактически лишь внутреннее свойство рассматриваемой в «бесстолкновительном» приближении диссипативной системы. Для этого представим флуктуацию внутреннего параметра δA_i в виде суммы двух частей:

$$\delta A_i = \delta A_i^{\text{ист}} + \delta A_i^{\text{инд}}. \quad (3.3.14)$$

Здесь $\delta A_i^{\text{инд}}$ — индуцированный вклад. Он определяется не внешней силой, а флуктуационной силой в самой системе, которую обозначим через δF_i. Величина $\delta A_i^{\text{инд}}$ связана с соответствующей флуктуацией матрицы плотности $\delta f_{nm}^{\text{инд}}$, которая определяется уравнением

$$(\partial/\partial t + \gamma_{nm} + i\omega_{nm}) \delta f_{nm}^{\text{инд}} = (i/\hbar) \sum_j (A_j)_{nm} (f_m - f_n) \delta F_j(t), \quad (3.3.15)$$

совпадающим по форме с уравнением (5). Из (15) вытекает, что

$$\delta f_{nm}^{\text{инд}}(\omega) = -\hbar^{-1} \sum_j \frac{(A_j)_{nm}(f_m - f_n)}{\omega - \omega_{nm} + i\gamma_{nm}} \delta F_j(\omega) \quad (3.3.16)$$

и, следовательно,

$$\delta A_i^{\text{инд}}(\omega) = \sum_{nm} (A_i)_{mn} \delta f_{nm}^{\text{инд}}(\omega) \equiv \sum_j \alpha_{ij}(\omega) \delta F_j(\omega). \quad (3.3.17)$$

Тензор поляризуемости снова определяется выражением (7), а мнимая часть тензора — формулой (8).

Вклад $\delta A_i^{\text{ист}}$ не связан с δF_i, поэтому его и называем «источник». Спектральная плотность флуктуаций $\delta A_i^{\text{ист}}$ определяется прежним выражением (12). Сопоставляя выражения для $\operatorname{Im} \alpha_{ij}$ и для спектральной плотности флуктуаций $\delta A_i^{\text{ист}}$, получаем ФДС:

$$(\delta A_i \delta A_j)_\omega^{\text{ист}} = \hbar \operatorname{Im} \alpha_{ij}(\omega) \operatorname{cth}(\hbar\omega/2kT). \quad (3.3.18)$$

Оно по виду совпадает с формулой Каллена — Вельтона (13). Разница лишь в роли тензора поляризуемости $\alpha_{ij}(\omega)$: Теперь он связывает флуктуационные характеристики. В статистической теории неравновесных процессов практически на разных уровнях описания оказывается более удобной именно такая трактовка ФДС (*Климонтович* I — IV).

3.3.3. Связь формулы Каллена — Вельтона с ФДС для N-частичной функции распределения. Покажем, что формулу Каллена — Вельтона можно рассматривать как одно из следствий ФДС (2.13) для флуктуаций N-частичной матрицы плотности.

Спектральная плотность внутреннего параметра A_i связана со спектральной плотностью флуктуаций матрицы плотности (2.8) равенством (11). Теперь установим связь мнимой части тензора поляризуемости $\alpha_{ij}(\omega)$ (9) с функцией (2.11).

Напомним прежде, чем поляризуемость $\alpha_{nmn_1m_1}(\omega)$ определяет согласно (2.10) отклик δf_{nm} на флуктуационную компоненту функции Гамильтона — $(\delta H)_{nm}$. Из уравнения (15) следует, что при использовании формулы Каллена — Вельтона

$$(\delta H)_{nm} = -\sum_j (A_j)_{nm} \delta F_j(t). \quad (3.3.19)$$

С учетом этого равенства и равенства (10) находим искомое соотношение:

$$\operatorname{Im}\alpha_{ij}(\omega)=\sum_{nm}\sum_{n_1m_1}(A_i)_{mn}(A_j)^*_{m_1n_1}\operatorname{Im}\alpha_{nmn_1m_1}(\omega). \quad (3.3.20)$$

Подстановка в правую часть выражения (2.11) и приводит к формуле (9).

Тем самым мы убедились, что формула Каллена — Вельтона (13) является одним из следствий ФДС (2.13) для спектральной плотности флуктуаций N-частичной матрицы плотности. Ниже рассмотрим другие следствия ФДС (2.13).

3.3.4. Условия справедливости «бесстолкновительного» приближения. Использование «бесстолкновительного» приближения при расчете флуктуаций возможно при выполнении двух условий. Первое отвечает приближению бесконечно узкого резонанса, так как производится предельный переход $\gamma_{nm}\to 0$. Но при этом предельном переходе время релаксации, определяемое интегралом столкновений I_{nm}, полагается бесконечно большим. Это и выражается словами «бесстолкновительное» приближение. Тем самым при расчете крупномасштабные — кинетические флуктуации с $\tau_{\text{рел}}\sim\gamma^{-1}$ во внимание не принимаются. Играют роль лишь мелкомасштабные флуктуации, которые определяют сам интеграл столкновений I_{nm} в кинетическом уравнении для функции f_{nm}.

Введем вспомогательный параметр Δ, разделяющий области крупно- и мелкомасштабных флуктуаций. Для описания последних также можно использовать уравнения (2.3), (2.4), если произвести в них замену

$$\gamma\to\Delta\gg\gamma. \quad (3.3.21)$$

Соответственно этому в формулах (2.5), (2.9) для спектральной плотности флуктуаций δf_{nm} и поляризуемости $\alpha_{nmn_1m_1}$ резонансная кривая для перехода ω_{nm} будет определяться выражением

$$\pi^{-1}\Delta\left[(\omega-\omega_{nm})^2+\Delta^2\right]^{-1}. \quad (3.3.22)$$

Таким образом, при учете лишь мелкомасштабных флуктуаций переход к условию бесконечно узкого резонанса (замена (22) на функцию $\delta(\omega-\omega_{nm})$) в силу условия (21) является более жестким, чем предполагалось ранее (условие $\gamma\to 0$).

Возникает, естественно, вопрос: на фоне какого достаточно гладкого распределения оправдан переход к беско-

нечно узкому резонансу? Таким «гладким» фоном служит согласно (2.12) функция $\operatorname{cth}(\hbar\omega_{nm}/2kT)$; ее ширина характеризуется двумя параметрами: ω_{nm}, $kT/\hbar$.

Следовательно, использование «бесстолкновительного» приближения оправдано при выполнении двух условий (двух неравенств):

$$\max(kT/\hbar,\ \omega_{nm}) \gg \Delta \gg \gamma. \qquad (3.3.23)$$

Правое неравенство показывает, что учитываются лишь мелкомасштабные флуктуации с временами корреляции $\tau_{кор} \ll \gamma^{-1}$ — «бесстолкновительное» приближение. Второе неравенство необходимо для возможности использования бесконечно узких резонансов.

Термин «бесстолкновительное» приближение широко используется в теории плазмы. В случае газа ему отвечает приближение свободномолекулярного движения (*Климонтович*, IV).

Для использования ФДС (2.13) и формулы Каллена — Вельтона требуются знания канонического распределения Гиббса и, следовательно, расчета собственных значений энергии и собственных функций системы N частиц с функцией Гамильтона $H(X)$. Через эти характеристики выражаются частоты перехода ω_{nm} и матричные элементы внутренних параметров A_{nm}. Решение такой задачи практически не представляется возможным. По этой причине общие ФДС, как и соответствующие кинетические уравнения для N-частичных функций распределения, имеют в большей мере символическое, чем практическое значение. Они, однако, очень удобны в качестве «стартовых» при получении более простых ФДС.

Основное практическое значение имеют ФДС для одночастичных функций распределения. Условия (23) сохраняют свое значение и при переходе к одночастичному описанию. При этом ω_{nm} — частоты перехода для отдельного атома с учетом, разумеется, перенормировки одночастичных состояний за счет взаимодействия атомов с окружающей средой; $\tau_{рел} \sim \gamma^{-1}$ — время релаксации, определяемое интегралами столкновений в соответствующих кинетических уравнениях (интегралом Больцмана для разреженного газа, интегралом Ландау для системы заряженных частиц с кулоновским взаимодействием).

В заключение отметим, что формула Каллена — Вельтона (13) в классическом приближении принимает вид

$$(\delta A_i \delta A_j)_\omega = (2/\omega)\operatorname{Im}\alpha_{ij}(\omega)kT. \qquad (3.3.24)$$

Область применимости (24), как и соответствующего клас-

сического ФДС (2.14), не ограничена условием бесконечно узкого резонанса. Это видно уже из неравенств (23), так как при $\hbar \to 0$ правое неравенство, определяющее условие перехода к бесконечно узкому резонансу, перестает служить ограничением.

Справедливость классических ФДС (2.14), (24) для резонансов конечной ширины может быть доказана и прямым расчетом.

3.3.5. Каково же происхождение диссипации в формуле Каллена — Вельтона? Ввиду важности флуктуационно-диссипационных соотношений в современной статистической теории подведем некоторые итоги. При этом постараемся, в частности, дать краткий ответ на вопрос, поставленный в заголовке. Этот ответ содержится фактически в изложенном выше материале. Все же, как нам представляется, краткое повторение не будет излишним.

Выше приведены две трактовки формулы Каллена — Вельтона (13), (18). Обе формулы связывают спектральную плотность внутреннего параметра с мнимой частью соответствующей восприимчивости. Последняя является диссипативной характеристикой, поэтому, казалось бы, и нет вопроса. Действительно, именно мнимая часть восприимчивости и определяет диссипацию в формуле Каллена — Вельтона. Это, конечно, правильно, но все же это еще не ответ на поставленный вопрос.

Действительно, формула Каллена — Вельтона получена путем сопоставления выражений (12), (9), которые *по отдельности* определяют спектральную плотность флуктуаций внутреннего параметра и мнимую часть соответствующей восприимчивости. Естественно, что диссипация содержится уже в формуле (12), поскольку она не может возникнуть благодаря алгебраическим преобразованиям выражения (12) с помощью (9) в формулу Каллена — Вельтона (13). Таким образом, если формула Каллена — Вельтона является примером ФДС, то и *порождающее* ее выражение (12) само также является примером флуктуационно-диссипационного соотношения. Что же в нем является диссипативным фактором?

Таким диссипативным фактором служит, разумеется, функция $\delta(\omega - \omega_{nm})$, «ширина» которой характеризуется временем мелкомасштабных флуктуаций, определяющих диссипацию. Напомним, что границей раздела мелкомасштабных и крупномасштабных флуктуаций служат физически бесконечно малые масштабы $l_ф$, $\tau_ф$ (см. неравенства (1.4.14), (1.4.15)).

Если функцию $\delta(\omega - \omega_{nm})$ заменить кривой (22) с конечной шириной резонанса Δ, то результат расчета будет существенно зависеть от того, когда (на каком этапе) производится предельный переход $\Delta \to 0$. Для получения (12), (9) и, следовательно, формулы Каллена — Вельтона (13) предельный переход производится в окончательных формулах, т. е. в решении соответствующих уравнений, а не в самих уравнениях! Если же положить величину Δ равной нулю в самих уравнениях, то мы вернемся к обратимым уравнениям и получение флуктуационно-диссипационных соотношений станет невозможным.

Параметр Δ разделяет области мелко- и крупномасштабных флуктуаций. Крупномасштабные флуктуации здесь не учитывались. Их роль выявляется в **3.5—3.11.**

Итак, одна из причин наличия диссипации в формуле Каллена — Вельтона — это ослабление начальных корреляций мелкомасштабных флуктуаций. Именно благодаря этому в (12), (9) появляется диссипативный фактор $\delta(\omega - \omega_{nm})$.

Существенной является и другая причина. Чтобы выявить ее, вернемся к формуле (11), которая связывает спектральную плотность флуктуаций внутреннего параметра со спектральной плотностью флуктуаций N-частичной матрицы плотности $f_{nm}(t)$. Эта спектральная плотность определяется в свою очередь формулой (2.8), которая также представляет собой ФДС, поскольку содержит диссипативный фактор $\delta(\omega - \omega_{nm})$.

Формула (2.8) получена путем решения уравнения (2.3) (в нем γ_{nm} можно заменить на Δ, так как в конечных результатах $\Delta \to 0$), которое решалось при начальном ($t = t'$) условии (2.4).

Таким образом, при получении результата (2.8) существенно не только то, что предельный переход $\Delta \to 0$ совершается в конечных выражениях (в решении), но и то, что отлично от нуля начальное условие (2.4), которое, как мы видели, является мерой неполноты статистического описания. При полном описании коррелятор (2.4) обращается в нуль, одновременно обращается в нуль и спектральная плотность (2.8), а следовательно, и выражения (12), (9), приводящие к формуле Каллена — Вельтона (13).

Итак, *неполнота описания*, которая характеризуется одновременным коррелятором (2.4), *и ослабление начальных мелкомасштабных корреляций* являются *причинами диссипации* в формуле Каллена — Вельтона.

Из изложенного следует, что формула Каллена — Вельтона — лишь один из примеров флуктуационно-диссипационных соотношений. Далее мы познакомимся с другими важными для приложений ФДС.

3.3.6. Следует ли квантовая формула Найквиста из формулы Каллена — Вельтона? Формально (см., например, *Лифшиц*, *Питаевский*, 1978, § 78) выражение для спектральной плотности тока (1.19), которое является прямым следствием квантовой формулы Найквиста (1.18), получается из формулы Каллена — Вельтона (13) путем замены

$$\delta A \to J, \quad \operatorname{Im} \alpha \to \operatorname{Im}[i\omega/Z(\omega)] = \omega R/|Z(\omega)|^2 \qquad (3.3.25)$$

при любом значении ширины резонанса, определяемой сопротивлением R. Однако при этом мы выходим за рамки применимости самой формулы Каллена — Вельтона. Действительно, ведь нарушается равенство (2.12), без выполнения которого невозможно получить формулу Каллена — Вельтона (13) из двух, в общем случае независимых, выражений (12), (9) для спектральной плотности флуктуаций и мнимой части восприимчивости.

Эта непоследовательность проявляется и в том, что для любого внутреннего параметра интеграл по частотам от выражения (12) приводит к одновременному коррелятору, который не зависит от диссипативных характеристик. Напротив, интеграл по частотам в (1.19) зависит, как мы уже видели, от диссипативного фактора — электрического сопротивления R.

Заметим, что другое квантовое обобщение формулы Найквиста (1.21) не является, естественно, универсальным. Его применение (модели осцилляторов, системы с дискретными уровнями, примеры см. ниже) приводит для спектра к белому шуму, а формула Каллена — Вельтона содержит бесконечно узкие резонансы. Эти формулы относятся, таким образом, к двум предельным случаям.

3.4. ФДС для газа Больцмана. Флуктуационное представление интеграла столкновений Больцмана

3.4.1. ФДС для флуктуаций одночастичной матрицы плотности. В ФДС (2.13) для спектральной плотности флуктуаций N-частичной матрицы плотности δf_{nm} включены наборы квантовых чисел n, m системы N-частиц. Чтобы перейти к ФДС для одночастичных матриц плотности, надо использовать связь одночастичной и N-час-

тичной матриц плотности. После суммирования (или интегрирования) по «лишним» переменным (для одночастичных состояний) получим искомое соотношение.

Для газа Больцмана удобно использовать матрицу плотности в импульсном представлении $f_{\mathbf{p}'\mathbf{p}''}(t)$. В равновесном состоянии

$$f_{\mathbf{p}'\mathbf{p}''} = (2\pi\hbar)^3 V^{-1} f(\mathbf{p}')\,\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}''), \tag{3.4.1}$$

где $f(\mathbf{p})$ — распределение Максвелла. Для спектральной плотности флуктуаций $\delta f_{\mathbf{p}'\mathbf{p}''}$ из (2.13), (2.11) вытекает искомое ФДС:

$$\left(\delta f_{\mathbf{p}_1'\mathbf{p}_1''}\delta f_{\mathbf{p}_2'\mathbf{p}_2''}\right)_\omega = \hbar\,\mathrm{Im}\,\alpha_{\mathbf{p}_1',\mathbf{p}_1'',\mathbf{p}_2',\mathbf{p}_2''}(\omega)\,\mathrm{cth}\,(\hbar\omega/2kT) \tag{3.4.2}$$

и выражение для мнимой части соответствующей «поляризуемости»:

$$\mathrm{Im}\,\alpha_{\mathbf{p}_1'\mathbf{p}_1''\mathbf{p}_2'\mathbf{p}_2''}(\omega) = N^{-1}(\pi/\hbar)[(2\pi\hbar)^6/V^2]\,\delta(\mathbf{p}_1' - \mathbf{p}_2') \times$$
$$\times\,\delta(\mathbf{p}_1'' - \mathbf{p}_2'')\,\delta\left(\omega - \left(E_{\mathbf{p}_1'} - E_{\mathbf{p}_1''}\right)/\hbar\right)\left(f(\mathbf{p}_1'') - f(\mathbf{p}_1')\right). \tag{3.4.3}$$

В отличие от (2.11) здесь появился фактор N^{-1}. Это обусловлено тем, что одночастичные распределения являются коллективными переменными аддитивного типа.

Неравенства (3.23) сохраняют свой смысл. Теперь, однако, частота перехода $\omega_{nm} \to \omega_{\mathbf{p}'\mathbf{p}''} = (E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}''})/\hbar$, а $\gamma \to \tau^{-1}$, где τ — время свободного пробега.

Мы установили, таким образом, ФДС для одночастичной матрицы плотности атомов. С его помощью найдем теперь ФДС, которое в газе Больцмана играет роль формулы Каллена — Вельтона.

3.4.2. ФДС для газа Больцмана. Вернемся к формуле (3.17). Она связывает флуктуацию матрицы плотности с флуктуациями внутренних термодинамических параметров. В задаче рассеяния атомов в газе Больцмана аналогичную роль играет соотношение

$$\delta U\left(\omega, (\mathbf{p}_1' - \mathbf{p}_1'')/\hbar,\ \mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_1''\right) = N\int \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\,T(\mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2', \mathbf{p}_1'', \mathbf{p}_2'') \times$$
$$\times\,\delta(\mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_2' - \mathbf{p}_1'' - \mathbf{p}_2'')\,\delta f_{\mathbf{p}_2''\mathbf{p}_2'}(\omega)\,d\mathbf{p}_2'\,d\mathbf{p}_2''. \tag{3.4.4}$$

Здесь $T(\mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2', \mathbf{p}_1'', \mathbf{p}_2'')$ — T-матрица рассеяния частиц (*Тейлор*, 1975; *Ландау*, *Лифшиц*, 1974; *Климонтович*, 1982, IV). В приближении теории возмущений T-матрица

определяется компонентой Фурье $\nu(\mathbf{k})$ потенциал взаимодействия частиц $\Phi(|\mathbf{r}|)$:

$$T(\mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2', \mathbf{p}_1'', \mathbf{p}_2'') = \\ = \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} V^{-1}\nu\left(\frac{|\mathbf{p}_1' - \mathbf{p}_1''|}{\hbar}\right)\delta(\mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_2' - \mathbf{p}_1'' - \mathbf{p}_2''). \quad (3.4.5)$$

При подстановке этого выражения в (4) выпадает зависимость от суммарной переменной, и оно принимает вид

$$\delta U(\omega, \mathbf{k}) = n\int \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\nu(\mathbf{k})\,\delta f(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{p})\,d\mathbf{p} = \nu(\mathbf{k})\,\delta n(\omega, \mathbf{k}), \quad (3.4.6)$$

где $\mathbf{k} = (\mathbf{p}_1' - \mathbf{p}_1'')/\hbar$,

$$\delta n(\omega, \mathbf{k}) = \frac{N}{V}\int \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\delta f(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{p})\,d\mathbf{p} \quad (3.4.7)$$

— флуктуация компоненты Фурье средней плотности числа частиц $n(\mathbf{r}, t)$.

Таким образом, функция $\delta U(\omega, \mathbf{k})$ в (6) есть компонента Фурье потенциала $U(\mathbf{r}, t)$, определяющего силу $\mathbf{F} = -\operatorname{grad} U$, которая действует в газе на частицу. Это дает основание назвать более сложную функцию $\delta U(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_1'')$, зависящую не только от передаваемого импульса $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p}_1' - \mathbf{p}_1''$, но и суммарного импульса, флуктуационным потенциалом в задаче *рассеяния*. Зависимость от $\mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_1''$ исчезает лишь в приближении теории возмущений, когда функция $\delta U(\omega, \mathbf{k})$ определяется равенством (6).

Спектральная плотность флуктуаций потенциала рассеяния и мнимая часть соответствующей «поляризуемости» определяются формулами (*Климонтович*, 1982, IV)

$$(\delta U\delta U)(\omega, (\mathbf{p}_1' - \mathbf{p}_1'')/\hbar, \mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_1'') = \pi\hbar\frac{N}{V}\int\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\times \\ \times\delta(\mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_2' - \mathbf{p}_1'' - \mathbf{p}_2'')\,\delta\left(\hbar\omega - \left(E_{\mathbf{p}_2''} - E_{\mathbf{p}_2'}\right)\right)\times \\ \times|T(\mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2', \mathbf{p}_1'', \mathbf{p}_2'')|^2\left(f(\mathbf{p}_2') + f(\mathbf{p}_2'')\right)d\mathbf{p}_2'\,d\mathbf{p}_2'', \quad (3.4.8)$$

$$\operatorname{Im}\alpha\left(\omega, \frac{\mathbf{p}_1' - \mathbf{p}_1''}{\hbar}, \mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_2'\right) = \pi\frac{N}{V}\int\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\times \\ \times\delta(\mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_2' - \mathbf{p}_1'' - \mathbf{p}_2'')\,\delta\left(\hbar\omega - \left(E_{\mathbf{p}_2''} - E_{\mathbf{p}_2'}\right)\right)\times \\ \times|T(\mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2', \mathbf{p}_1'', \mathbf{p}_2'')|^2\left(f(\mathbf{p}_2') - f(\mathbf{p}_2'')\right)d\mathbf{p}_2'\,d\mathbf{p}_2''. \quad (3.4.9)$$

В равновесном состоянии, когда $f(\mathbf{p})$ — распределение Максвелла, справедливо равенство

$$\delta\left(\hbar\omega - \left(E_{\mathbf{p}_2''} - E_{\mathbf{p}_2'}\right)\right)\frac{f(\mathbf{p}_2') + f(\mathbf{p}_2'')}{f(\mathbf{p}_2') - f(\mathbf{p}_2'')} =$$

$$= \delta\left(\hbar\omega - \left(E_{\mathbf{p}_2''} - E_{\mathbf{p}_2'}\right)\right)\operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2kT}, \quad (3.4.10)$$

которое аналогично формуле (2.12) для N-частичных распределений. Из (8)—(10) и вытекает искомое ФДС $(\mathbf{k} = (\mathbf{p}' - \mathbf{p}'')/\hbar)$:

$$(\delta U \delta U)_{\omega,\mathbf{k},\mathbf{p}'+\mathbf{p}''} = \hbar\,\mathrm{Im}\,\alpha(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{p}' + \mathbf{p}'')\operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2kT}, \quad (3.4.11)$$

которое в газе Больцмана играет роль формулы Каллена — Вельтона (3.13), но для более сложной спектральной плотности, так как она зависит не только от ω и k, но и от суммарного импульса. Последняя зависимость является отражением неоднородности флуктуационного процесса в пространстве импульсов при рассеянии частиц. Неоднородность (зависимость от $\mathbf{p}' + \mathbf{p}''$) исчезает лишь в приближении теории возмущений, в котором (11) можно рассматривать как конкретный пример формулы Каллена — Вельтона (3.13) для газа Больцмана.

3.4.3. Флуктуационное представление интеграла столкновений Больцмана. В кинетической теории возможны две формы записи интегралов столкновений. Одна берет свое начало от работ Больцмана по кинетической теории газов, а другая — от работы Эйнштейна «Испускание и поглощение излучения по квантовой теории» (*Эйнштейн*, 1916).

Вернемся к выражению (1.5.11) для интеграла столкновений Больцмана. Оно получено при использовании классической механики, однако, сохраняет форму и при использовании квантовой теории. При этом эффективное сечение может быть выражено через T-матрицу. Это позволяет записать выражение для квантового интеграла Больцмана в виде

$$I_{\text{Б}}(\mathbf{p}_1', t) = \frac{2\pi}{\hbar} N \int \frac{V^2}{(2\pi\hbar)^6} \times$$

$$\times\, \delta(\mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_2' - \mathbf{p}_1'' - \mathbf{p}_2'')\, \delta\left(E_{\mathbf{p}_1'} + E_{\mathbf{p}_2'} - E_{\mathbf{p}_1''} - E_{\mathbf{p}_2''}\right) \times$$

$$\times\, |T(\mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2', \mathbf{p}_1'', \mathbf{p}_2'')|^2 \left(f(\mathbf{p}_2'', t) f(\mathbf{p}_1'', t) - f(\mathbf{p}_2', t) f(\mathbf{p}_1', t)\right) \times$$

$$\times\, d\mathbf{p}_2'\, d\mathbf{p}_1''\, d\mathbf{p}_2''. \quad (3.4.12)$$

Если использовать выражения (8), (9), то (12) можно переписать в эквивалентной форме:

$$I_{\text{Б}}(\mathbf{p}_1', t) = (2\pi)^{-3}\hbar^{-1}\int \delta(\hbar\mathbf{k} - (\mathbf{p}_1' - \mathbf{p}_1'')) \times$$
$$\times\, \delta\left(\hbar\omega - \left(E_{\mathbf{p}_1'} - E_{\mathbf{p}_1''}\right)\right)\Big[(\delta U \delta U)_{\omega,\mathbf{k},\mathbf{p}_1'+\mathbf{p}_1''}(f(\mathbf{p}_1'') - f(\mathbf{p}_1')) -$$
$$-\hbar\,\mathrm{Im}\,\alpha(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_1'')(f(\mathbf{p}_1'') + f(\mathbf{p}_1'))\Big] d\omega\, d\mathbf{k}\, d\mathbf{p}_1''. \quad (3.4.13)$$

Структура (13) подобна структуре интегралов столкновений для системы атомов и поля (*Хакен*, 1983, *Климонтович*, III, IV). Действительно, первый член в квадратных скобках правой части (13) может быть назван «*индуцированным*», поскольку он пропорционален спектральной плотности флуктуаций δU. Индуцированный вклад в интеграл столкновений пропорционален также *разности населенностей* в импульсном пространстве — разности функций распределения. Второй член пропорционален мнимой части соответствующей «поляризуемости».

Возможность флуктуационного представления интеграла столкновений Больцмана весьма полезна, так как открывает способ одновременного учета в интеграле столкновений как сильных взаимодействий на малых расстояниях (как в газе Больцмана), так и слабых, но коллективных взаимодействий на больших расстояниях. Последние особенно существенны в кинетической теории плазмы (*Балеску*, 1967; *Гуров*, 1966; *Силин*, 1971; *Лифшиц*, *Питаевский*, 1979; *Климонтович*, I—IV).

Теперь рассмотрим примеры ФДС для случаев, когда оказывается невозможным переход к приближению бесконечно узкого резонанса. В связи с этим возникнет и вопрос о справедливости принятого во многих руководствах квантового обобщения формулы Найквиста.

3.5. ФДС для крупномасштабных — кинетических флуктуаций

Мы уже неоднократно отмечали, что интегралы столкновений в кинетических уравнениях как для N-частичных, так и одночастичных распределений определяются мелкомасштабными — «бесстолкновительными» флуктуациями. Разделение флуктуаций на мелко- и крупномасштабные (выбор параметра Δ, удовлетворяющего неравенствам (3.23)) связано с возможностью введения на разных уровнях описания физически бесконечно малых масштабов времени τ_ϕ и длины l_ϕ (*Климонтович*, 1971,

II—IV). Крупномасштабные флуктуации описываются самими кинетическими уравнениями, если последние использовать для сглаженных по V_Φ случайных распределений.

Начнем с рассмотрения наиболее общих ФДС для флуктуаций N-частичных распределений, но уже с учетом столкновений, т. е. для кинетических флуктуаций.

Вернемся снова к уравнению (2.2) для флуктуаций N-частичной матрицы плотности и к соответствующему уравнению (2.3) для двухвременного коррелятора флуктуаций. Не будем, однако, использовать простейшую модель (2.1) для интеграла столкновений. Тогда в формулах (2.2)—(2.5) вместо матрицы диссипативных коэффициентов γ_{nm} появится соответствующий оператор столкновений $\delta\widehat{I}_{nm}$. В результате (2.5) для спектральной плотности флуктуаций δf_{nm} примет теперь вид

$$(\delta f_{nm}\delta f_{n_1m_1})_\omega = 2\,\mathrm{Re}\, i\,(\omega - \omega_{nm} + i\delta\widehat{I}_{nm})^{-1} \times \\ \times \left[\delta_{nn_1}\delta_{mm_1}(f_m + f_n)/2 - \delta_{nm}\delta_{n_1m_1}f_nf_{n_1}\right]. \quad (3.5.1)$$

Одновременной коррелятор связан со спектральной плотностью равенством (2.6). При подстановке в него выражения (1) после интегрирования по ω приходим к выражению (2.4).

Выражение (1) для спектральной плотности флуктуаций получено путем решения уравнения для двухвременного коррелятора при использовании в качестве начального условия ($t = t'$) выражения (2.4) для одновременного коррелятора. Выражение (1) может быть получено и путем решения соответствующего уравнения Ланжевена для функции δf_{nm}

$$(\partial/\partial t + i\omega_{nm} + \delta\widehat{I}_{nm})\,\delta f_{nm} = y_{nm}. \quad (3.5.2)$$

Среднее значение источника Ланжевена равно нулю, а двухвременной коррелятор определяется выражением

$$\langle y_{nm}(t)\, y^*_{n_1m_1}(t')\rangle = (\delta\widehat{I}_{nm} + \delta\widehat{I}_{n_1m_1}) \times \\ \times \left[\delta_{nn_1}\delta_{mm_1}(f_m + f_n)/2 - \delta_{nm}\delta_{n_1m_1}f_nf_{n_1}\right]\delta(t - t'). \quad (3.5.3)$$

Отсюда вытекает, что спектральная плотность шума определяется формулой

$$(y_{nm}y_{n_1m_1})_\omega = (\delta\widehat{I}_{nm} + \delta\widehat{I}_{n_1m_1}) \times \\ \times \left[\delta_{nn_1}\delta_{mm_1}(f_m + f_n)/2 - \delta_{nm}\delta_{n_1m_1}f_nf_{n_1}\right] \quad (3.5.4)$$

и представляет собой белый шум.

Заметим, что второй член в правой части (2.4) и соответствующие вторые члены в квадратных скобках в формулах (1), (3), (4) обеспечивают выполнение условия нормировки $\sum_n f_n = 1$, или, как его следствия, равенства

$$\sum_n \delta f_{nn} = 0. \tag{3.5.5}$$

Так, проводя в (2.4) суммирование по n, m (или по n_1, m_1), приходим к равенствам

$$\sum_n \langle \delta f_{nn} \delta f^*_{n_1 m_1} \rangle = 0, \qquad \sum_{n_1} \langle \delta f_{nm} \delta f^*_{n_1 n_1} \rangle = 0, \tag{3.5.6}$$

которые и обеспечивают выполнение условия (5).

Если интересоваться не суммарными по всем квантовым числам характеристиками, а лишь локальными характеристиками, то вклады, определяемые вторым членом в правой части (2.4), а также вторыми членами в квадратных скобках в формулах (1), (3), (4), не являются, как правило, существенными, поэтому, например, выражение (1) для спектральной плотности можно записать в более простом виде:

$$(\delta f_{nm} \delta f_{n_1 m_1})_\omega = \\ = \mathrm{Re}\, i\, (\omega - \omega_{nm} + i\delta \widehat{I}_{nm})^{-1}\, \delta_{nn_1} \delta_{mm_1} (f_m + f_n). \tag{3.5.7}$$

Представим его в виде ФДС. Для этого умножим и поделим гравую часть равенства на разность функций распределения $f_m - f_n$ и введем определение поляризуемости (ср. с (2.9))

$$\alpha_{nmn_1m_1}(\omega) = -\hbar^{-1} (\omega - \omega_{nm} + i\delta \widehat{I}_{nm})^{-1}\, \delta_{nn_1} \delta_{mm_1} (f_m - f_n). \tag{3.5.8}$$

Из этих формул вытекает, что спектральная плотность может быть выражена через мнимую часть «поляризуемости». В результате приходим к искомому ФДС:

$$(\delta f_{nm} \delta f_{n_1 m_1})_\omega = \hbar\, \mathrm{Im}\, \alpha_{nmn_1m_1}(\omega)\, (f_m + f_n)/(f_m - f_n). \tag{3.5.9}$$

Из-за конечности ширины резонанса теперь нет оснований использовать равенство (2.12). Тем самым ФДС (9) не может быть приведено к виду (2.13). Исключение составляет лишь классическое приближение, когда ФДС (2.14) остается справедливым и при конечной ширине резонанса.

3.6. Примеры ФДС для крупномасштабных флуктуаций

3.6.1. ФДС для газа Больцмана. При расчете крупномасштабных — кинетических флуктуаций в газе можно использовать два способа. Один основан на кинетическом уравнении Леонтовича, а второй на кинетическом уравнении Больцмана для сглаженной (случайной) одночастичной функции распределения. Для равновесного газа возможность расчета кинетических флуктуаций на основе уравнения Больцмана использована впервые в работе (*Кадомцев*, 1957). Подробное изложение кинетической теории флуктуаций в газе как для равновесных, так и неравновесных состояний дано в работах (*Ганцевич*, *Гуревич*, *Катилюс*, 1979; *Климонтович*, 1971 (1), II—IV; *Кайзер*, 1988).

При учете столкновений в формулах (4.1), (4.2) и, в частности, в выражении для мнимой части «поляризуемости» (4.3) нужно произвести замену

$$\pi\delta(\omega - (E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}''})/\hbar) \to \mathrm{Re}\, i\,[\omega - (E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}''})/\hbar + i\delta\hat{I}_{\mathbf{p}'\mathbf{p}''}]^{-1}, \tag{3.6.1}$$

где $\delta\hat{I}_{\mathbf{p}'\mathbf{p}''}$ — линеаризованный оператор столкновений. Тем самым учитывается конечность ширины резонанса, обусловленная столкновениями атомов газа. В результате вместо (4.2) получаем иное ФДС:

$$\left(\delta f_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_1}^{\prime\,\prime\prime}\delta f_{\mathbf{p}_2\mathbf{p}_2}^{\prime\,\prime\prime}\right)_\omega = \\ = \hbar\,\mathrm{Im}\,\alpha(\mathbf{p}_1', \mathbf{p}_1'', \mathbf{p}_2', \mathbf{p}_2'', \omega)\,[f(\mathbf{p}_1'') + f(\mathbf{p}_1')]/[f(\mathbf{p}_1'') - f(\mathbf{p}_1')]. \tag{3.6.2}$$

Из-за конечности ширины резонанса (из-за учета столкновений) мы не можем теперь воспользоваться равенством (4.10) и перейти от выражения (2) к (4.2). По этой же причине мы не можем теперь использовать ФДС (4.11) для спектральной плотности флуктуаций потенциала рассеяния δU.

Запись ФДС в форме (2) обладает определенным преимуществом даже в «бесстолкновительном» приближении, когда формулы (2), (4.2) эквивалентны. Действительно, соотношение (2) остается справедливым и для неравновесных состояний. Неравновесное распределение $f(\mathbf{p})$ может быть найдено путем решения уравнения Больцмана.

3.6.2. Система атомов, взаимодействующих через флуктуационное электромагнитное поле. При построении кинетических уравнений для системы атомов и электромагнитного поля флуктуации как характеристик атомов, так и поля также могут быть разделены на мелко- и крупномасштабные. Разделяющий параметр Δ и в этом случае удовлетворяет неравенствам (3.23). Меняется, однако, смысл диссипативного параметра γ. Теперь в классической теории γ — коэффициент радиационного трения. В квантовой теории $\gamma \to \gamma_{nm}$, где γ_{nm} — диссипативный радиационный фактор для перехода $n \to m$. Он связан с коэффициентом спонтанного излучения.

Кинетическая теория системы атомов и поля излагается во многих руководствах (например, *Агарвал*, 1974; *Хакен*, 1988; *Файн*, 1972; *Клышко*, 1988; *Климонтович*, III, IV). Здесь используются лишь те результаты, которые необходимы для выявления общей структуры ФДС.

В кинетическом уравнении для одночастичного распределения состояний атомов $f_n(t)$ (здесь, для простоты, неподвижных)

$$\partial f_n/\partial t = I_n(t) \tag{3.6.3}$$

мелкомасштабные флуктуации определяют интеграл столкновений $I_n(t)$.

Если излучение является равновесным (приближение термостата), то интеграл столкновений определяется выражением (*Климонтович*, III, IV)

$$I_n(t) = \sum_m \left[B_m^n \frac{(\delta \mathbf{E} \delta \mathbf{E})_{\omega_{nm}}}{4\pi^2} (f_m - f_n) - \frac{1}{2} A_m^n (f_m + f_n) \right]. \tag{3.6.4}$$

Здесь использованы обозначения для коэффициентов Эйнштейна:

$$B_m^n = \frac{4\pi^2 |\mathbf{d}_{nm}|^2}{3\hbar^2}, \qquad A_m^n = \frac{4|\mathbf{d}_{nm}|^2}{3\hbar c^3} \omega_{nm}^3. \tag{3.6.5}$$

Эти выражения получаются в ходе вывода кинетического уравнения (3).

Для системы в термостате спектральная плотность флуктуаций поля

$$(4\pi^2)^{-1} (\delta \mathbf{E} \delta \mathbf{E})_\omega \equiv \rho_\omega = (\omega^2/2\pi^2 c^3) \hbar\omega \operatorname{cth}(\hbar\omega/2kT), \tag{3.6.6}$$

где ρ_ω — распределение Планка для средней энергии равновесного электромагнитного излучения.

В равновесном состоянии интеграл столкновений $I_n = 0$ и функция распределения состояний атомов определяется распределением Гиббса — Больцмана:

$$f_n = Z^{-1} \exp(-E_n/kT), \qquad Z = \sum_n \exp(-E_n/kT). \quad (3.6.7)$$

Существенно, что в уравнения (3), (4) распределение (6) входит лишь на частотах перехода ω_{nm}. Тем самым предполагается наличие бесконечно узкого резонанса $\omega = \omega_{nm}$. Это означает, что резонансная кривая мелкомасштабных флуктуаций

$$\pi^{-1}\Delta\left[(\omega - \omega_{nm})^2 + \Delta^2\right]^{-1} \to \delta(\omega - \omega_{nm}),$$
$$\max(kT/\hbar,\ \omega_{nm}) \gg \Delta \gg \gamma_{nm}. \quad (3.6.8)$$

Для оптического диапазона параметр $kT/\hbar\omega_{nm} \ll 1$, поэтому верхняя граница в неравенствах (8) определяется частотой перехода ω_{nm}.

Как и в газе Больцмана, расчет крупномасштабных флуктуаций для системы атомы — поле может быть проведен двумя путями. Во-первых, можно использовать в качестве исходного кинетическое уравнение для N-частичного квантового распределения (*Климонтович*, 1978, III, IV), во-вторых — кинетическое уравнение для одночастичной матрицы плотности f_{nm} с источниками Ланжевена. Такой способ расчета широко используется при исследовании флуктуаций в квантовых генераторах (*Лэкс*, 1968, 1974; *Хакен*, 1981; *Климонтович*, 1978, III, IV).

Рассмотрим две упрощенные модели для системы атомы — поле: приближение двухуровневых атомов и модель атомов-осцилляторов с собственной частотой ω_0. Начнем с первой модели.

Обозначим два выделенных уровня через a, b. При этом a — верхний уровень, ω_{ab} — частота перехода. Расчет приводит к следующему выражению для спектральной плотности флуктуаций тока:

$$(\delta J \delta J)_{\omega,\mathbf{k}} = \frac{2\gamma_{ab}}{\gamma_{ab}^2 + (\omega - \omega_{ab}^2/\omega)^2}\, n\omega_{ab}^2 |d_{ab}|^2 (f_a + f_b). \quad (3.6.9)$$

Это выражение уже само по себе представляет ФДС (ср. со сказанным в 3.5), так как связывает спектральную плотность флуктуаций с диссипативной функцией. Для многих целей, в частности для сопоставления с квантовой формулой Найквиста (1.18), (1.19), полезна и другая форма записи ФДС (9).

Используем выражение для электрической проводимости системы двухуровневых атомов:

$$\sigma(\omega) = \frac{2}{3\left[\gamma_{ab} - i\left(\omega - \omega_{ab}^2/\omega\right)^2\right]} \frac{n\omega_{ab}}{\hbar} |d_{ab}|^2 (f_a - f_b). \quad (3.6.10)$$

Из (9), (10) вытекает иная форма записи ФДС:

$$(\delta J \delta J)_{\omega,\mathbf{k}} = 3 \cdot 2 \operatorname{Re} \sigma(\omega) (1/2) \hbar\omega_{ab} (f_b + f_a)/(f_b - f_a) \equiv$$
$$\equiv 3 \cdot 2 \operatorname{Re} \sigma(\omega) kT_{\omega_{ab}}. \quad (3.6.11)$$

Сравним это выражение (при фиксированном значении $\mathbf{k}$) с квантовым обобщением (1.18), (1.19) классической формы Найквиста (1.6). Отметим соответствие $\sigma(\omega) \leftrightarrow 1/Z(\omega)$, $\gamma_{ab} \leftrightarrow R$.

Квантовая формула (11) следует из соответствующего классического выражения при замене

$$kT \to (1/2) \hbar\omega_{ab} \operatorname{cth} (\hbar\omega_{ab}/2kT) \equiv kT_{\omega_{ab}}, \quad (3.6.12)$$

а не $kT \to kT_\omega$, как при переходе от (1.6) к (1.18).

Одновременной коррелятор флуктуаций тока определяется выражением

$$(\delta J \delta J)_{\mathbf{k}} = n\omega_{ab}^2 |d_{ab}|^2 (f_b + f_a). \quad (3.6.13)$$

Оно вытекает из (11) при интегрировании по ω и не зависит от диссипативного фактора γ_{ab}.

Напротив, расчет одновременного коррелятора $\langle J^2 \rangle$ по квантовой формуле Найквиста (1.19) приводит к зависимости средней энергии тепловых колебаний в электрическом контуре от сопротивления R. Это противоречит статистической теории и, как уже отмечалось, приводит к нарушению второго закона термодинамики.

Приведем, наконец, выражение для спектральной плотности флуктуаций векторов поляризации в форме, аналогичной (11):

$$(\delta \mathbf{P} \delta \mathbf{P})_{\omega,\mathbf{k}} = 3 (2/\omega) \operatorname{Im} \alpha(\omega) kT_{\omega_{ab}}. \quad (3.6.14)$$

Оно соответствует классическим выражениям (1.14), (3.24), в которых произведена замена (12)!

3.6.3. Равновесное электромагнитное излучение в полости. Формула Планка. При расчете распределения по спектру теплового электромагнитного излучения в полости конечность времени корреляции флуктуаций определяется диссипацией на границе области. Она может быть учтена путем введения эффективного коэффициента затухания $\gamma = 4\pi\sigma$, обусловленного проводимостью стенок σ.

В общем случае коэффициент γ зависит от частоты и волнового числа.

В этом приближении пространственно-временная спектральная плотность флуктуаций электрического поля определяется выражением (см., например, *Климонтович*, IV, гл. 14)

$$(8\pi)^{-1}(\delta\mathbf{E}\delta\mathbf{E})_{\omega,\mathbf{k}} = 2\gamma_{\mathbf{k}}\left[\gamma_{\mathbf{k}}^2 + (\omega - \omega_{\mathbf{k}}^2/\omega)^2\right]^{-1} kT_{\omega_{\mathbf{k}}}, \qquad \omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}|. \tag{3.6.15}$$

Отсюда следует, что средняя энергия электромагнитного осциллятора с номером k (одновременной коррелятор флуктуаций поля)

$$\frac{(\delta\mathbf{E}\delta\mathbf{E})_{\mathbf{k}}}{8\pi} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{(\delta\mathbf{E}\delta\mathbf{E})_{\omega,\mathbf{k}}}{8\pi}\,\frac{d\omega}{2\pi} = kT_{\omega_{\mathbf{k}}}. \tag{3.6.16}$$

Приведенные выражения вытекают из соответствующих классических формул при замене (ср. с (12))

$$kT \to (1/2)\,\hbar\omega_{\mathbf{k}}\,\mathrm{cth}\,(\hbar\omega_{\mathbf{k}}/2kT) \equiv kT_{\omega_{\mathbf{k}}}. \tag{3.6.17}$$

Заметим, что и в квантовом случае одновременной коррелятор (16) не зависит от диссипативного фактора $\gamma_{\mathbf{k}}$ (ср. с (13)).

Переход от пространственно-временного распределения флуктуаций поля к формуле Планка (6) возможен лишь в «бесстолкновительном» приближении, т. е. в нулевом приближении по параметру $\hbar\gamma_{\mathbf{k}}/kT$, или, иными словами, при бесконечно узком резонансе, когда

$$\gamma_{\mathbf{k}}\left[\gamma_{\mathbf{k}}^2 + (\omega - \omega_{\mathbf{k}}^2/\omega)^2\right]^{-1} \to \pi\delta\left(\omega - \omega_{\mathbf{k}}^2/\omega\right). \tag{3.6.18}$$

После этой замены в (15) можно выполнить интегрирование по волновым числам k. В результате приходим к формуле Планка (6).

Заметим, что если бы мы действовали не по Планку, а в духе квантовой формулы Найквиста (1.18), то при переходе от классических формул вместо (17) надо было бы сделать замену $kT \to kT_{\omega}$. Тогда вместо (3.15) мы пришли бы к следующему выражению для пространственно-временной спектральной плотности флуктуаций поля:

$$(8\pi)^{-1}(\delta\mathbf{E}\delta\mathbf{E})_{\omega,\mathbf{k}} = 2\gamma_{\mathbf{k}}\left[\gamma_{\mathbf{k}}^2 + (\omega - \omega_{\mathbf{k}}^2/\omega)^2\right]^{-1} kT_{\omega}. \tag{3.6.19}$$

В «бесстолкновительном» приближении (18) обе формулы (15) и (19) приводят к формуле Планка (6). Однако

при конечной ширине резонанса интегрирование по ω в (19) приводит не к (16), а к выражению, зависящему от диссипативного фактора $\gamma_{\mathbf{k}}$. Эта зависимость может быть и линейной! Тем самым мы снова приходим к противоречию.

При любом фиксированном $\mathbf{k}$ зависимость спектральных функций при больших частотах существенно различна: пропорциональна ω^{-2} в (15); пропорциональна $\exp(-\omega)$ в (19).

Отметим, наконец, что учет конечности ширины резонансов — учет конечности значения параметра $\hbar\gamma_{\mathbf{k}}/kT$ снимает трудность с расходимостью интеграла по ω энергии нулевых колебаний, к которой приводит формула Планка (6) (*Климонтович*, IV, гл. 14). Действительно, интегрирование по ω в (15) приводит к выражению (16), которое конечно при всех $\mathbf{k}$. Суммирование же по $\mathbf{k}$ ограничено условиями взаимодействия излучения с веществом стенок!

Для дальнейшего полезна наряду с (6) другая форма записи формулы Планка.

Формула Планка следует из ФДС (15) в «бесстолкновительном» приближении (18). По этой причине формула Планка также должна представлять ФДС. Чтобы сделать это утверждение более явным, с помощью (6) запишем выражение для спектральной плотности силы $\mathbf{f} = e\mathbf{E}$, действующей на частицу с зарядом e. В расчете на одну степень свободы получаем следующее выражение:

$$(1/3)(\mathbf{f}^2)_\omega = (e^2/3)(\delta\mathbf{E})^2_\omega = (4e^2\omega^2/3c^3)\,kT_\omega. \qquad (3.6.20)$$

Если теперь использовать выражение для коэффициента радиационного трения, то равенство (20) принимает вид ФДС

$$(1/3)(\mathbf{f}^2)_\omega = 2m\gamma_\omega kT_\omega, \quad \gamma_\omega = 2e^2\omega^2/3mc^3, \qquad (3.6.21)$$

которое можно рассматривать как пример традиционной квантовой формулы Найквиста (1.18). При этом имеет место соответствие

$$m \leftrightarrow L,\ \gamma \leftrightarrow R/L,\ v \leftrightarrow J,\ (1/3)(\mathbf{f}^2)_\omega \leftrightarrow (\mathscr{E}^2)_\omega. \qquad (3.6.22)$$

В этом нет ничего удивительного, так как формула Планка (6), а поэтому и формула (21) следуют из более общего ФДС (15), справедливого и при конечных ширинах резонансов $\gamma_{\mathbf{k}}$, в «бесстолкновительном» приближении (18). В «бесстолкновительном» приближении к виду (21)

приводится и самое общее ФДС (2.13) для спектральной плотности флуктуаций многочастичной матрицы плотности.

Трудности же при использовании квантовой формулы Найквиста (1.18), о которых речь шла выше и к которым мы еще вернемся, возникают, когда (1.18) применяется для цепи с конечной шириной резонанса (конечным R), т. е. вне рамок ее применимости («бесстолкновительного» приближения).

Покажем, что и формула Планка, справедливая в «бесстолкновительном» приближении (18), приводит к противоречиям со статистической теорией равновесного состояния и термодинамикой, если эту формулу использовать вне рамок ее применимости.

3.6.4. Электрон в тепловом электромагнитном поле. Рассмотрим движение электрона в тепловом электромагнитном поле. На первый взгляд для описания этого движения представляется естественным использовать уравнение Ланжевена, в котором случайная сила определяется флуктуациями поля δE:

$$d\mathbf{v}/dt + \hat{\gamma}\mathbf{v} = \mathbf{f}/m = (e/m)\,\delta\mathbf{E}(t). \qquad (3.6.23)$$

Здесь $\hat{\gamma}$ — оператор радиационного трения. Спектральная плотность силы Ланжевена определяется формулой (21). С помощью (23), (21) найдем распределение средней энергии по частотам:

$$\frac{m(\mathbf{v}^2)_\omega}{2} = \frac{1}{2m}\frac{(\mathbf{f}^2)_\omega}{\omega^2+\gamma_\omega^2} = \frac{\gamma_\omega}{\omega^2+\gamma_\omega^2}\cdot 3kT_\omega. \qquad (3.6.24)$$

Отсюда вытекает выражение для средней кинетической энергии заряженной частицы в состоянии равновесия:

$$\frac{m\langle\mathbf{v}^2\rangle}{2} = \frac{3}{2}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{2\gamma_\omega}{\omega^2+\gamma_\omega^2}kT_\omega\frac{d\omega}{2\pi} \neq \frac{3}{2}kT. \qquad (3.6.25)$$

Мы пришли к противоречию: в состоянии равновесия не выполняется равенство

$$\frac{m\langle\mathbf{v}^2\rangle}{2} = \frac{3}{2}kT. \qquad (3.6.26)$$

Противоречие (25) снимается в двух случаях: классическое приближение — нулевое приближение по параметру $\hbar\gamma_\omega/kT$; «бесстолкновительное» приближение — нулевое приближение по параметру γ_ω/ω.

Для рассматриваемого примера, когда имеется один электрон в электромагнитном поле, равенство (26) должно иметь место и в квантовой теории. Это следует и из общего выражения для средней кинетической энергии частицы (*Ландау*, *Лифшиц*, 1976, § 33; *Климонтович*, II, § 67)

$$\frac{m\langle v^2\rangle}{2} = \frac{3}{2}kT + \frac{\hbar^2 n}{24mkT}\int \frac{\partial^2\Phi}{\partial r^2} g_2(|r|)\,dr. \quad (3.6.27)$$

Здесь n — средняя концентрация частиц, Φ — потенциал их взаимодействия, g_2 — парная корреляционная функция, определяемая взаимодействием частиц. В отсутствие прямого взаимодействия между частицами второй член правой части в (27) обращается в нуль и мы приходим к равенству (26).

В чем же тогда причина «нефизического» результата (25)?

Дело в том, что для рассматриваемой задачи уравнение Ланжевена (23) не является справедливым. Обусловлено это следующим.

Надо принять во внимание, что в рассматриваемой задаче имеются два диссипативных параметра — две характерных частоты «столкновений»: эффективный коэффициент затухания $\gamma_{\mathbf{k}} = 4\pi\sigma$, учитывающий диссипацию на стенках, $\gamma_\omega = 2e^2\omega^2/3mc^3$ — коэффициент радиационного трения.

Коэффициент $\gamma_{\mathbf{k}}$ существен при получении выражения (15) — ФДС для спектральной плотности флуктуаций поля, а коэффициент γ_ω входит в уравнение Ланжевена (23) для компоненты Фурье v_ω. При этом используются два противоположных приближения, произвольное совмещение которых в одном уравнении (23) и приводит к противоречию.

Для расчета средней кинетической энергии частицы более последовательным является использование кинетического уравнения для функции распределения импульса $f(\mathbf{p}, t)$, в котором интеграл столкновений определяется взаимодействием заряженной частицы с флуктуационным электромагнитным полем (*Климонтович*, 1968, формула (1.8)):

$$\frac{\partial f(\mathbf{p}, t)}{\partial t} = \frac{e^2}{2(2\pi)^3\hbar}\int \frac{[\mathbf{k}\mathbf{v}']^2}{\mathbf{k}^2}\,\delta(\hbar\mathbf{k} - (\mathbf{p} - \mathbf{p}')) \times$$
$$\times\,\delta\left(\hbar\omega - \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}'^2}{2m}\right)\right)[(\delta\mathbf{E}\delta\mathbf{E})_{\omega,\mathbf{k}}(f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t)) -$$
$$- 8\pi^2\omega\,|\omega|\,\delta(\omega^2 - c^2\mathbf{k}^2)(f(\mathbf{p}', t) + f(\mathbf{p}, t))]\,d\mathbf{p}'\,d\omega\,d\mathbf{k}. \quad (3.6.28)$$

Чтобы пояснить смысл приближения, в котором записано приведенное выражение для интеграла столкновений, обратимся к неравенствам (3.23). Роль параметра Δ играет здесь $\gamma_{\mathbf{k}}$, а параметра $\gamma - \gamma_{\omega}$. В (28) использовано бесстолкновительное приближение по $\gamma_{\mathbf{k}}$, т. е. выделена область прозрачности по полю — нулевое приближение по безразмерному параметру $\hbar\gamma_{\mathbf{k}}/kT$. Правое неравенство в (3.23) означает, что

$$\gamma_{\mathbf{k}} \gg \gamma_{\omega}. \tag{3.6.29}$$

На этом основании в интеграле столкновений (28) учтен лишь вклад мелкомасштабных (в смысле (29)) флуктуаций поля. Крупномасштабные — кинетические флуктуации с характерным временем корреляции $\tau_{\text{кор}} \sim \gamma_{\omega}^{-1}$ определяются самим кинетическим уравнением (28).

В равновесном состоянии интеграл столкновений равен нулю. Это имеет место, если спектральная плотность флуктуаций поля определяется формулой (15), но в «бесстолкновительном» приближении (18), а распределение по импульсам — распределение Максвелла

$$f(\mathbf{p}) = (2\pi mkT)^{-3/2} \exp(-\mathbf{p}^2/2mkT), \tag{3.6.30}$$

и, следовательно, имеет место равенство (26).

Существенно, что кинетическое уравнение (28) может быть заменено соответствующим уравнением Ланжевена, которое, однако, не совпадает с (23). Дело в том, что в интеграл столкновений входит спектральная плотность лишь на частотах и значениях волнового вектора, удовлетворяющего условиям временного $(\hbar\omega = \mathbf{p}^2/2m - \mathbf{p}'^2/2m)$ и пространственного $(\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p} - \mathbf{p}')$ резонансов. Это важное обстоятельство не учитывается в кажущемся очевидным уравнением Ланжевена (23). Именно по этой причине уравнение (23) и приводит к неправильным результатам (24) и (25). Мы еще вернемся к этому вопросу в п. 3.7.4 в связи с расчетом лэмбовского сдвига.

Заметим для сравнения, что в интеграле столкновений (4) спектральная плотность флуктуаций поля входит лишь на частотах, отвечающих временному резонансу $(\hbar\omega = E_n - E_m)$. Отсутствие пространственного резонанса связано с тем, что интеграл столкновений (4) отвечает приближению неподвижных атомов. С учетом движения атомов восстанавливается полная аналогия со структурой интеграла столкновений (28) (*Климонтович*, 1968, III, IV).

3.6.5. Квантовая формула Найквиста для плазменного электрического контура. Для системы двухуровневых атомов собственная частота является характеристикой отдельного атома. Рассмотрим пример, когда собственная частота «электрического колебательного контура» является коллективной характеристикой системы. В плазменном электрическом контуре роль собственной частоты может играть частота Ленгмюра для электронов плазмы.

Для полностью ионизованной плазмы в классическом приближении кинетические уравнения могут быть представлены в виде нелинейных уравнений Фоккера — Планка, в которых коэффициенты диффузии и трения зависят от функций распределения (уравнения Ландау, Балеску — Ленарда) (см. *Силин, Рухадзе*, 1961; *Балеску*, 1967; *Гуров*, 1966; *Силин*, 1971; *Лифшиц, Питаевский*, 1979; *Климонтович*, I—IV). В квантовой теории кинетические уравнения существенно усложняются и не сводятся к уравнениям Фоккера — Планка. Вследствие этого чрезвычайно сложны и соответствующие уравнения Ланжевена.

Поставим более скромную задачу выделения коллективных движений в рамках простейшей математической модели. Для этой цели используем модельное уравнение Фоккера — Планка, но с учетом квантовых эффектов. Коэффициент трения определим через среднюю частоту электрон-ионных столкновений ν, а коэффициент диффузии — формулой

$$D = \nu k T_{\text{эф}}. \tag{3.6.31}$$

Эффективная температура определяется выражением

$$kT_{\text{эф}} = \int \delta(\omega - kv)\,[(kv)^2/k^2]\,(\delta E \delta E)_{\omega,k}\, d\omega\, dk \times$$
$$\times \left(\int \delta(\omega - kv)\,(kv/k^2)\,\mathrm{Im}\,\varepsilon(\omega, k)\,|\,\varepsilon(\omega, k)\,|^{-2}\, d\omega\, dk\right)^{-1}. \tag{3.6.32}$$

Правую часть этого выражения можно представить как отношение диффузионного фактора, определяемого спектральной плотностью флуктуаций поля, и диссипативного фактора, пропорционального мнимой части диэлектрической проницаемости.

Если использовать для спектральной плотности флуктуаций поля и мнимой части диэлектрической проницаемости известные в теории плазмы выражения и при интегрировании по волновым числам выделить вклад от области прозрачности, то получим следующее выражение для эффективной температуры:

$$T_{\text{эф}} = (\hbar\omega_e/2)\,\mathrm{cth}\,(\hbar\omega_e/2kT) \equiv kT_{\omega_e}, \quad \omega_e^2 = 4\pi e^2 n/m. \tag{3.6.33}$$

Здесь введено обозначение для собственной частоты электронной плазмы. В классическом приближении эффективная температура $T_{эф} = T$. Таким образом, отличие эффективной температуры от T определяется квантовыми флуктуациями.

Для плазменного цилиндра длины l и поперечного сечения S индуктивность, емкость и электрическое сопротивление определяются формулами

$$L = ml/e^2nS, \quad C = 1/L\omega_e^2 = S/4\pi l, \quad R = L\nu. \quad (3.6.34)$$

Чтобы получить уравнения для плазменного электрического контура с этими параметрами и рассчитать спектральную плотность случайной ЭДС, надо провести расчет кинетических флуктуаций функции распределения, усредненной по объему образца. Она удовлетворяет соответствующему уравнению Ланжевена ($p = p_x$)

$$\frac{\partial f(\mathbf{p}, t)}{\partial t} + e\mathbf{E}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = mD\frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{p}^2} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}(\nu \mathbf{p} f) + y(\mathbf{p}, t). \quad (3.6.35)$$

Коэффициент диффузии определяется здесь формулой (31) с температурой (33). Моменты источника Ланжевена

$$\langle y(\mathbf{p}, t)\rangle = 0, \quad (3.6.36)$$

$$\langle y(\mathbf{p}, t)\, y(\mathbf{p}', t')\rangle = \frac{2}{N} mD \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{p}\, \partial \mathbf{p}'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') f(\mathbf{p}) \delta(t - t').$$

К уравнению (35) следует добавить уравнение поля

$$\partial \mathbf{E}/\partial t = -4\pi e n \int \mathbf{v} f\, d\mathbf{p} = -4\pi j(t). \quad (3.6.37)$$

Ток и заряд в электрическом контуре выражаются через функцию распределения и поле:

$$J(t) = enS \int v f\, dp, \quad q(t) = -(E/4\pi) S, \quad v = v_x, \quad (3.6.38)$$

а ЭДС — через источник Ланжевена:

$$\mathscr{E}(t) = LenS \int v y(p, t)\, dp. \quad (3.6.39)$$

Используя приведенные формулы, для спектральной плотности случайной ЭДС в уравнении для плазменного электрического контура получаем следующее выражение:

$$(\mathscr{E}^2)_\omega = 2RkT_{\omega_e}. \quad (3.6.40)$$

Этот результат соответствует квантовой формуле Найквиста в виде (1.21). Роль собственной частоты осциллятора играет здесь частота Ленгмюра для электронов плазмы.

В заключение отметим следующее.

Приведенный расчет сделан при условии, что распределение электронов по пространству является пространственно однородным. В этом случае источник Ланжевена $y(\mathbf{p}, t)$ не зависит от координаты и коррелятор источника пропорционален фактору $1/N$. Такая зависимость характерна для флуктуаций, относящихся ко всему образцу.

Пример более общего уравнения Фоккера — Планка с источником Ланжевена для функции распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ рассматривается в 4.6. Соответствующее выражение для интенсивности источника Ланжевена определяется формулой (4.6.5), которая характеризует вклады всех пространственных масштабов.

Теперь вернемся к вопросу о флуктуациях электромагнитного излучения, но уже в полости, заполненной средой.

3.6.6. Равновесное электромагнитное излучение в полости, заполненной средой. Формула Планка. В п. 3.6.3 был проведен расчет равновесного электромагнитного излучения в полости. Рассмотрим более общий случай. Предположим, что полость заполнена средой атомов-осцилляторов. Основные отличия выявим для простейшего случая, когда атомы можно считать неподвижными.

Наличие среды учтем дополнительным уравнением для вектора поляризации $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$. В равновесном состоянии среднее значение поляризации равно нулю, поэтому задача сводится к решению системы уравнений для флуктуаций векторов поляризации и поля. В силу линейности уравнений можно сразу записать уравнения для компонент Фурье по пространству, т. е. для функций $\delta\mathbf{P}(\mathbf{k}, t)$, $\delta\mathbf{E}(\mathbf{k}, t)$. Для среды, состоящей из классических атомов-осцилляторов, приходим к следующей системе уравнений:

$$\begin{aligned} &d^2\delta\mathbf{P}/dt^2 + \gamma\, d\delta\mathbf{P}/dt + \omega_0^2\delta\mathbf{P} = (e^2n/m)\,\delta\mathbf{E}, \\ &d^2\delta\mathbf{E}/dt^2 + \gamma_{\mathbf{k}}\, d\delta\mathbf{E}/dt + c^2\mathbf{k}^2\delta\mathbf{E} = -4\pi\, d^2\delta\mathbf{P}/dt^2. \end{aligned} \tag{3.6.41}$$

В нее входят два диссипативных параметра: коэффициент затухания поляризации γ и соответствующий коэффициент затухания поля $\gamma_{\mathbf{k}}$.

Проведем расчет флуктуаций для случая столь малой проводимости стенок, что выполняется неравенство

$$\gamma \gg \gamma_{\mathbf{k}}.$$

При этом условии атомы успевают подстраиваться под поле и можно использовать установившееся решение

уравнения для вектора поляризации. Это соответствует разложению по малому параметру γ_k/γ. В нулевом приближении задача сводится к решению одного уравнения для флуктуаций поля — уравнению для осциллятора поля

$$d^2\delta E/dt^2 + \tilde{\gamma}\, d\delta E/dt + \omega_k^2 \delta E = 0, \qquad (3.6.42)$$

для которого эффективная частота и эффективный коэффициент трения зависят от диэлектрических свойств среды. Они определяются формулами

$$\tilde{\gamma} = \frac{\gamma_k + \operatorname{Im} \varepsilon(\omega_k)\,\omega_k}{\operatorname{Re} \varepsilon(\omega_k)}, \quad \omega_k^2 = \frac{c^2 k^2}{\operatorname{Re} \varepsilon(\omega_k)}. \qquad (3.6.43)$$

Здесь $\varepsilon(\omega_k)$ — диэлектрическая проницаемость среды.

Дальнейший расчет проводим, как и при выводе формулы (15) для пространственно-временной спектральной плотности флуктуаций поля. При использовании формулы для средней энергии квантового осциллятора надо иметь в виду, что теперь частота $\omega_k = ck(\operatorname{Re} \varepsilon(\omega_k))^{-1/2}$. В результате приходим к выражению

$$(8\pi)^{-1}(\delta E \delta E)_{\omega,k} = 2\tilde{\gamma}\left[\tilde{\gamma}^2 + \left(\omega - \omega_k^2/(\omega)^2\right]^{-1} kT_{\omega_k}. \qquad (3.6.44)$$

Оно отличается от (15) заменой $\gamma_k \to \tilde{\gamma}$ и $ck \to \omega_k$. Этот результат можно получить и путем решения соответствующего уравнения Ланжевена. Спектральная плотность источника Ланжевена определяется формулой

$$(yy)_{\omega,k} = 2\tilde{\gamma} \cdot 2kT_{\omega_k}/\operatorname{Re} \varepsilon(\omega_k). \qquad (3.6.45)$$

Фактор $(\operatorname{Re} \varepsilon)^{1/2}$ соответствует массе осциллятора.

Пространственную спектральную плотность флуктуаций поля находим путем интегрирования выражения (44) по частоте:

$$4\pi^{-1}(\delta E \delta E)_k = 2kT_{\omega_k}/\operatorname{Re} \varepsilon(\omega_k). \qquad (3.6.46)$$

При сравнении с соответствующим выражением для механического осциллятора надо иметь в виду, что величина δE играет роль скорости.

Временная спектральная плотность может быть найдена в явном виде из общего выражения (44) лишь в резонансном приближении (для области прозрачности), когда эффективный коэффициент трения для осциллятора поля $\tilde{\gamma} \to 0$. В этом случае приходим к формуле

$$(4\pi^2)^{-1}(\delta E \delta E)_\omega \equiv \rho_\omega = (\omega^2 n/\pi^2 c^3)\, kT_\omega, \qquad (3.6.47)$$

совпадающей с (77.10) книги (*Лифшиц, Питаевский*, 1978). Здесь введено обозначение для показателя преломления среды $n = (\mathrm{Re}\,\varepsilon)^{1/2}$. Заметим, что в рассматриваемом приближении (нулевое приближение по параметру γ_k/γ, когда в (43) входит диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(\omega_k)$ на собственной частоте ω_k) показатель преломления n не зависит от текущей частоты. В этом приближении выражение (47) совпадает с энергией флуктуационного электромагнитного поля на частоте ω, т. е. с формулой Планка в прозрачной среде (*Лифшиц, Питаевский*, 1978, (77.13)).

Итак, формула Планка для распределения энергии электромагнитного равновесного излучения в среде получена при двух предположениях.

1. Нулевое приближение по параметру γ_k/γ (при этом условии эффективные параметры электромагнитного осциллятора (43) определяются диэлектрической проницаемостью на собственной частоте ω_k).

2. Приближение бесконечно узкого резонанса (при этом условии линия Лоренца (44) заменяется функцией $\delta(\omega - \omega_k)$).

3.7. Система квантовых атомов-осцилляторов

3.7.1. Линейное трение. Коэффициент диффузии и интенсивность шума. Вернемся к кинетическому уравнению (6.3) с интегралом столкновений (6.4), который характеризует систему атомов в поле. Конкретизируем интеграл столкновений для модели квантовых атомов-осцилляторов с собственной частотой ω_0. Предположим, что колебания происходят вдоль вектора дипольного момента. Тогда (6.4) приводится к виду

$$I_n = \gamma_{\omega_0}\{\mathrm{cth}(\hbar\omega_0/2kT)\times \\ \times[(n+1)(f_{n+1}-f_n)/2+(n/2)(f_{n-1}-f_n)]- \\ -[-(n+1)(f_{n+1}+f_n)/2+(n/2)(f_{n-1}+f_n)]\}. \quad (3.7.1)$$

Здесь введено обозначение для коэффициента радиационного трения атомов-осцилляторов $\gamma_{\omega_0} = 2e^2\omega_0^2/3mc^3$ (ср. с (6.21)).

Используя уравнение (6.3) с интегралом (1), запишем уравнение для средней энергии:

$$\langle E\rangle = \sum_n (n+1/2)\,\hbar\omega_0 f_n. \quad (3.7.2)$$

Удобны две формы записи уравнения для $\langle E\rangle$:

$$d\langle E\rangle/dt = \gamma_{\omega_0}(kT_{\omega_0} - \langle E\rangle) \equiv D - \gamma_{\omega_0}\langle E\rangle. \quad (3.7.3)$$

Во второй форме использовано определение *коэффициента диффузии*

$$D = \gamma_{\omega_0} k T_{\omega_0}. \tag{3.7.4}$$

Вторую форму записи можно рассматривать как квантовое обобщение формулы Эйнштейна в классическом уравнении Фоккера — Планка.

Заменим кинетическое уравнение (6.3) для функции f_n эффективным уравнением Фоккера — Планка (с условием, что уравнение (3) остáется неизменным) для функции распределения энергии $f(E, t)$:

$$\frac{\partial f(E, t)}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial E}\left(E \frac{\partial f}{\partial E}\right) + \frac{\partial}{\partial E}(\gamma E f), \quad \int_0^\infty f\, dE = 1. \tag{3.7.5}$$

При этом выражение для коэффициента диффузии сохраняет вид (4).

Равновесным решением уравнения (5) является распределение Больцмана, но с «квантовой» температурой T_{ω_0}:

$$f(E) = (kT_{\omega_0})^{-1} \exp(-E/kT_{\omega_0}), \qquad \langle E \rangle = kT_{\omega_0}. \tag{3.7.6}$$

Итак, мы рассмотрели примеры кинетических уравнений (6.3), (1), (5) для атомов, взаимодействующих через флуктуационное электромагнитное поле. При этом не было ограничений на размеры объема, занимаемого системой атомов.

Теперь рассмотрим образец конечного размера. Его объем $V = lS$ (l, S — длина и сечение образца). Предполагаем концентрацию атомов в образце настолько малой, что определяющим является взаимодействие атомов через поле.

Чтобы описать в образце флуктуации, усредненные по объему, используем кинетическое уравнение для распределения тока и заряда. С его помощью переходим к уравнению (1.5) для эквивалентного электрического контура с параметрами (ср. с (6.34))

$$L = ml/e^2 nS, \quad C = 1/L\omega_0^2, \quad R = L\gamma. \tag{3.7.7}$$

При этом в (1.5) $J(t)$ — поляризационный ток, $q(t)$ — связанный заряд. Спектральная плотность случайной ЭДС (источника Ланжевена) определяется выражением

$$(\mathscr{E}^2)_\omega = 2RkT_{\omega_0}. \tag{3.7.8}$$

Таким образом, и для этого примера мы приходим к квантовой формуле Найквиста (1.21), а не (1.18)!

Формулы (7), (8) отличаются от соответствующих формул (6.34), (6.40) лишь заменой собственной частоты электронов плазмы ω_e на собственную частоту квантовых атомов-осцилляторов ω_0 и ν на γ.

3.7.2. Коэффициент диффузии для системы атомов-осцилляторов с нелинейным трением. Расчет флуктуаций в нелинейных системах необходим для многих практических приложений (*Бункин*, 1961; *Стратонович*, 1961, 1985; *Рытов*, 1976; *Малахов*, 1968; *Лэкс*, 1974; *Бочков*, *Ефремов*, 1980 и многие другие работы). Наиболее детальное исследование этой проблемы дано (*Стратонович*, 1985).

В общем случае расчет флуктуаций в нелинейных системах может быть сведен к уравнениям типа Фоккера — Планка, но с высшими производными. При этом, однако, не удается определить все коэффициенты при высших производных через диссипативные характеристики динамических уравнений (остаются, в частности, неопределенные константы).

При квадратичной нелинейности, т. е. в случае, очень существенном для приложений (см. гл. 5), выбором этих констант уравнение может быть сведено к обычному уравнению Фоккера — Планка. Проиллюстрируем это на примере электрического контура с нелинейным сопротивлением.

Вместо (1.5) используем уравнения Ланжевена вида

$$\frac{dq}{dt} = J, \quad L\frac{dJ}{dt} + R(J)J + C^{-1}q - \frac{1}{2}\frac{dD(J)}{dJ} = \mathscr{E}(J, t). \tag{3.7.9}$$

Здесь $R(J)$ — четная функция тока:

$$R(J) = R + R_1 LJ^2/kT, \tag{3.7.10}$$

R_1 — нелинейное сопротивление в единицах LJ^2/kT. Случайная ЭДС, отражающая действие на контур хаотически движущихся зарядов, теперь зависит не только от времени, но и от силы тока. Ее можно представить в виде (см. 4.2) $\mathscr{E} = D^{1/2}y(t)$, где $D(J)$ — неизвестная пока интенсивность шума — коэффициент диффузии в уравнении Фоккера — Планка, $y(t)$ — гауссовский случайный источник, определяемый двумя первыми моментами:

$$\langle y(t)\rangle = 0, \quad \langle y(t)y(t')\rangle = 2\delta(t - t'). \tag{3.7.11}$$

Дополнительный член $-(1/2)\,dD/dJ$ в левой части второго уравнения (9) введен с целью придания соответствующему уравнению Фоккера — Планка для функции распределения $f(q, J, t)$ канонического вида (см. гл. 4)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + J\frac{\partial f}{\partial q} - \omega_0^2 q\frac{\partial f}{\partial J} = \\ = \frac{1}{L^2}\frac{\partial}{\partial J}\left(D(J)\frac{\partial f}{\partial J}\right) + \frac{\partial}{\partial J}\left(\frac{R(J)}{L}Jf\right). \quad (3.7.12)$$

По аналогии с (5) рассмотрим уравнение (12) как модельное для описания системы квантовых атомов-осцилляторов. В равновесном состоянии распределение не зависит от диссипативных характеристик и в квантовой теории может быть представлено в виде распределения Гаусса (*Климонтович*, 1956; *Татарский*, 1983)

$$f(q, J) = C\exp\left(-\frac{LJ^2/2 + q^2/2C}{kT_{\omega_0}}\right), \quad \int f\,dq\,dJ = 1, \quad (3.7.13)$$

с квантовой температурой kT_{ω_0}. В системе квантовых атомов-осцилляторов в равновесном состоянии с нелинейным трением подстановка (13) в (12) приводит к следующему выражению для коэффициента диффузии:

$$D(J) = R(J)(\hbar\omega_0/2)\,\mathrm{cth}\,(\hbar\omega_0/2kT) \equiv R(J)\,kT_{\omega_0}. \quad (3.7.14)$$

По сравнению с формулой Эйнштейна здесь учтены как квантовые эффекты (ср. с (4)), так и нелинейность трения (сопротивления).

3.7.3. Зависимость ширины спектральной линии квантовых генераторов от энергии. Гл. 5 посвящена детальному исследованию флуктуационных процессов в генераторах различных типов. Однако уместно уже теперь, в связи с обсуждением ФДС для квантовых систем, рассмотреть некоторые вопросы теории флуктуаций в генераторах.

Как в классических, так и в квантовых генераторах играют роль два источника естественных флуктуаций. В классических генераторах это тепловые шумы и, например, дробовой шум анодного тока. В квантовых генераторах «дробовой шум» обусловлен атомарной структурой рабочей среды генератора. Он может быть учтен путем введения в уравнения поля соответствующего случайного источника. Здесь рассматривается лишь влияние теплового шума.

Спектральная линия излучения генератора характеризуется по меньшей мере двумя параметрами: шириной

спектра флуктуаций амплитуды и коэффициентом диффузии фазы (*Стратонович*, 1961; *Рытов*, 1976; *Малахов*, 1968; *Климонтович*, III, IV; *Ланда*, 1980). Чтобы наиболее просто выявить влияние нелинейности и квантовых эффектов на ширину линии генератора, используем приближение эффективной линии Лоренца (*Климонтович*, III, гл. 4; IV, гл. 12). В этом приближении для расчета ширины линии надо знать распределение энергии колебаний $f(E, t)$.

Для функции распределения $f(E, t)$ используем уравнение Фоккера — Планка (ср. с (5))

$$\frac{\partial f(E, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial E}\left(D(E)\, E \frac{\partial f}{\partial E}\right) + \frac{\partial}{\partial E}\left[(a + bE)\, Ef\right]. \quad (3.7.15)$$

Поясним структуру отдельных членов этого уравнения.

Линейный коэффициент в выражении для трения имеет вид

$$a = \gamma - a_{\text{н}}. \quad (3.7.16)$$

Здесь γ — коэффициент линейного трения, $a_{\text{н}}$ — коэффициент обратной связи (или накачки), b — коэффициент нелинейного трения. Коэффициент диффузии $D(E)$ определится из условия, что в отсутствие накачки, когда $a_{\text{н}} = 0$, функция распределения имеет вид (6). Из этого условия находим, что

$$D(E) = (\gamma + bE)\, kT_{\omega_0}. \quad (3.7.17)$$

Это выражение определяет коэффициент диффузии как с учетом нелинейного трения, так и с учетом квантовых эффектов (ср. с (14)).

При наличии обратной связи стационарное решение уравнения (15) определяется выражением

$$f(E) = C \exp\left[-(kT_{\omega_0})^{-1} \int_0^E \frac{a + bE'}{\gamma + bE'}\, dE'\right], \quad (3.7.18)$$

которое при $a_{\text{н}} = 0$ совпадает с равновесным распределением (6). С помощью (18) можно найти, в частности, значение средней энергии

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty Ef(E)\, dE \quad (3.7.19)$$

в режиме генерации.

Для определения ширины спектральной линии надо найти распределение средней энергии по спектру (*Кли-*

монтович, III, гл. 4; IV, гл. 12), которое определяется выражением

$$E(\omega) = \frac{2\Delta\omega}{\omega^2 + (\Delta\omega)^2}\langle E\rangle, \qquad \Delta\omega = \frac{D(1 + (b/\gamma)\langle E\rangle)}{2\langle E\rangle}. \qquad (3.7.20)$$

Здесь введено обозначение

$$D = \gamma_{\omega_0} kT_{\omega_0} \qquad (3.7.21)$$

для квантового коэффициента диффузии линейной системы. По виду оно совпадает с (4). Величина $\Delta\omega$ определяет полуширину спектра. В равновесном состоянии средняя энергия $\langle E\rangle = kT_{\omega_0}$ и

$$\Delta\omega = (\gamma + bkT_{\omega_0})/2. \qquad (3.7.22)$$

Напротив, в режиме развитой генерации (для «хорошего» генератора — при достаточно малой нелинейности, когда выполняется условие $b\langle E\rangle \ll \gamma$) выражение для $\Delta\omega$ принимает вид

$$\Delta\omega = D/2\langle E\rangle = \gamma kT_{\omega_0}/2\langle E\rangle. \qquad (3.7.23)$$

Мы видим, что ширина линии убывает с ростом энергии генерации $\langle E\rangle$.

В квантовом пределе ($\hbar\omega_0 \gg kT$) из (23) вытекает известная формула Шавлова — Таунса для ширины линии спектра (*Шавлов*, *Таунс*, 1958). В режиме развитой генерации она числовым множителем 1/2 отличается от формул Хакена и Лэкса (*Хакен*, 1966; *Лэкс*, 1968; *Климонтович*, III).

Из общей формулы (20) для $\Delta\omega$ следует, что при достаточно больших значениях средней энергии $\langle E\rangle$, когда $b\langle E\rangle \gg \gamma$, происходит насыщение и величина $\Delta\omega$ стремится к предельному значению

$$\Delta\omega = bkT_{\omega_0}/2. \qquad (3.7.24)$$

Итак, мы рассмотрели много конкретных примеров ФДС. При этом для линейных квантовых колебательных систем спектральная плотность эффективной ЭДС определяется формулой вида (1.21), а не (1.18). Покажем теперь, что в пользу (1.21) «свидетельствует» также и экспериментально наблюдаемый лэмбовский сдвиг энергии атомов водорода.

3.7.4. Лэмбовский сдвиг и квантовая формула Найквиста. Более сорока лет назад экспериментально был обнаружен сдвиг уровней атома водорода (*Лэмб*, *Резер-*

форд, 1947) по сравнению с результатами расчета по квантовой механике для изолированного атома. В том же году (*Бете*, 1947) было показано, что основной причиной сдвига является действие на электрон в атоме вакуумного (температура $T=0$) флуктуационного электромагнитного поля.

Расчет Бете основан на «вычитательном формализме» квантовой электродинамики. Был также предложен (*Вельтон*, 1948) другой способ расчета сдвига уровней. На первый взгляд он представляется менее формальным и используется в учебных руководствах (*Мигдал*, 1975; *Соколов*, *Тернов*, *Жуковский*, 1979).

Покажем, что отмеченные два способа расчета сдвига уровней за счет действия вакуумного флуктуационного электромагнитного поля основаны, фактически, на двух разных обобщениях классической формулы Найквиста (1.6): «вычитательный формализм» квантовой электродинамики — на формуле (1.21), а способ Вельтона — на формуле Найквиста (1.18).

Оба способа приводят к одному и тому же результату — формуле Бете. В чем же дело? Ведь формулы (1.18), (1.21) в общем случае принципиально различны. Мы увидим, что способ расчета Вельтона не является последовательным и не приводит, в действительности, к формуле Бете. Напротив, использование (1.21) для частот переходов ω_{nm} приводит к формуле Бете. Тем самым «вычитательный формализм» квантовой электродинамики в неявном виде служит подтверждением правильности квантового обобщения формулы Найквиста (1.6) в виде (1.21), а лэмбовский сдвиг является экспериментальным ее подтверждением.

Способ расчета Вельтона основан на использовании уравнения Ланжевена (6.23) для расчета флуктуаций движения электрона в основном состоянии атома водорода. При этом совпадение результатов расчета оказалось случайным, поскольку при определении сдвига энергии учтено лишь изменение потенциальной энергии. Учет же флуктуаций скорости, определяющих изменение кинетической энергии электрона за счет действия вакуумного поля, существенно меняет всю картину.

Действительно, обратимся к формуле (6.25), которая определяет среднюю кинетическую энергию заряженной частицы при действии флуктуаций поля. При $T=0$ интеграл определяется нулевыми (вакуумными) флуктуациями и расходится, поэтому область интегрирования ог-

раничивается условием $\omega < \omega_{max} = mc^2/\hbar$. Здесь ω_{max} — частота Комптона. Учитывая, что $\gamma_{\omega_{max}} \ll \omega_{max}$, приходим к следующему результату:

$$(1/3)\, m \langle v^2 \rangle = (2\pi)^{-1} \hbar \gamma_{\omega_{max}} \sim \alpha^{-1} |E_0| \gg |E_0|. \quad (3.7.25)$$

Здесь $\alpha = e^2/\hbar c$ — постоянная тонкой структуры, $|E_0|$ — энергия основного состояния атома водорода.

Результат (25) неудовлетворителен в двух отношениях. Во-первых, оказывается, что при $T = 0$ средняя кинетическая энергии, определяемая равновесными флуктуациями, не равна нулю (ср. с (6.26)) и, более того, определяется диссипативным фактором $\gamma_{\omega_{max}}$. Во-вторых, если даже предположить, что зависимость от диссипативного фактора допустима (это имеет место при использовании квантовой формулы Найквиста (1.18) (или (6.21)), то полученный огромный отрыв температуры частицы $(1/3)\, m\langle v^2 \rangle$ от температуры поля ($T = 0$) находится в явном противоречии с экспериментом.

Итак, способ расчета Вельтона, основанный на уравнении Ланжевена для электрона в вакуумном поле и квантовой формуле Найквиста (6.21) (или (1.18)), в действительности не приводит к формуле Бете.

Расчет уширения и сдвига спектральных линий и уровней энергии может быть проведен на основе кинетической теории (*Вайнштейн, Собельман, Юков*, 1979; *Климонтович*, III, IV). Для этого, наряду с уравнением (6.3) для функции f_n, надо использовать и соответствующее уравнение для недиагональной матрицы плотности f_{nm}. Для расчета сдвига уровня энергии воспользуемся выражением (*Климонтович*, III, (9.2.8))

$$\Delta E_n = (3\hbar)^{-1} \sum_{n_1} |d_{nn_1}|^2 (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} (\delta E \delta E)_\omega (\omega - \omega_{n_1 n})^{-1} d\omega. \quad (3.7.26)$$

Здесь учтен лишь индуцированный вклад флуктуаций поля. Ниже мы примем во внимание и спонтанные переходы.

Теперь вопрос состоит в том, какое выражение для спектральной плотности флуктуаций поля надо подставить в (26). Ответ кажется естественным: сюда, как и в уравнение Ланжевена (6.23), надо подставить выражение (6.6). Мы убедились, что такая подстановка соответствует использованию квантовой формулы Найквиста (1.18).

Это, как мы видели в п. 3.6.4 и при расчете сдвига уровня по способу Вельтона, ведет к нефизичным результатам, т. е. результатам, противоречащим экспериментальным данным.

В п. 3.6.4 было показано, что правильный результат (равенство (6.26)) может быть получен при использовании кинетического уравнения (6.28) для функции распределения $f(\mathbf{p}, t)$. Обратимся и здесь к соответствующему кинетическому уравнению (6.3) с интегралом (6.4).

Из выражения (6.4) следует, что взаимодействие атомов с полем, приводящее к равновесному распределению по уровням — распределению Больцмана (6.7), определяется функцией (6.6) на частотах переходов, т. е. при $\omega = \omega_{nm}$. Таким образом, в (26) надо подставить функцию (6.6) при $\omega = \omega_{n_1 n}$. Учет спонтанных переходов при $T = 0$ приводит к замене (*Климонтович*, III, (9.4.7))

$$(\delta E \delta E)_{\omega_{n_1 n}} \to (\delta E \delta E)_{\omega_{n_1 n}} + 2\hbar\omega^3_{n_1 n}/c^3. \qquad (3.7.27)$$

В результате подстановки этого выражения в (26) и интегрирования по ω по области $\omega < \omega_{\max} = mc^2/\hbar$ приходим к формуле Бете:

$$\Delta E_n = (2/3\pi c^3) \sum_{n_1} |d_{n_1 n}|^2 \omega^3_{n_1 n} \ln(\omega_{\max}/\omega_{n_1 n}) \approx$$
$$\approx (4e^4/3m^2c^3)\hbar |\psi(0)|^2 \ln(\omega_{\max}/\langle\omega_{n_1 n}\rangle). \qquad (3.7.28)$$

При суммировании по n_1 под знаком логарифма произведена замена $\omega_{n_1 n} \to \langle\omega_{n_1 n}\rangle$. Поскольку $\langle\omega_{n_1 n}\rangle \sim E_n/\hbar$ и величина $|\psi(0)|^2$ отлична от нуля лишь для S-состояния, то формулу Бете можно представить в виде (*Соколов*, *Тернов*, *Жуковский*, 1979)

$$\Delta E_n = (8/3\pi)|E_0|(\alpha^3/n^3)\ln(2n^2/\alpha^2). \qquad (3.7.29)$$

Здесь n — главное квантовое число.

Учет других факторов, например поляризации электрон-позитронного вакуума, приводит к уточнению формулы Бете и лучшему согласию с экспериментальными данными (*Берестецкий*, *Лифшиц*, *Питаевский*, 1980).

На этом мы завершаем обсуждение, посвященное ФДС на кинетическом уровне описания флуктуационных процессов, и приступаем к рассмотрению ФДС в гидродинамике.

3.8. Флуктуационно-диссипационные соотношения в гидродинамике

3.8.1. Два способа описания гидродинамических флуктуаций. Напомним некоторые результаты 2.6.

Уравнения гидродинамики — суть замкнутые уравнения для первых моментов ρ, $\mathbf{u}$, T соответствующих сглаженных по физически бесконечно малому объему (см. (2.6.11)) гидродинамических функций $\tilde{\rho}$, $\tilde{\mathbf{u}}$, $\tilde{T}$ (см. (2.6.9)). Пренебрежение крупномасштабными — гидродинамическими флуктуациями оправдано для описания ламинарных течений жидкости. Крупномасштабные флуктуации были разделены на два класса: молекулярные и турбулентные. Молекулярные крупномасштабные флуктуации определяют броуновское движение частиц в жидкости, рассеяние света и многие другие явления.

При приближении к критическим точкам, в которых ламинарные течения теряют устойчивость, например в точке перехода от ламинарного течения Пуазейля к турбулентному, интенсивность молекулярных флуктуаций нарастает по закону Кюри для неравновесных фазовых переходов $((\mathrm{Re})_{\text{кр}} - \mathrm{Re})^{-1}$ (Re — число Рейнольдса). Напомним, что при равновесных фазовых переходах интенсивность флуктуаций параметра порядка при приближении к критической температуре $T_{\text{кр}}$ возрастает по закону Кюри — пропорциональна $1/(T - T_{\text{кр}})$ (*Ландау*, *Лифшиц*, 1976; *Паташинский*, *Покровский*, 1982; *Климонтович*, IV). Рост молекулярных флуктуаций служит предвестником гидродинамической неустойчивости — началом перестройки течения, которая может, в частности, привести к турбулентности.

Описание гидродинамических флуктуаций может быть осуществлено с помощью уравнения Леонтовича. С его помощью строим цепочку диссипативных уравнений для последовательности функций распределения f_1, f_2, ... или соответствующую систему уравнений для моментов.

Переход от уравнений для функций распределения к цепочке уравнений для моментов гидродинамических функций производится путем разложения по параметру Кнудсена (2.6.10). Такой метод в разных вариантах использовался в работах (*Жигулев*, 1971; *Ганцевич*, *Гуревич*, *Катилюс*, 1969, 1970, 1979; *Климонтович*, II—IV; *Лифшиц*, *Питаевский*, 1979; *Кирпатрик*, *Коэн*, *Дорфман*, 1982; *Гречанный*, 1988), что приводило к обобщенным

уравнениям для моментов с учетом гидродинамических флуктуаций.

В качестве исходного вместо уравнения Леонтовича можно использовать уравнение Больцмана (1.5.18) для сглаженной функции распределения $\tilde{f}(x, t)$. Разложение по параметру Кнудсена приводит при этом к уравнениям гидродинамики для сглаженных гидродинамических функций. Здесь, в свою очередь, возможны два способа расчета флуктуаций.

Во-первых, можно путем усреднения уравнений для ρ, $\tilde{\mathbf{u}}$, $\tilde{T}$ снова перейти к уравнениям для моментов. Начиная с работ Рейнольдса, такой подход используется в теории турбулентности. Во-вторых, для расчета гидродинамических флуктуаций можно использовать метод Ланжевена. Естественно, что метод Ланжевена может быть использован и в кинетической теории (см. гл. 4).

Для равновесного состояния источники Ланжевена в уравнения гидродинамики впервые введены в работе (*Ландау*, *Лифшиц*, 1957), а в уравнение Больцмана — в работе (*Кадомцев*, 1957).

3.8.2. Источники Ланжевена в уравнениях гидродинамики. ФДС. При ламинарных движениях, когда справедливо приближение локального равновесия (п. 2.6.2), статистические характеристики источников Ланжевена могут быть определены в рамках термодинамики неравновесных процессов (*Ландау*, *Лифшиц*, 1957; *Стратонович*, 1985).

Источники Ланжевена вводятся в уравнения гидродинамики двумя путями: через дополнительные члены в тензор вязких напряжений и вектор теплового потока и как дополнительные случайные «силы».

В первом случае уравнения (2.6.2) — (2.6.4) сохраняют свой вид, но используются теперь для случайных функций

$$\tilde{\rho},\ \tilde{\mathbf{u}},\ \tilde{T},\ \tilde{\mathbf{F}},\ \tilde{\pi}_{ij},\ \tilde{S}_i. \tag{3.8.1}$$

Выражения для функций $\tilde{\pi}_{ij}$, $\tilde{S}_i$ отличаются от (2.6.7) дополнительными случайными источниками $\delta\pi_{ij}$, δS_i:

$$\tilde{\pi}_{ij} = -\eta\left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial r_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial r_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial\tilde{u}_k}{\partial r_k}\right) - \xi\delta_{ij}\operatorname{div}\tilde{\mathbf{u}} + \delta\pi_{ij}, \tag{3.8.2}$$

$$\tilde{S}_i = -\lambda\,\partial\tilde{T}/\partial r_i + \delta S_i. \tag{3.8.3}$$

Средние значения источников Ланжевена равны нулю:

$$\langle \delta\pi_{ij} \rangle = 0, \quad \langle \delta S_i \rangle = 0; \tag{3.8.4}$$

вторые двухмерные и двухточечные корреляторы определяются выражениями (*Ландау*, *Лифшиц*, 1957)

$$\langle \delta\pi_{ij}\delta\pi_{kl} \rangle_{\mathbf{r},t,\mathbf{r}',t'} =$$
$$= 2\left[\eta(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + (\xi - 2/3\eta)\,\delta_{ij}\delta_{kl}\right] kT\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\,\delta(t - t'), \tag{3.8.5}$$

$$\langle \delta S_i \delta S_j \rangle_{\mathbf{r},t,\mathbf{r}',t'} = 2\lambda kT^2 \delta_{ij}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\,\delta(t - t'). \tag{3.8.6}$$

Ниже рассматриваются простые жидкости, для которых коэффициент второй вязкости $\xi = 0$.

Вместо дополнительных случайных источников $\delta\pi_{ij}$, δS_i удобно использовать и соответствующие «силы» Ланжевена

$$f_i^{(\eta)} = -\,\partial\delta\pi_{ij}/\partial r_j, \quad f^{(\lambda)} = -\,\partial\delta S/\partial r, \tag{3.8.7}$$

определяемые соответственно флуктуациями тензора вязких напряжений (индекс η) и вектора теплового потока (индекс λ). Корреляторы этих сил представим в виде

$$\langle f^{(\eta)} f^{(\eta)} \rangle_{\mathbf{r},t,\mathbf{r}',t'} = 2A^{(\eta)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)\,\delta(t - t'), \tag{3.8.8}$$

$$\langle f^{(\lambda)} f^{(\lambda)} \rangle_{\mathbf{r},t,\mathbf{r}',t'} = 2A^{(\lambda)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)\,\delta(t - t'). \tag{3.8.9}$$

Выражения для интенсивностей случайных источников $A^{(\eta)}$, $A^{(\lambda)}$ находим с помощью формул (2), (3):

$$A^{(\eta)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \frac{10}{3}\,\eta\,\frac{\partial^2}{\partial\mathbf{r}\,\partial\mathbf{r}'}\left(\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\,kT(\mathbf{r}, t)\right), \tag{3.8.10}$$

$$A^{(\lambda)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \lambda\,\frac{\partial^2}{\partial\mathbf{r}\,\partial\mathbf{r}'}\left(\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\,kT^2(\mathbf{r}, t)\right). \tag{3.8.11}$$

Формулы (5), (6), (8), (9) являются примерами ФДС в гидродинамике. Их можно, разумеется, представить в спектральном виде. Так, например, из (5) следует, что пространственно-временная спектральная плотность флуктуаций тензора вязких напряжений

$$(\delta\pi_{ij}\delta\pi_{kl})_{\omega,\mathbf{k}} = 2\eta kT(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk} - 2\delta_{ij}\delta_{kl}/3). \tag{3.8.12}$$

Поскольку правая часть не зависит от ω и $\mathbf{k}$, то мы имеем здесь пример пространственно-временного белого шума.

Из формул (8)—(11) вытекает, что спектральные плотности «сил» зависят от $\mathbf{k}$. Возникающая здесь зависимость характерна для диффузионных процессов. Этим

обусловлен выбор обозначений для интенсивностей шума в этих формулах.

Напомним, что в кинетической теории при учете флуктуаций функций распределения (см. 1.6) возникает двойная «надстройка» над уровнем описания на основе уравнения Больцмана.

Первый «этаж» надстройки возникает при учете молекулярной структуры среды. Он сохраняется и в равновесном состоянии. Соответствующие источники Ланжевена были названы молекулярными.

Второй «этаж» надстройки определяется крупномасштабными неравновесными флуктуациями, которые играют существенную роль лишь для состояний, далеких от равновесия. Важным примером служат турбулентные флуктуации (пульсации), поэтому соответствующие источники были названы турбулентными.

Аналогичная ситуация имеет место и в теории гидродинамических флуктуаций. Приведенные выражения (4)—(12) характеризуют *молекулярные источники гидродинамических флуктуаций*. Они отличны от нуля и в состоянии равновесия. Ими определяются такие фундаментальные явления, как броуновское движение частиц в среде, рассеяние света при состояниях среды, близких к равновесному.

Вдали от равновесия, когда уровень крупномасштабных — гидродинамических флуктуаций становится значительным, возникают дополнительные вклады в интенсивности источников, которые мы также будем называть турбулентными. Соответствующие выражения приводятся в гл. 4.

3.9. Два способа определения кинетических коэффициентов

В гидродинамике кинетические коэффициенты — вязкость η и теплопроводность λ (здесь рассматривается случай $\xi = 0$) определяются соотношениями (2.6.7), которые связывают тензор вязких напряжений и вектор теплового потока с производными скорости гидродинамического течения и температуры (законы Ньютона (для силы вязкого трения) и Фурье (для теплового потока)). Такое определение кинетических коэффициентов η, λ можно назвать гидродинамическим.

Наряду с ним широко используется другое определение кинетических коэффициентов η, λ, которое можно

назвать **флуктуационным**. Оно основывается на ФДС (8.12). Для этой цели можно использовать и выражения (8.5), (8.6) для пространственно-временных корреляторов или, наконец, смешанные выражения. Так, например, с помощью формул (8.5), (8.6) находим (свернутые по диагональным элементам) выражения для пространственных спектров и временных корреляций:

$$(\delta\tilde{\pi}_{ij})^2_{\mathbf{k},\tau} = 20\eta kT\delta(\tau), \qquad (\delta\tilde{S}_i)^2_{\mathbf{k},\tau} = 6\lambda kT^2\delta(\tau). \quad (3.9.1)$$

Обратим эти соотношения, т. е. выразим кинетические коэффициенты η, λ через флуктуационные характеристики. Для этого проведем интегрирование по τ $(\tau = t - t')$ и используем значение интеграла $\int\limits_0^\infty \delta(\tau)\,d\tau = 1/2$. В результате получаем выражения

$$\eta = (10kT)^{-1}\int\limits_0^\infty (\delta\tilde{\pi}_{ij})^2_{\mathbf{k},\tau}\,d\tau; \quad \lambda = (3kT^2)^{-1}\int\limits_0^\infty (\delta\tilde{S}_i)^2_{\mathbf{k},\tau}\,d\tau, \quad (3.9.2)$$

которые представляют собой примеры более общих соотношений Кубо — Грина (*Зубарев*, 1971; *Лифшиц*, *Питаевский*, 1978; *Климонтович*, IV).

Таким образом, кинетические коэффициенты выражаются через характеристики источников Ланжевена в уравнениях гидродинамики. Поскольку в (2) правая часть не зависит от $\mathbf{k}$ (пространственный белый шум), то можно положить $\mathbf{k} = 0$. При условии $\mathbf{k} = 0$ в формулах (2) вместо $\delta\tilde{\pi}_{ij}$, $\delta\tilde{S}_i$ можно использовать выражения (8.2), (8.3). Тогда, например, выражение (2) для вязкости можно записать в виде

$$\eta = (10kT)^{-1}\int\limits_0^\infty (\tilde{\pi}_{ij})^2_{\mathbf{k}=0,\tau}\,d\tau. \quad (3.9.3)$$

Эта формула была предложена Мори.

Для состояния локального равновесия оба определения кинетических коэффициентов — гидродинамическое и флуктуационное — эквивалентны. Для состояний, далеких от равновесия, оба определения могут существенно отличаться. Таким образом, можно говорить о двух разных вязкостях.

При гидродинамическом определении отличие новой вязкости для неравновесных состояний от обычной свя-

зано с влиянием крупномасштабных — турбулентных флуктуаций (пульсаций). Соответствующую вязкость назовем турбулентной. Выражение для нее рассматривается в гл. 6, посвященной теории турбулентности.

При флуктуационном определении вязкости отличие связано с влиянием на вязкость усредненного гидродинамического движения. Назовем соответствующую вязкость эффективной и обозначим ее через $\eta_{эф}$.

Путем введения эффективных кинетических коэффициентов можно провести регуляризацию уравнений гидродинамики с целью исключения из уравнений гидродинамики нефизических масштабов (*Климонтович*, IV, гл. 13; 1982). Такими являются масштабы в пределах физически бесконечно малого объема $V_ф$. Напомним, что для гидродинамики масштабы $l_ф$, $\tau_ф$ и величина $N_ф$ определяются формулами (2.6.11).

Выбор способа регуляризации уравнений гидродинамики не является, конечно, однозначным. При выборе конкретного способа можно руководствоваться лишь принципом простоты и «работоспособности» регуляризованных уравнений. В работах (*Климонтович*, IV, 1982) эффективная вязкость определена следующим образом:

$$\eta_{эф} = \eta\left[1 + N_ф\left(l_ф^2/v_т^2\right)u_{ij}^2\right], \quad u_{ij} = \partial u_i/\partial r_j + \partial u_j/\partial r_i. \quad (3.9.4)$$

Таким образом, нелинейность вязкости определяется зависимостью от квадрата тензора производных скоростей течения. При этом коэффициент нелинейности определяется физически бесконечно малым масштабом $l_ф$ и числом частиц $N_ф$ в объеме $V_ф$. Первый фактор $(l_ф^2)$ «*зарезает*» нефизические масштабы в пределах объема $V_ф$. Второй фактор $(N_ф)$ показывает, что эффект регуляризации является коллективным — пропорциональным числу частиц $N_ф$.

Регуляризация уравнений гидродинамики вида (4), но с произвольным коэффициентом ε вместо $N_ф l_ф^2/v_т^2$ предложена в работе (*Ладыженская*, 1970). «Работоспособность» предложенной регуляризации проявилась в том, что для уравнений гидродинамики с нелинейной вязкостью в отличие от уравнения Навье — Стокса удается доказать существование решения при всех временах $t > 0$.

В работах (*Климонтович*, IV, 1982) на примере плазмы показана связь эффективных и аномальных кинетических коэффициентов.

3.10. Молекулярный источник Ланжевена в уравнении диффузии

Введем источник Ланжевена в уравнение диффузии (2.6.19):

$$\partial\tilde{n}/\partial t = D\Delta\tilde{n} + f^{(D)}(\mathbf{r},\ t),\ \tilde{n}(\mathbf{r},\ t) = n\tilde{f}(\mathbf{r},\ t). \qquad (3.10.1)$$

Источник Ланжевена может быть введен и в выражение для тока (ср. с формулой (8.3))

$$\tilde{\mathbf{j}}(\mathbf{r},\ t) = -D\partial\tilde{n}/\partial\mathbf{r} + \delta\tilde{\mathbf{j}}. \qquad (3.10.2)$$

Связь двух источников определяется равенством

$$f^{(D)}(\mathbf{r},\ t) = -\partial\delta\tilde{\mathbf{j}}/\partial\mathbf{r}. \qquad (3.10.3)$$

Коррелятор флуктуаций тока равен (ср. с (8.6))

$$\langle\delta\tilde{j}_i\delta\tilde{j}_j\rangle_{\mathbf{r},t,\mathbf{r}',t'} = 2Dn\delta_{ij}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(t-t'). \qquad (3.10.4)$$

Мы видим, что здесь роль теплового фактора в (8.6) играет средняя концентрация n.

Источники Ланжевена $f^{(D)}$, $\delta\tilde{\mathbf{j}}$ являются молекулярными. Их наличие в уравнении диффузии отражает атомарную структуру среды. С помощью (3), (4) находим коррелятор силы Ланжевена:

$$\langle f^{(D)}f^{(D)}\rangle_{\mathbf{r},t,\mathbf{r}',t'} = \\ = 2D\frac{\partial^2}{\partial\mathbf{r}\,\partial\mathbf{r}'}(n(\mathbf{r},t)\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'))\,\delta(t-t') \equiv 2A^{(D)}\delta(t-t'). \qquad (3.10.5)$$

Итак, получены выражения для корреляторов сил Ланжевена в уравнениях гидродинамики и диффузии. Они справедливы и для состояния локального равновесия. При их использовании надо иметь в виду следующее.

Ширина функции $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ при гидродинамическом описании определяется соответствующими физически бесконечно малыми масштабами длины $l_\Phi^{(r)}$ и времени $\tau_\Phi^{(r)}$. Они были введены в гл. 2 (см. (2.6.11) и *Климонтович*, IV, гл. 7). Гидродинамические функции мало меняются на масштабах $\tau_\Phi^{(r)}$, $l_\Phi^{(r)}$. Например, для концентрации имеем условия

$$\tau_\Phi^{(r)}\,\partial n/\partial t \ll n, \qquad l_\Phi^{(r)}\,|\partial n/\partial\mathbf{r}| \ll n. \qquad (3.10.6)$$

Дельта-функция $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ при этом определяется так, что

$$\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} = (V_\Phi^{(r)})^{-1}, \qquad \delta(t-t') = (\tau_\Phi^{(r)})^{-1}. \qquad (3.10.7)$$

Для состояния равновесия из (4) следует ФДС для спектральной плотности флуктуаций тока (источника Ланжевена)

$$(\delta j_i \delta j_j)_{\omega,\mathbf{k}} = 2Dn\delta_{ij}. \qquad (3.10.8)$$

Оно не содержит фактора kT.

Приведем теперь другую запись выражений для интенсивности молекулярных источников Ланжевена в уравнениях гидродинамики. Она полезна при получении обобщенных выражений для кинетических коэффициентов.

3.11. Связь интенсивностей источников Ланжевена с коррелятором флуктуаций фазовой плотности

Напомним, что из общего выражения (1.9.17) для коррелятора флуктуаций фазовой плотности $\delta\tilde{N}$ при $\tilde{g}_2 = 0$ выделяется вклад (1.9.18), который служит источником молекулярных флуктуаций в кинетической теории. С его помощью находим соответствующие корреляторы для флуктуаций гидродинамических функций (знак ~ опускаем):

$$\langle \delta n \delta n \rangle^{\text{ист}}_{\mathbf{r},\mathbf{r}',t} = n(\mathbf{r},t)\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - N^{-1} n(\mathbf{r},t)\, n(\mathbf{r}',t), \qquad (3.11.1)$$

$$\langle \delta u_i \delta u_j \rangle^{\text{ист}}_{\mathbf{r},\mathbf{r}',t} = kT(\mathbf{r},t)\,\rho^{-1}\delta_{ij}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \quad \rho = mn, \qquad (3.11.2)$$

$$\langle \delta T \delta T \rangle^{\text{ист}}_{\mathbf{r},\mathbf{r}',t} = kT^2(\mathbf{r},t)\,(c_V n)^{-1}\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \qquad (3.11.3)$$

В последнем выражении введено обозначение для теплоемкости c_V в расчете на одну частицу. Для идеального газа $c_V = 3k/2$.

С помощью (2) формулу (8.10) для интенсивности можно переписать в виде

$$A^{(\eta)}(\mathbf{r},\mathbf{r}',t) = \frac{\rho\eta}{2}\left\langle\left(\frac{\partial\delta u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial\delta u_j}{\partial r_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial\delta u_k}{\partial r_k}\right)^2\right\rangle^{\text{ист}}_{\mathbf{r},\mathbf{r}',t}. \qquad (3.11.4)$$

С помощью (3) преобразуем аналогичным образом (8.11):

$$A^{(\lambda)}(\mathbf{r},\mathbf{r}',t) = \lambda c_V \frac{\rho}{m}\frac{\partial^2}{\partial\mathbf{r}\,\partial\mathbf{r}'}\langle\delta T\delta T\rangle^{\text{ист}}_{\mathbf{r},\mathbf{r}',t}, \qquad (3.11.5)$$

с помощью (1) — формулу (10.5):

$$A^{(D)}(\mathbf{r},\mathbf{r}',t) = D\frac{\partial^2}{\partial\mathbf{r}\,\partial\mathbf{r}'}\langle\delta n\delta n\rangle^{\text{ист}}_{\mathbf{r},\mathbf{r}',t}. \qquad (3.11.6)$$

Все три выражения определяются через двухточечные корреляторы (1) — (3). Однако, как следует из фор-

мул (8.10), (8.11), (10.5) и (10.7), основную роль играют корреляции на малых расстояниях $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \sim l_{\text{ф}}^{(\text{г})}$.

Заметим, что структура выражений (4), (5) для интенсивностей $A^{(\eta)}$, $A^{(\lambda)}$ при $\mathbf{r}=\mathbf{r}'$ подобна структуре соответствующих вкладов в производство энтропии (2.6.12). Основная разница состоит в том, что в формулах (4), (5) вместо сглаженных значений скорости и температуры, как в (2.6.12), стоят флуктуации скорости и температуры. Эти флуктуации определяют молекулярные источники в уравнениях гидродинамики.

Отмеченная аналогия подсказывает путь обобщения полученных выражений с целью учета вклада крупномасштабных — гидродинамических флуктуаций, а также влияния гидродинамического течения на диссипативные характеристики. Именно в выражениях (4), (5) следует произвести замену

$$\begin{aligned} \langle \delta u_i \delta u_j \rangle^{\text{ист}} &\to \langle \delta u_i \delta u_j \rangle + u_i u_j \equiv \langle \tilde{u}_i \tilde{u}_j \rangle, \\ \langle \delta T \delta T \rangle^{\text{ист}} &\to \langle \delta T \delta T \rangle + TT \equiv \langle \tilde{T}\tilde{T} \rangle. \end{aligned} \tag{3.11.7}$$

Такой способ получения выражений для эффективных интенсивностей и, следовательно, эффективных кинетических коэффициентов соответствует (см. гл. 4) условию равенства нулю среднего производства энтропии. Аналогичным путем получено выражение (1.9.23).

Рассмотрим теперь ФДС для самых медленных флуктуаций, определяющих спектр фликкер-шума (шума «$1/f$»).

3.12. Фликкер-шум. ФДС для шума «$1/f$»

Вернемся к п. 2.6.5, в котором рассматривалась диффузия частиц в ограниченной системе и связь этого процесса с естественным (молекулярным) фликкер-шумом.

Рассмотренные процессы диссипации, обусловленные вязкостью, теплопроводностью, диффузией, представляют собой процессы диффузионного типа с обобщенным коэффициентом диффузии D и характерным временем диффузии $\tau_D = L^2/D \equiv \omega_D^{-1}$; L — линейный масштаб рассматриваемой области.

Обозначим через δn любую из флуктуаций диффузионного типа. При малых временах $\tau \ll \tau_D$ и высоких частотах $\omega \gg \omega_D$ временная корреляция и спектральная плотность флуктуаций δn не зависят от размеров системы. Одноточечный временной коррелятор при этих условиях убывает по степенному закону (*Балеску*, 1978;

Климонтович, IV, гл. 11)

$$\langle \delta n \delta n \rangle_{\tau, r=0} \propto \tau^{-3/2}. \qquad (3.12.1)$$

Проследим за изменением характера спектра и временной корреляции при обратных условиях: $\omega \ll \omega_D$, $\tau \gg \tau_D$. В рамках диффузионной модели максимальное значение τ ограничено временем наблюдения $\tau_{\text{набл}}$, которое определяется условиями физического или численного эксперимента. При этих условиях, наряду с объемом образца или неоднородности V с числом частиц N, имеется корреляционный объем $V_\tau = (D\tau)^{3/2}$ или соответствующий объем $V_\omega = (D/\omega)^{3/2}$ на частоте ω. Наличие этих объемов позволяет произвести сглаживание источников Ланжевена, соответственно, по объемам V_τ, V_ω. В результате для спектра и временной корреляции при сглаженных источниках Ланжевена получаем следующие выражения (*Климонтович*, 1983, IV, 1986):

$$(\delta n)^2_\omega = \frac{\pi}{|\omega|} \frac{\langle (\delta n_V)^2 \rangle}{\ln(\tau_{\text{набл}}/\tau_D)} \propto \frac{1}{N|\omega|}, \qquad \tau^{-1}_{\text{набл}} \ll \omega \ll \omega_D; \quad (3.12.2)$$

$$\langle (\delta n_V)^2 \rangle_\tau = \left(C - \frac{\ln(\tau/\tau_D)}{\ln(\tau_{\text{набл}}/\tau_D)} \right) \langle (\delta n_V)^2 \rangle, \qquad (3.12.3)$$

$$\tau_D \ll \tau \ll \tau_{\text{набл}}.$$

Спектр (2) характерен для фликкер-шума («$1/f$»). Выражение (3) определяет соответствующие медленные (по логарифмическому закону) убывания временных корреляций. В (3) имеется также слабая (логарифмическая при большом значении аргумента) зависимость от времени «наблюдения». Это — «плата» за представление рассматриваемого случайного процесса как стационарного, хотя информация о поведении случайной функции на временах $\tau > \tau_{\text{набл}}$ и частотах $\omega < \tau^{-1}_{\text{набл}}$ отсутствует.

Рассматриваемый *естественный фликкер-шум* можно описать с помощью соответствующих уравнений Ланжевена. Спектральная плотность источника Ланжевена определяется при этом выражением

$$(y^2)_\omega = 2\gamma_\omega \pi [\ln(\tau_{\text{набл}}/\tau_D)]^{-1} \langle (\delta n_V)^2 \rangle \qquad (3.12.4)$$

Оно представляет собой ФДС для естественного фликкер-шума. При этом коэффициент трения определяется частотой: $\gamma_\omega = |\omega|$. В (3) введено обозначение $\langle (\delta n_V)^2 \rangle$ для одновременного коррелятора в области фликкер-шума $(\omega_D > \omega > \tau^{-1}_{\text{набл}})$.

Глава 4

БРОУНОВСКОЕ ДВИЖЕНИЕ

Теории броуновского движения посвящены многочисленные монографии и руководства (*Чандрасекар*, 1947; *Стратонович*, 1961, 1986; *Гихман* и *Скороход*, 1972, 1974; *Рытов*, 1976; *Гардинер*, 1986; *Рискен*, 1983; *Ван Кампен*, 1983; *Климонтович*, III, IV). В нашу задачу не входит последовательное изложение этой теории, рассматриваются лишь вопросы, необходимые для выполнения программы, которая намечена во Введении и в 1.1.

Во-первых, установление связи двух способов описания броуновского движения: на основе уравнений Фоккера — Планка и на основе уравнений Ланжевена. Первый способ с точки зрения статистической теории неравновесных процессов является более естественным и вместе с тем более обоснованным. Однако уравнения Ланжевена во многих случаях более удобны для практических приложений.

Принимая за основу теории броуновского движения уравнения Фоккера — Планка, можно избежать неоднозначности в формулировке уравнений Ланжевена для нелинейных систем (дилемма Ито — Стратоновича) и установить форму уравнений Ланжевена, более четко соответствующую принципам кинетической теории.

Во-вторых, изложение общей теории расчета крупномасштабных — кинетических флуктуаций при броуновском движении.

Здесь основное внимание уделяется рассмотрению броуновского движения в термостате. Соответствующие вопросы для открытых систем рассматриваются в гл. 5.

4.1. Уравнения Фоккера — Планка и Ланжевена

Начнем с известного уравнения Фоккера — Планка для функции распределения координат и скоростей броуновских частиц $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{1}{m}\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = D\frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{v}^2} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}(\gamma \mathbf{v} f) \equiv I_{\text{Ф-П}}, \quad (4.1.1)$$

где — grad $U = \mathbf{F}$ — внешняя потенциальная сила, а коэффициенты трения γ и диффузии D определяются для броуновского движения формулами Стокса и Эйнштейна:

$$\gamma = 6\pi\eta R/m, \qquad D = \gamma kT/m. \quad (4.1.2)$$

В приведенном уравнении коэффициент трения — постоянная величина, и, следовательно, диссипативная сила является линейной. В многих случаях, особенно в открытых системах, диссипативные силы нелинейны. В уравнении (1) это можно учесть путем введения нелинейного коэффициента трения

$$\gamma \to \gamma(\mathbf{v}) = \gamma(-\mathbf{v}). \quad (4.1.3)$$

Условия четности функции $\gamma(\mathbf{v})$ обеспечивает диссипативный характер силы $-\gamma(\mathbf{v})\mathbf{v}$.

При нелинейном трении коэффициент диффузии также зависит от скорости и (1) заменяется более общим уравнением

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{1}{m}\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \\ = \frac{\partial}{\partial v_i} D_{ij}(\mathbf{v})\frac{\partial f}{\partial v_j} + \frac{\partial}{\partial v_i}(\gamma(\mathbf{v}) v_i f). \quad (4.1.4)$$

Источники флуктуаций, интенсивность которых определяется коэффициентом диффузии, можно разделить на *внешние* и *внутренние*.

В первом случае даже при нелинейном трении действие шума в уравнении Фоккера — Планка может характеризоваться постоянным заданным коэффициентом диффузии, стационарное решение уравнения Фоккера — Планка может и не совпадать с равновесным распределением. В соответствующем уравнении Ланжевена коэффициент D определяет интенсивность внешнего шума.

Внутренними (или естественными) являются источники флуктуаций, отражающие «атомарную» структуру рас-

сматриваемой системы, в которой происходит броуновское движение.

Для пассивной нелинейной системы, когда отсутствуют источники накачки энергии (например, равен нулю коэффициент обратной связи в генераторе Ван дер Поля), с естественными источниками флуктуаций уравнение Фоккера — Планка (4) должно иметь равновесное решение

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = C \exp\left(-\frac{m\mathbf{v}^2/2 + U(\mathbf{r})}{kT}\right), \qquad \int f\, d\mathbf{r}\, d\mathbf{v} = 1. \quad (4.1.5)$$

Оно представляет собой каноническое распределение Гиббса с функцией Гамильтона $H = mv^2/2 + U$. Подстановка (5) в уравнение (4) приводит к соотношению диффузионного тензора D_{ij} и коэффициента трения

$$D_{ij}(v) v_j = \gamma (kT/m) v_i, \qquad (4.1.6)$$

которое является обобщением формулы Эйнштейна.

Ниже на примерах системы атомы — поле, плазмы, двухкомпонентного газа будет показано, что при определенных условиях кинетические уравнения сводятся к уравнению Фоккера — Планка (4).

Итак, допустим, что для рассматриваемой системы кинетическое уравнение свелось к уравнению Фоккера — Планка (4). В начале главы было отмечено, что в теории броуновского движения наряду с уравнениями Фоккера — Планка используются уравнения Ланжевена — уравнения в обыкновенных производных, но со случайными источниками. Наша ближайшая задача состоит в том, чтобы найти уравнения Ланжевена, соответствующие уравнению Фоккера — Планка (4).

Для упрощения всех выкладок рассмотрим более простой случай, когда диффузионный тензор $D_{ij}(\mathbf{v})$ является диагональным:

$$D_{ij} = \delta_{ij} D(\mathbf{v}), \qquad D(\mathbf{v}) = \gamma(\mathbf{v}) kT/m. \qquad (4.1.7)$$

Искомые уравнения Ланжевена представим в виде

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}, \qquad \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \gamma(\mathbf{v})\mathbf{v} + \frac{1}{m}\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} + a\frac{\partial D}{\partial \mathbf{v}} = \sqrt{D(\mathbf{v})}\,\mathbf{y}(t). \qquad (4.1.8)$$

Здесь, по предположению, источник $\mathbf{y}(t)$ является гауссовским (т. е. распределение случайной величины $\mathbf{y}(t)$ в каждый момент является распределением Гаусса, следовательно, полностью характеризуется двумя первыми

моментами) и δ-коррелированным во времени. Второе условие отвечает нулевому приближению по отношению времени корреляции источника Ланжевена $\tau_{кор}$ к характерному времени релаксации $\tau_{рел} \sim 1/\gamma$ рассматриваемой системы. Это условие заложено, фактически, уже в кинетической теории при выводе кинетического уравнения Фоккера — Планка (4). Оно есть следствие разделения флуктуаций на мелкомасштабные, определяющие интеграл столкновений, и крупномасштабные (см. условия (1.4.14), (1.4.15)). Выделение множителя $(D(\mathbf{v}))^{1/2}$ в (8) позволяет записать выражения для моментов $\mathbf{y}(t)$ в виде

$$\langle \mathbf{y}(t) \rangle = 0, \qquad \langle y_i(t) y_j(t') \rangle = 2\delta_{ij}\delta(t-t'). \quad (4.1.9)$$

Функции $D(\mathbf{v})$, $\gamma(\mathbf{v})$ известны. Они определяются при выводе кинетического уравнения Фоккера — Планка (4). Таким образом, в уравнениях Ланжевена (8) неопределенным остается лишь один коэффициент a.

В теории броуновского движения константа a в уравнениях, соответствующих уравнению Фоккера — Планка (4), зависит от трактовки стохастических уравнений — уравнений Ланжевена. Рассмотрим три возможности: трактовка Ито (I-уравнения); трактовка Стратоновича (S-уравнения), кинетическая трактовка (K-уравнения). Буквы I, S — начальные буквы фамилий Ito, Stratonovich, а буква K — начальная буква термина Kinetic theory.

4.2. Три определения уравнений Ланжевена и Фоккера — Планка

Известно несколько способов перехода от уравнений Ланжевена к соответствующим уравнениям Фоккера — Планка. Здесь используем способ (*Кляцкин*, *Татарский*, 1973; *Климонтович*, III, IV), который является наиболее естественным с точки зрения излагаемой кинетической теории. В дальнейшем будет изложен также метод Колмогорова.

Итак, будем исходить из уравнений Ланжевена (1.8) и найдем соответствующее уравнение Фоккера — Планка. Введем динамическую фазовую плотность системы N броуновских частиц (ср. с (1.2.1))

$$N(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \sum_{1 \leq i \leq N} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t))\, \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i(t)). \quad (4.2.1)$$

Броуновские частицы составляют идеальный газ, поэтому вместо (1) удобнее использовать динамическое

распределение

$$f^{(д)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}(t))\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}(t)). \qquad (4.2.2)$$

Функции $\mathbf{r}(t)$, $\mathbf{v}(t)$ удовлетворяют уравнениям Ланжевена (1.8). Уравнение для динамического распределения является следствием уравнений Ланжевена и может быть записано в виде

$$\frac{\partial f^{(д)}}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f^{(д)}}{\partial \mathbf{r}} - m^{-1}\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial f^{(д)}}{\partial \mathbf{v}} =$$
$$= \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\left[\left(\gamma(\mathbf{v})\mathbf{v} + a\frac{\partial D}{\partial \mathbf{v}}\right)f^{(д)}\right] - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\left(\sqrt{D(\mathbf{v})}\,\mathbf{y}(t)f^{(д)}\right). \qquad (4.2.3)$$

Статистическое распределение $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ определяем как первый момент динамического распределения:

$$f = \langle f^{(д)} \rangle. \qquad (4.2.4)$$

Уравнение для распределения f следует из (3) после усреднения по ансамблю Гиббса:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - m^{-1}\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} =$$
$$= \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\left[\left(\gamma(\mathbf{v})\mathbf{v} + a\frac{\partial D}{\partial \mathbf{v}}\right)f\right] - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\left(\sqrt{D(\mathbf{v})}\langle \mathbf{y}(t)\delta f\rangle\right), \qquad (4.2.5)$$

где $\delta f = f^{(д)} - f$ — флуктуации. Уравнение (5) не является замкнутым, так как наряду с функцией f в него входит неизвестный пока коррелятор $\langle \mathbf{y}(t)\delta f\rangle$. Здесь учтено, что $\langle \mathbf{y}(t)\rangle = 0$. Чтобы получить замкнутое уравнение — уравнение Фоккера — Планка, надо выразить неизвестный коррелятор через распределение $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$. Это можно сделать следующим образом (*Климонтович*, III, IV).

Найдем с помощью (3), (5) уравнение для флуктуаций δf. Поскольку для вычисления коррелятора $\langle \mathbf{y}(t)\delta f\rangle$ из-за наличия $\delta(t - t')$ в выражении (2) нужно знать решение для δf лишь на малых временах, то в уравнении для δf достаточно оставить лишь член, пропорциональный $\mathbf{y}(t)$. В результате получаем уравнение

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\left(\sqrt{D(\mathbf{v})}\,\mathbf{y}(t)f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)\right). \qquad (4.2.6)$$

Из него и следует нужное нам решение δf:

$$\delta f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\left(\sqrt{D(\mathbf{v})}\int_0^\infty y(t - \tau)f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t - \tau)\right)d\tau. \qquad (4.2.7)$$

Подставим его в последний член уравнения (5). С учетом выражения для второго момента $\mathbf{y}(t)$ получим равенства

$$-\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\left(\sqrt{D(\mathbf{v})}\langle \mathbf{y}\delta f\rangle\right) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\sqrt{D(\mathbf{v})}\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\left(\sqrt{D(\mathbf{v})}f\right) =$$

$$= \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\left(D(\mathbf{v})\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}}\right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\left(\frac{1}{2}\frac{\partial D}{\partial \mathbf{v}}f\right). \quad (4.2.8)$$

Подстановка (8) в (3) и приводит к искомому уравнению Фоккера — Планка:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - m^{-1}\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\left(D(\mathbf{v})\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}}\right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\left[\left(\gamma(\mathbf{v}) + \left(a + \frac{1}{2}\right)\frac{\partial D}{\partial \mathbf{v}}\right)f\right]. \quad (4.2.9)$$

Его можно, разумеется, записать и в иной форме. Однако принятая здесь форма записи может считаться *канонической*, так как именно она следует из кинетической теории (см. 4.3).

Уравнения Ланжевена (1.8) и Фоккера — Планка (9) содержат пока не определенный числовой параметр a. Он входит и в соотношение между коэффициентами диффузии $D(\mathbf{v})$ и трения $\gamma(\mathbf{v})$, которое вытекает из условия, что в равновесном состоянии функция распределения определяется формулой (1.5). Это соотношение имеет вид

$$D(\mathbf{v}) = \left[\left(a + \frac{1}{2}\right)\frac{\mathbf{v}}{\mathbf{v}^2}\frac{\partial D(\mathbf{v})}{\partial \mathbf{v}} + \gamma(\mathbf{v})\right]\frac{kT}{m}. \quad (4.2.10)$$

Перечисленные выше три вида уравнений Фоккера — Планка и соответствующих уравнений Ланжевена отвечают следующим значениям параметра:

1) I-уравнение, $a = 1/2$;
2) S-уравнение, $a = 0$;
3) K-уравнение, $a = -1/2$.

Лишь в последнем из этих случаев равенство (10) совпадает с обобщенным соотношением Эйнштейна (1.7).

Заметим, что формально равенство (10) также можно записать в виде (1.7), если ввести эффективную диссипативную функцию $\gamma_{\text{эф}}(v)$:

$$D(\mathbf{v}) = \gamma_{\text{эф}}\frac{kT}{m}, \qquad \gamma_{\text{эф}} = \gamma(\mathbf{v}) + \left(a + \frac{1}{2}\right)\frac{\mathbf{v}}{\mathbf{v}^2}\frac{\partial D(\mathbf{v})}{\partial \mathbf{v}}. \quad (4.2.11)$$

Отсюда вытекает, что при $a \neq -1/2$ эффективная диссипативная функция не совпадает с диссипативной функцией, входящей в динамические уравнения. Это противоречит общей структуре ФДС, рассмотренных в гл. 3.

Итак, предпочтительным с точки зрения кинетической теории и общей структуры ФДС является уравнение Фоккера — Планка (9) при значении $a = -1/2$. Соответствующее уравнение Ланжевена следует из (1.8).

Заметим, что среднее значение силы Ланжевена в уравнении (1.8) определяется равенством

$$\langle \sqrt{D(\mathbf{v})}\,\mathbf{y}(t)\rangle = (1/2)\langle \partial D(\mathbf{v})/\partial \mathbf{v}\rangle, \qquad (4.2.12)$$

которое следует из уравнений (1.8), (5). Это равенство, как мы видим, не зависит от значения параметра a.

Напомним, что функция $\gamma(\mathbf{v})$ предполагалась четной, так как лишь при этом условии сила $-\gamma(\mathbf{v})\mathbf{v}$ является диссипативной. Следовательно, четной является и функция $D(\mathbf{v})$. Будем считать четной и функцию $U(\mathbf{r})$. Используя равенство (12), с учетом отмеченного убеждаемся, что в состоянии равновесия при усреднении все члены в уравнении Ланжевена (1.8) порознь обращаются в нуль.

Во избежание недоразумений отметим следующее.

Проведенное рассмотрение базировалось на определенном способе перехода от уравнений Ланжевена в уравнения Фоккера — Планка (*Кляцкин*, *Татарский*, 1973; *Климонтович*, III, IV). Однако при переходе от уравнений Ланжевена к уравнениям Фоккера — Планка имеется неоднозначность. Именно, широко используются два способа перехода: по Ито и Стратоновичу. Эти два подхода много раз сопоставлялись в литературе (*Хакен*, 1985; *Ван Кампен*, 1983; *Хорштемке*, *Лефевер*, 1987). Использованный здесь способ перехода соответствует, как можно показать, способу Стратоновича.

Таким образом, способ перехода от уравнений Ланжевена к уравнениям Фоккера — Планка является здесь однозначным. Рассмотренная выше возможность выбора обусловлена самой формой записи исходных уравнений. Поскольку, как отмечалось выше, предпочтение в теории броуновского движения отдается нами уравнениям Фоккера — Планка, как более обоснованным с точки зрения кинетической теории, то необходимо подтвердить эту позицию конкретными примерами.

4.3. Уравнения Фоккера — Планка в статистической теории неравновесных процессов

4.3.1. Краткие итоги и ближайшие задачи. Подведем некоторые итоги и более конкретно сформулируем ближайшие задачи.

В гл. 3, посвященной флуктуационно-диссипационным уравнениям, мы уже рассмотрели ряд примеров уравнений Фоккера — Планка. В их число вошли: модельное уравнение Фоккера — Планка с квантовым коэффициентом диффузии для функции распределения импульсов электронов плазмы — уравнение (3.6.35); уравнение (3.7.5) (с квантовым коэффициентом диффузии (3.7.4) и линейным коэффициентом радиационного трения) для функции распределения энергии $f(E, t)$ квантовых атомов-осцилляторов, взаимодействующих с флуктуационным электромагнитным полем; наконец, уравнения (3.7.12), (3.7.15) для функций распределения $f(q, J, t)$, $f(E, t)$ значений тока, заряда и энергии в электрическом контуре с нелинейным сопротивлением, а также с учетом квантовых эффектов. В последнем примере мы впервые столкнулись с уравнениями Фоккера — Планка, которым соответствуют нелинейные уравнения Ланжевена (3.7.9).

Здесь мы продолжили рассмотрение уравнений Фоккера — Планка (1.4), (2.9) и соответствующих нелинейных уравнений Ланжевена и убедились в неоднозначности уравнений Фоккера — Планка, а следовательно, и уравнений Ланжевена. Были выделены три вида уравнений, отвечающих трем значениям параметра. Одна из задач состоит в том, чтобы показать, к какому из трех видов уравнений Фоккера — Планка приводят достаточно надежно обоснованные кинетические уравнения для плазмы — уравнения Ландау и Балеску — Ленарда, а также уравнения Больцмана для двухкомпонентной смеси тяжелого и легкого газов. Прежде, однако, сделаем еще некоторые замечания по структуре кинетических уравнений для системы атомы — поле.

4.3.2. Два типа уравнений для системы атомы — поле. Роль нулевых колебаний поля. Вернемся к уравнению (3.6.3) с интегралом «столкновений» (3.6.4). Это простейший пример кинетического уравнения для системы неподвижных атомов. Взаимодействие с флуктуационным электромагнитным полем определяет лишь распределение по уровням энергии — функцию распределения $f_n(t)$. Вывод и анализ более общих кинетических уравнений для

атомов, взаимодействующих с полем, возможен не только для одночастичных, но и многочастичных функций распределения (см. (2.4.4), (2.4.5) и *Климонтович*, 1978, III, IV). В последнем случае для равновесного состояния интеграл столкновений обращается в нуль при подстановке в него распределения Гиббса для системы атомов с произвольным взаимодействием.

В отличие от уравнения Леонтовича для N-частичной функции распределения разреженного газа, уравнение для N-частичной функции распределения атомов в системе атомы — поле является нелинейным по функции распределения.

Заметим, что уравнение (3.6.3) с интегралом «столкновений» (3.6.4) не является замкнутым, если нет достаточной информации о спектральной плотности флуктуаций поля. В зависимости от задания этой функции можно выделить два предельных случая.

1. Система атомов в термостате. В этом случае диссипативный процесс, описываемый интегралом «столкновений» (3.6.4), определяется взаимодействием атомов с равновесным электромагнитным излучением. Спектральная плотность флуктуаций поля и диссипативный фактор — в рассматриваемом приближении коэффициент Эйнштейна A_m^n, являются заданными. Спектральная плотность флуктуаций поля определяется формулой (3.6.6).

Для выяснения роли нулевых колебаний поля полезна другая форма представления интеграла «столкновений» (3.6.4).

Из формулы (3.6.6) следует, что плотность распределения энергии электромагнитного излучения по спектру ρ_ω может быть представлена в виде

$$\rho_\omega = \rho_\omega^{(\text{т})} + \rho_\omega^{(0)}, \qquad \rho_\omega^{(0)} = (\omega^2/\pi^2 c^3)(\hbar\omega/2), \qquad (4.3.1)$$

где $\rho_\omega^{(\text{т})}$ — вклад, зависящий от температуры (он определяется формулой Планка в ее первоначальном виде, без нулевых колебаний); $\rho_\omega^{(0)}$ — вклад нулевых колебаний. Подставим (3.1) в (3.6.4). После сокращений приходим к выражению

$$I_n = \sum_{m<n} \left[B_m^n \rho_{\omega_{nm}}^{(\text{т})} (f_m - f_n) - A_m^n f_n\right] + \\ + \sum_{m>n} \left[B_n^m \rho_{\omega_{mn}}^{(\text{т})} (f_m - f_n) + A_n^m f_m\right]. \qquad (4.3.2)$$

Здесь использованы обозначения для коэффициентов Эйнштейна:

$$B_m^n = B_n^m = \frac{4\pi^2 |\mathbf{d}_{nm}|^2}{3\hbar^2}, \qquad A_m^n = -A_n^m = \frac{4|\mathbf{d}_{nm}|^2 \omega_{nm}^3}{3\hbar c^3}. \tag{4.3.3}$$

Для системы двухуровневых атомов ($n = a, b$) с частотой перехода ω_{ab} из (2) следуют выражения для интегралов I_a, I_b:

$$\begin{aligned} I_a &= B_b^a \rho_{\omega_{ab}}^{(\text{т})} (f_b - f_a) - A_b^a f_a, \\ I_b &= B_b^a \rho_{\omega_{ab}}^{(\text{т})} (f_a - f_b) + A_b^a f_a. \end{aligned} \tag{4.3.4}$$

Эти два уравнения описывают баланс вкладов, индуцированных тепловыми (характеризуемыми функцией $\rho_{\omega_{ab}}^{(\text{т})}$) флуктуациями поля и спонтанным излучением. Уравнения впервые установлены в работе Эйнштейна в 1916 г.

Заметим, что в выражениях (2), (4) полностью исключен вклад нулевых колебаний. Равновесное распределение по уровням устанавливается, согласно (3.6.3) с интегралами столкновений (2), (4), лишь под действием тепловых флуктуаций электромагнитного поля, описываемых температурным распределением Планка. Это дает основание считать, что для системы атомов в термостате — в тепловом электромагнитном поле — вклад нулевых колебаний (пропорциональный $(\delta \mathbf{E} \delta \mathbf{E})_{\omega_{nm}}$) и диссипативный член в выражении (3.6.4) взаимно компенсируются и, следовательно, не влияют на релаксационные процессы (*Левин*, *Рытов*, 1967).

Ситуация, однако, существенно меняется, если релаксация к равновесному состоянию рассматривается не за счет действия термостата, а за счет действия поля, порождаемого атомами рассматриваемой системы. В этом случае спектральная плотность флуктуаций поля и диссипативный фактор зависят от распределения атомов по уровням. По этой причине кинетические уравнения являются нелинейными по функциям распределения. Рассмотрим этот вопрос подробнее.

2. Релаксация за счет взаимодействия атомов через поле. Заметим прежде всего, что при использовании флуктуационного представления интеграла столкновений Больцмана (3.4.13) также выделяется индуцированный и диссипативный вклады, баланс которых в равновесии и обеспечивает установление распределения Максвелла.

Разумеется, физический смысл флуктуационных и диссипативных характеристик для газа Больцмана существенно иной, чем для системы атомы — поле. Напомним, что флуктуационная «полевая» характеристика для газа Больцмана определяется выражением (3.4.4), а соответствующие спектральная плотность и мнимая часть «поляризуемости» — формулами (3.4.8), (3.4.9). Мы видим, что флуктуации сами порождаются распределениями импульсов частиц газа и являются поэтому внутренними флуктуациями. Это и является в свою очередь причиной того, что для газа Больцмана кинетическое уравнение нелинейно.

Подобная ситуация, как уже отмечалось, возможна и для системы атомы — поле. Именно, флуктуации поля могут определяться излучением атомов среды. Соответственно этому кинетические уравнения для функции распределения состояний атомов становятся нелинейными. Известен целый ряд таких примеров, отвечающих разным уровням описания (*Климонтович*, 1978 и II—IV). Ограничимся здесь простейшим из них, когда рассматривается система неподвижных атомов и в интеграле столкновений выделяется диссипативный вклад, отвечающий области прозрачности для флуктуаций электромагнитного поля (вклад выделяется при стремлении мнимой части поляризуемости к нулю).

В этом приближении мы снова возвращаемся к интегралу «столкновений». Теперь, однако, спектральная плотность не является заданной — в общем случае не определяется выражением (3.6.6), а в формуле (3) для коэффициента спонтанного излучения появляется дополнительный множитель — показатель преломления рассматриваемой среды — системы атомов. Он зависит, естественно, от распределения атомов по уровням.

Выражение (3.6.4) удобно записать в ином виде:

$$I_n = \sum_m (W_{mn} f_m - W_{nm} f_n). \qquad (4.3.5)$$

Здесь введены вероятности перехода. В рассматриваемом приближении, когда выделяется вклад от области прозрачности для электромагнитного излучения, вероятность перехода

$$W_{nm} = \frac{|\mathbf{d}_{nm}|^2}{3\hbar^2}\left[(\delta\mathbf{E}\delta\mathbf{E})_{\omega_{nm}} + \frac{2\hbar\omega_{nm}^3}{c^3}\, n\right]. \qquad (4.3.6)$$

Через нее выражаются ширина спектральной линии и сдвиг частоты перехода. Существенно, что теперь спектральная плотность не задается внешним источником, как для системы в термостате, а определяется решением кинетического уравнения.

Для равновесного состояния из решения кинетического уравнения следует, что спектральная плотность флуктуаций поля определяется выражением (3.6.6), но с двумя существенными уточнениями:

1. Спектральная плотность определена только на частотах переходов ω_{nm}!

2. В формуле (3.6.6), как и в выражении для коэффициента Эйнштейна A_m^n, появляется в качестве дополнительного множителя показатель преломления среды.

Для состояния равновесия выражение (6) можно представить в виде

$$W_{nm} = B_m^n \rho_{\omega_{nm}}^{(\text{т})} + A_m^n. \tag{4.3.7}$$

Здесь $\rho_{\omega_{nm}}^{(\text{т})}$ — температурная часть формулы Планка, но с учетом показателя преломления среды. При нулевой температуре

$$W_{nm} = \begin{cases} A_m^n, & n > m, \\ 0, & n < m, \end{cases} \tag{4.3.8}$$

и, следовательно, вероятность перехода полностью определяется коэффициентом спонтанного излучения.

Структура (6) и определяет замену (3.7.27), которая была сделана в формуле (3.7.26) при расчете лэмбовского сдвига (3.7.29) в атоме водорода. Из формул (6), (8) следует, что замена (3.7.27) отвечает суммарному учету двух факторов: нулевых колебаний — вкладу от первого слагаемого в правой части (6) при нулевой температуре — и диссипативного фактора, который для области прозрачности получается в пределе $\operatorname{Im} \varepsilon(\omega, \mathbf{k}) \to 0$.

Мы видим, что учет вклада нулевых колебаний при расчете лэмбовского сдвига является принципиальным. Этот вклад не выпадает из рассмотрения, как в случае системы атомов в термостате, поскольку рассматриваются внутренние флуктуации, обусловленные излучением атомов среды.

Рассмотрим теперь некоторые результаты для системы квантовых атомов-осцилляторов. Мы уже знаем, что в этом случае интеграл «столкновений» (3.6.4) упрощается и принимает вид (3.7.1). Последнее выражение бы-

ло в свою очередь упрощено и записано в квазиклассическом приближении, когда энергия становится непрерывной. В результате мы пришли к уравнению Фоккера — Планка (3.7.5) для функции распределения $f(E, t)$.

Вместо (3.7.5) можно использовать более общее уравнение Фоккера — Планка для функции распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ координат и скоростей внутреннего движения квантовых атомов-осцилляторов:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \omega_0^2 \mathbf{r}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \frac{D}{m}\frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{v}^2} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}(\gamma \mathbf{v} f). \quad (4.3.9)$$

Коэффициенты диффузии и радиационного трения определяются прежними формулами

$$D = \gamma_{\omega_0} kT_{\omega_0}, \qquad \gamma = \left(2e^2\omega_0^2/3mc^3\right) n. \quad (4.3.10)$$

Для коэффициента диффузии полезна и другая форма записи, в которой выявляется связь со спектральной плотностью флуктуаций поля:

$$D = (e^2/6m)(\delta \mathbf{E} \delta \mathbf{E})_{\omega_0}. \quad (4.3.11)$$

В классическом — нулевом приближении по параметру $\hbar\omega_0/kT$ спектральная плотность флуктуаций поля определяется формулой Рэлея — Джинса при $\omega = \omega_0$. Для коэффициента диффузии снова получаем формулу Эйнштейна

$$D = \gamma_{\omega_0} kT. \quad (4.3.12)$$

Теперь можно приступить к сформулированной ранее задаче — исследованию структуры уравнений Фоккера — Планка для плазмы и газа Больцмана.

4.3.3. Уравнение Фоккера — Планка для плазмы. Рассмотрим полностью ионизованную электрон-ионную плазму. Обозначим через $f_a(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ функции распределения координат и импульсов электронов и ионов. Индекс a принимает два значения: $a = e, i$. Отдавая дань традиции, используем здесь переменные $\mathbf{r}$, $\mathbf{p}$, а не $\mathbf{r}$, $\mathbf{v}$, как в теории броуновского движения, и отметим, наконец, что будет рассматриваться лишь разреженная плазма.

В разреженной плазме характерный радиус взаимодействия заряженных частиц определяется радиусом Дебая r_D. При этом число частиц N_D в сфере с радиусом Дебая много больше единицы и, следовательно, взаимодействие носит *коллективный характер*. Это дает возможность использовать в кинетической теории плазмы

малый *плазменный параметр*

$$\mu = 1/nr_D^3 \sim 1/N_D \ll 1 \qquad (4.3.13)$$

и получить замкнутые уравнения для функций распределения электронов и ионов:

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}_a \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{p}} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial p_i} D_{ij}^{(a)}(\mathbf{p}) \frac{\partial f_a}{\partial p_j} + \frac{\partial}{\partial p_i}\left(A_i^{(a)}(\mathbf{p}) f_a\right). \qquad (4.3.14)$$

Здесь $\mathbf{F}_a$ — сила Лоренца. Эти уравнения следует дополнить уравнениями Максвелла для напряженностей поля.

Коэффициенты диффузии $D_{ij}^{(a)}$ и трения $A_i^{(a)}$ в равновесном состоянии связаны обобщенным соотношением Эйнштейна (ср. с (3.6.31) для электронов плазмы)

$$D_{ij}^{(a)}(\mathbf{p}) v_j = A_i^{(a)}(\mathbf{p}) kT. \qquad (4.3.15)$$

Используются две формы записи выражений для этих коэффициентов (*Балеску*, 1967; *Силин*, 1971; *Климонтович* I—IV):

1. Коэффициенты диффузии и трения выражаются через функции распределения заряженных частиц f_a. При подстановке их в правую часть (14) приходим к системе нелинейных кинетических уравнений.

2. Коэффициенты диффузии и трения выражаются через спектральную плотность флуктуаций поля и мнимую часть диэлектрической проницаемости:

$$D_{ij}^{(a)}(\mathbf{p}) = \frac{e_a^2}{16\pi^3} \int \delta(\omega - \mathbf{kv}) (\delta E_i \delta E_j)_{\omega,\mathbf{k}} \, d\omega \, d\mathbf{k}, \qquad (4.3.16)$$

$$A_i^{(a)}(\mathbf{p}) = \frac{e_a^2}{2\pi^2} \int \delta(\omega - \mathbf{kv}) \frac{k_i}{\mathbf{k}^2} \frac{\operatorname{Im} \varepsilon(\omega, \mathbf{k})}{|\varepsilon(\omega, \mathbf{k})|^2} \, d\omega \, d\mathbf{k}. \qquad (4.3.17)$$

Здесь $\varepsilon(\omega, \mathbf{k})$ — диэлектрическая проницаемость плазмы с учетом как временной, так и пространственной дисперсии.

Заметим, что имеется заметная аналогия выражений (11) и (16) для коэффициентов диффузии атомов-осцилляторов и плазмы. Напомним, что формула (11) относится к простейшему случаю, когда атомы считаются неподвижными и диффузия идет лишь по внутренним переменным. С учетом движения атомов эта аналогия становится еще более глубокой.

Преимущество формы записи выражений для коэффициентов диффузии (16) и трения (17) состоит в том, что при наличии долгоживущих возбуждений (плазмонов) спектральная плотность флуктуаций поля не успевает подстраиваться под изменения функций распределения. Тогда кинетические уравнения следует дополнить уравнениями для распределения плазмонов по спектру. Эти дополнительные уравнения особенно существенны в теории слабой турбулентности (*Кадомцев*, 1988; *Арцимович*, *Сагдеев*, 1979; *Ситенко*, 1977, *Цытович*, 1971; *Климонтович*, I—IV).

Преобразуем выражение (16) для состояния равновесия. При этом воспользуемся ФДС, которое связывает спектральную плотность флуктуаций поля с мнимой частью диэлектрической проницаемости:

$$(\delta\mathbf{E}\delta\mathbf{E})_{\omega,\mathbf{k}} = \frac{8\pi}{\omega}\frac{\operatorname{Im}\varepsilon(\omega,\mathbf{k})}{|\varepsilon(\omega,\mathbf{k})|^2}kT. \qquad (4.3.18)$$

Тогда равенство (3.15) можно переписать в виде (ср. с (1.6))

$$v_i D_{ij}^{(a)} v_j/\mathbf{v}^2 \equiv D^{(a)}(\mathbf{v}) = \gamma^{(a)}(\mathbf{v})\,kT,$$

$$\gamma^{(a)}(\mathbf{v}) = \frac{e_a^2}{2\pi^2}\int \delta(\omega - \mathbf{kv})\frac{\mathbf{kv}}{\mathbf{k}^2\mathbf{v}^2}\frac{\operatorname{Im}\varepsilon(\omega,\mathbf{k})}{|\varepsilon(\omega,\mathbf{k})|^2}\,d\omega\,d\mathbf{k}. \qquad (4.3.19)$$

Расчет коэффициентов диффузии и трения может быть проведен по этим формулам как для области столкновений, когда интегрирование проводится по области $k > 1/r_D$, так и для области $k < 1/r_D$, в которой существуют плазмоны. В равновесном состоянии второй вклад оказывается логарифмически малым.

4.3.4. Уравнение Фоккера — Планка для газа Больцмана. Рассмотрим разреженный газ, процессы в котором описываются уравнением Больцмана. Если в газе есть примесь атомов более тяжелого газа, то движение атомов тяжелого газа в среде легких можно рассматривать как процесс диффузии и использовать соответствующее уравнение Фоккера — Планка для функции распределения атомов примеси $f_{\text{п}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$.

Исходной служит система уравнений Больцмана для функций распределения легких и тяжелых атомов. Однако в интеграле столкновений тяжелых и легких частиц можно произвести разложение по малому параметру $|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|/Mv_{\text{т}}$ — по отношению изменения импульса легкой частицы при ее столкновении с тяжелой к сред-

нему импульсу тяжелой частицы. В результате приходим к уравнению

$$\frac{\partial f_{\text{п}}}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f_{\text{п}}}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}\frac{\partial f_{\text{п}}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial}{\partial p_i} D_{ij}(\mathbf{p}) \frac{\partial f_{\text{п}}}{\partial p_j} + \frac{\partial}{\partial p_i}(A_i(\mathbf{p}) f_{\text{п}}), \quad (4.3.20)$$

которое аналогично уравнению (14) для плазмы. В равновесном состоянии и здесь коэффициенты диффузии и трения связаны соотношением Эйнштейна.

Для газа также возможны две формы записи выражений для D_{ij}, A_i.

1. Коэффициенты диффузии и трения выражаются через функцию распределения газа легких частиц. Эта функция удовлетворяет уравнению Больцмана.

2. Можно воспользоваться флуктуационным представлением интеграла столкновений Больцмана (*Климонтович*, 1982, 1984, IV) и выразить коэффициенты диффузии и трения через спектральную плотность «потенциала рассеяния» (3.4.8) и мнимую часть соответствующей восприимчивости (3.4.9):

$$D_{ij}(\mathbf{p}) = (16\pi^3)^{-1} \int \delta(\omega - \mathbf{kv})(\delta U \delta U)_{\omega,\mathbf{k},\mathbf{p}} k_i k_j \, d\omega \, d\mathbf{k}, \quad (4.3.21)$$

$$A_i(\mathbf{p}) = (8\pi^3)^{-1} \int \delta(\omega - \mathbf{kv}) k_i \operatorname{Im} \alpha(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{p}) \, d\omega \, d\mathbf{k}. \quad (4.3.22)$$

В равновесном состоянии можно воспользоваться ФДС (3.4.11) для газа Больцмана и записать выражение для коэффициента диффузии газа тяжелых частиц в виде (ср. с (1.6) и (3.19))

$$v_i D_{ij} v_j / \mathbf{v}^2 \equiv D(\mathbf{v}) = \gamma(\mathbf{v}) kT, \quad (4.3.23)$$

$$\gamma(\mathbf{v}) = (2\pi)^{-3} \int \delta(\omega - \mathbf{kv}) \frac{\mathbf{kv}}{\mathbf{v}^2} \operatorname{Im} \alpha(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{p}) \, d\omega \, d\mathbf{k}.$$

Видно, что конкретное выражение для коэффициента трения существенно зависит от вида потенциала взаимодействия частиц газа.

Флуктуационное представление интеграла столкновений Больцмана делает возможным последовательное обобщение кинетического уравнения с целью одновременного учета в интеграле столкновений сильных, но парных столкновений для нейтральных частиц и слабых, но коллективных взаимодействий заряженных частиц в плазме. Это обобщение необходимо для описания процессов в ча-

стично ионизованной плазме с учетом процессов ионизации и рекомбинации, когда степень ионизации может меняться от нуля (газ нейтральных частиц) до единицы (полностью ионизованная плазма).

Подведем итоги.

Кинетическая теория как для плазмы, так и для газа приводит к канонической форме уравнения Фоккера — Планка, т. е. к уравнению типа (2.9) при значении $a = -1/2$. При этом в равновесном состоянии выполняются обобщенные соотношения Эйнштейна (19), (23), которые связывают интенсивность шума (коэффициент диффузии) с диссипативным коэффициентом и температурой. Тем самым соотношения (19), (23) являются примерами нелинейных (в силу зависимости коэффициентов γ и D от $\mathbf{v}$) флуктуационно-диссипационных соотношений.

Напомним, что трактовка стохастических уравнений (уравнений Ланжевена для нелинейных систем) по Ито приводит к уравнению Фоккера — Планка (2.9) при значении $a = 1/2$. При этом интеграл «столкновений» $I^{(\mathrm{I})}$ может быть записан в двух эквивалентных формах:

$$I^{(\mathrm{I})} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\left(D(\mathbf{v})\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}}\right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\left[\left(\gamma(\mathbf{v})\,\mathbf{v} + \frac{\partial D}{\partial \mathbf{v}}\right) f\right] = \\ = \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}^2}(D(\mathbf{v})\,f) + \frac{\partial}{\partial v}(\gamma(\mathbf{v})\,\mathbf{v} f). \qquad (4.3.24)$$

В равновесном состоянии (при подстановке сюда распределения Максвелла) получаем соотношение ((2.10) при $a = 1/2$)

$$D(\mathbf{v}) = [\gamma(\mathbf{v}) + (\mathbf{v}/\mathbf{v}^2)\,\partial D(\mathbf{v})/\partial \mathbf{v}]\,kT/m. \qquad (4.3.25)$$

Напротив, при использовании трактовки стохастических уравнений, предложенной Стратоновичем, в уравнении Фоккера — Планка (2.9) надо положить $a = 0$. При этом соответствующий интеграл «столкновений» $I^{(\mathrm{S})}$ также можно представить в двух эквивалентных формах:

$$I^{(\mathrm{S})} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\left(D(\mathbf{v})\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}}\right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\left[\left(\gamma(\mathbf{v})\,\mathbf{v} + \frac{1}{2}\frac{\partial D}{\partial \mathbf{v}}\right) f\right] = \\ = \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}^2}(D(\mathbf{v})\,f) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\left[\left(\gamma(\mathbf{v})\,\mathbf{v} - \frac{1}{2}\frac{\partial D}{\partial \mathbf{v}}\right) f\right]. \qquad (4.3.26)$$

В равновесном состоянии вместо (25) получаем следующее соотношение ((2.10) при $a = 0$):

$$D(\mathbf{v}) = [\gamma(\mathbf{v}) - (\mathbf{v}/2\mathbf{v}^2)\,\partial D/\partial \mathbf{v}]\,kT/m. \qquad (4.3.27)$$

Равенства (25), (27) могут быть формально сведены к ФДС путем введения эффективного коэффициента трения (см. (2.11)). Фактически, соотношения (25), (27) представляют собой дифференциальные уравнения для функции $D(v)$ (*Климонтович*, III, 1980, гл. 4; 1983, гл. 5). При этом, например из (27), для коэффициента диффузии в одномерном случае следует выражение

$$D(v) = -2\exp(mv^2/kT)\int_{\infty}^{v}\gamma(v')\exp(-mv'^2/kT)\,v'\,dv'. \tag{4.3.28}$$

В отличие от ФДС (1.7) (обобщенной формулы Эйнштейна) зависимость от температуры здесь является нелинейной, а связь коэффициентов $D(v)$, $\gamma(v)$ — интегральной.

Итак, для одной и той же системы имеются три различных уравнения Фоккера — Планка. Все они следуют из (2.9) при различных значениях параметра a: при $a = -1/2$ (K-уравнение, так как именно к нему приводит кинетическая теория); при $a = 1/2$ (I-уравнение, оно получается при использовании трактовки стохастических уравнений по Ито); при $a = 0$ (S-уравнение, оно получается при трактовке стохастических уравнений по Стратоновичу). Существенно, что во всех трех случаях использовалось требование существования равновесного распределения, т. е. предполагалось, что шум является тепловым. При наличии внешних шумов возможны самые разные ситуации. Однако тепловой (естественный) шум имеет место во всех системах. Поэтому правильность того или иного уравнения Фоккера — Планка можно контролировать по предельному выражению, когда внешний шум выключается, а тепловой остается.

Рассмотренные конкретные физические примеры привели нас к кинетической форме уравнения Фоккера — Планка (K-уравнению). В пользу этого уравнения говорит и выполнение для него обобщенного соотношения Эйнштейна.

4.4. Связь уравнения Фоккера — Планка с уравнениями Смолуховского и Чепмена — Колмогорова

В математической литературе широко используется вывод уравнения Фоккера — Планка на основе уравнения Смолуховского или уравнения Чепмена — Колмогорова

(*Гихман, Скороход*, 1974; *Рытов*, 1976; *Гардинер*, 1986). Не вполне эквивалентный, но близкий подход используется в курсе теоретической физики Ландау и Лифшица (*Лифшиц, Питаевский*, 1979).

Уравнение Чепмена — Колмогорова является следствием условия согласованности распределений разных порядков и определения условного распределения. Обозначим через x произвольный набор переменных, а через $p(x, t)$, $p(x, t, x_0, t_0)$, ...— последовательность функций распределения.

Воспользуемся двумя тождествами:

$$p(x, t) = \int p(x, t, x_0, t_0)\, dx_0 = \int p(x, t \mid x_0, t_0)\, p(x_0, t_0)\, dx_0, \tag{4.4.1}$$

$$p(x, t) = \int p(x, t \mid x', t')\, p(x', t')\, dx' = \\ = \int p(x, t \mid x', t')\, p(x', t' \mid x_0, t_0)\, p(x_0, t_0)\, dx'\, dx_0. \tag{4.4.2}$$

В силу произвольности распределения из равенства правых частей вытекает искомое уравнение Чепмена — Колмогорова для условного распределения:

$$p(x, t \mid x_0, t_0) = \int p(x, t \mid x', t') p(x', t' \mid x_0, t_0)\, dx'. \tag{4.4.3}$$

Если после умножения на $p(x_0, t_0)$ его проинтегрировать по x_0, то получим уравнение для функции распределения $p(x, t)$:

$$p(x, t) = \int p(x, t \mid x', t')\, p(x', t')\, dx'. \tag{4.4.4}$$

Из уравнений (3), (4) для непрерывных марковских процессов следуют уравнения Фоккера — Планка для функций $p(x, t \mid x_0, t_0)$, $p(x, t)$. Например,

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}(D_{ij}(x, t)\, p(x, t)) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\widetilde{A}_i(x, t) f). \tag{4.4.5}$$

Коэффициенты трения и диффузии связаны с моментами условного распределения:

$$\widetilde{A}_i(x, t) = -\lim_{\Delta t \to 0} (\Delta t)^{-1} \int (x' - x)_i\, p(x, t + \Delta t, x', t) dx', \tag{4.4.6}$$

$$D_{ij}(x, t) = \\ = \frac{1}{2} \lim_{\Delta t \to 0} (\Delta t)^{-1} \int (x - x')_i (x - x')_j\, p(x, t + \Delta t, x', t)\, dx'. \tag{4.4.7}$$

Таким образом, из уравнения Смолуховского или Чепмена — Колмогорова при определенных условиях следует уравнение Фоккера — Планка. Формально оно соответствует уравнению Фоккера — Планка (2.9) с $a = 1/2$, т. е. уравнению с интегралом «столкновений» в форме Ито (ср. с (3.24)). Необходимо, однако, использовать дополнительное условие для однозначной интерпретации смысла коэффициента $\tilde{A}_i$. В общем случае он не играет роли коэффициента трения. Это отмечается значком $\sim$ над функцией A_i.

Действительно, вклад в коэффициент трения определяется не только первым моментом (6), который отличен от нуля и при чисто динамическом описании, когда интенсивность шума равна нулю, но и производной второго момента (7), т. е. производной от коэффициента диффузии. Этот дополнительный вклад может входить с некоторым коэффициентом, который и подлежит определению на основе некоторого дополнительного условия. Мы уже встречались с подобной ситуацией ранее (см. (2.11)).

Для однозначного определения коэффициента трения можно наложить требование существования равновесного решения для уравнения Фоккера — Планка. Если x есть скорость броуновской частицы, то равновесным решением является распределение Максвелла и коэффициент трения определяется равенством

$$A_i(\mathbf{v}) = \tilde{A}_i(\mathbf{v}) + \partial D_{ij}/\partial v_j. \qquad (4.4.8)$$

Тем самым он определяется как первым, так и вторым моментами условного распределения. В результате приходим к уравнению Фоккера — Планка в канонической форме:

$$\frac{\partial p(v, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v_i}\left(D_{ij}(v)\frac{\partial p}{\partial v_j}\right) + \frac{\partial}{\partial v_i}(A_i(v)\,p). \qquad (4.4.9)$$

При этом, как и раньше, коэффициенты диффузии и трения связаны обобщенным соотношением Эйнштейна

$$D_{ij}(v)\,v_j = A_i(v)\,kT/m, \qquad (4.4.10)$$

которое при $D_{ij} = \delta_{ij}D(v)$, $A(v) = \gamma(v)v$ совпадает с (1.7).

Если величина x имеет другой физический смысл (концентрация частиц, заряд и т. д.), то соотношение (10) меняется. Однако во всех случаях требование существования равновесного решения позволяет однозначно определить коэффициент трения и привести уравнение Фоккера — Планка к каноническому виду.

Разумеется, рассмотренная ситуация имеет место лишь при тепловом шуме. При наличии внешних источников шума, которые, как правило, имеются в открытых системах, структура уравнений Фоккера — Планка может быть иной. Мы столкнемся с этим в дальнейшем.

4.5. Источники Ланжевена в кинетических уравнениях

4.5.1. Уравнение Ланжевена для одночастичной функции распределения. В процессе изложения уже не раз возникал вопрос о необходимости учета крупномасштабных — кинетических флуктуаций для объяснения и расчета многих физических явлений (например, молекулярного рассеяния света и турбулентности). К этим явлениям, как уже не раз отмечалось, относится и броуновское движение.

Возможные пути развития кинетической теории флуктуаций рассматривались в 1.6 на примере разреженного газа. Мы видели, что при учете флуктуаций кинетическое уравнение (1.6.3) для одночастичной функции распределения становится незамкнутым. В правой части этого уравнения наряду с интегралом Больцмана возникает дополнительный интеграл $\tilde{I}$, который согласно (1.6.5) определяется коррелятором крупномасштабных флуктуаций $\langle\delta\tilde{N}\delta\tilde{F}\rangle$ или более общим одновременным коррелятором флуктуаций фазовой плотности $\langle\delta\tilde{N}\delta\tilde{N}\rangle_{x,x',t}$. Уравнение для последнего в свою очередь содержит более сложные тройные корреляторы и т. д. В результате при учете кинетических флуктуаций вместо одного уравнения Больцмана возникает бесконечная цепочка диссипативных уравнений для функций f, $\langle\delta\tilde{N}\delta\tilde{N}\rangle_{x,x',t}$, $\langle\delta\tilde{N}\delta\tilde{N}\delta\tilde{N}\rangle_{x,x',x'',t'}$, ...

При описании кинетических процессов, как мы видели, возможен выбор физически бесконечно малого объема $V_ф$, содержащего большое число частиц ($N_ф \gg 1$). Благодаря этому во многих случаях эффективным оказывается приближение малых флуктуаций, в котором задача может быть сведена к решению соответствующего уравнения Ланжевена для функции $\delta\tilde{N}$ (см., например, *Климонтович*, II, IV, гл. 11)

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} + \delta\tilde{I}_{\mathbf{p}}\right)\delta\tilde{N} + \delta\tilde{F}\frac{\partial n f_1}{\partial \mathbf{p}} = y(x, t). \qquad (4.5.1)$$

Флуктуация силы связана с $\delta\tilde{N}$ равенством (1.6.6). Моменты источника Ланжевена определяются выражениями ($\delta\tilde{N} = n\delta\tilde{f}$)

$$\langle y(x, t)\rangle = 0, \qquad \langle y(x, t)y(x', t')\rangle = A(x, x', t)\delta(t - t'). \tag{4.5.2}$$

Как и в (1.6.9), интенсивность источника $A(x, x', t)$ представляется в виде суммы двух вкладов (*молекулярного* и *турбулентного*), отвечающих двойной «надстройке» над уровнем описания на основе кинетического уравнения Больцмана.

Для состояний, близких к равновесным, когда вклад крупномасштабных — кинетических флуктуаций пренебрежимо мал, дополнительный интеграл $\tilde{I}$ в (1.6.3) можно опустить. При этом (1.6.3) становится замкнутым и совпадает с кинетическим уравнением Больцмана (1.5.9). В этом же приближении в уравнении Ланжевена (1) член с $\delta\tilde{F}$ можно опустить. В результате оно принимает вид

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + v\frac{\partial}{\partial r} + F\frac{\partial}{\partial p} + \delta\hat{I}_p\right)\delta\tilde{N} = y(x, t) \tag{4.5.3}$$

и совпадает с линеаризованным уравнением Больцмана, дополненным источником Ланжевена $y(x, t)$. Моменты этого источника определяются теперь более простыми выражениями:

$$\langle y(x, t)\rangle = 0, \qquad \langle y(x, t)y(x', t')\rangle = A_{\text{Б}}(x, x', t)\delta(t - t'). \tag{4.5.4}$$

Известны несколько различных форм записи выражения для интенсивности $A_{\text{Б}}$. Используем здесь выражение (1.6.10) (*Климонтович*, II, (62.19); IV, гл. 11, (10.12))

$$A_{\text{Б}}(x, x', t) = [(\delta\hat{I}_{\text{p}} + \delta\hat{I}_{\text{p}'}) - (\delta\hat{I}_{\text{p}} + \delta\hat{I}_{\text{p}'})_0]\, n\delta(x - x')\, f_1(x, t). \tag{4.5.5}$$

Индекс «0» у второго члена в квадратных скобках указывает, что линеаризованный оператор столкновений в $(\delta\hat{I}_{\text{p}} + \delta\hat{I}_{\text{p}'})_0$ действует лишь на функцию $f_1(x, t)$, но не на $\delta(x - x')$.

Для равновесного состояния второй член в (5) обращается в нуль. При этом выражение для коррелятора (4) совпадает с полученным Кадомцевым (*Кадомцев*, 1957).

Таким образом, для состояний, близких к равновесному, расчет кинетических флуктуаций разбивается на два этапа: 1. Нахождение решения уравнения Больцмана. Этим решением определяется коррелятор (4). 2. Решение уравнения Ланжевена (3).

Для состояния локального равновесия решение уравнения Больцмана известно и определяется формулой (1.9.4), поэтому задача сводится к решению уравнения Ланжевена (3).

4.5.2. Связь метода функций распределения (метода моментов) с методом Ланжевена. В п. 1.9.2 для описания кинетических процессов с учетом крупномасштабных флуктуаций использовалась замкнутая система уравнений для функций f_1, $\langle\delta\tilde{N}\delta\tilde{N}\rangle_{x,x',t}$ — уравнения (1.6.3), (1.6.7). При использовании метода Ланжевена уравнение (1.6.3) сохраняет прежний вид, а вместо уравнения (1.6.7) используется уравнение Ланжевена (1) для функции $\delta\tilde{N}(x, t)$. При этом коррелятор источника Ланжевена определяется формулой (2).

Существенным является вопрос о связи источника $A(x, x', t)$ в уравнении (1.6.7) с интенсивностью источника Ланжевена в уравнении (1).

Мы использовали для этих функций одинаковые обозначения. Это, разумеется, не случайно. Расчеты показывают, что эти две функции совпадают (*Климонтович*, III, гл. 3; IV, гл. 11). Для газа Больцмана при учете лишь молекулярного источника это совпадение показано ранее (*Ганцевич*, *Гуревич*, *Катилюс*, 1969, 1970; *Коган*, *Шульман*, 1969).

Вопрос о соотношении метода моментов и метода Ланжевена является достаточно общим. В простейшем варианте он рассматривался еще в курсе Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица (*Ландау*, *Лифшиц*, 1976). Более сложные проблемы возникали в теории лазеров (*Лэкс*, 1974; *Хакен*, 1985; *Климонтович* (ред.), 1974).

Итак, функции $A(x, x', t)$ в уравнении (1.6.7) и в выражении (2) совпадают. Таким образом, и в теории броуновского движения ее можно представить в виде (1.6.9):

$$A(x, x', t) = A_{\text{Б}}(x, x', t) + \bar{A}(x, x', t). \qquad (4.5.6)$$

Первый член, отражающий наличие атомарной структуры среды, определяется выражением (5), а турбулентный вклад $\bar{A}(x, \tilde{x}, t)$ связан с интегралом столкновений

$I(x, t)$ в кинетическом уравнении (1.6.3) соотношением

$$\bar{A}(x, x', t) = \delta(x - x') I(x, t) - V^{-1}[I(x, t) f_1(x', t) + I(x', t) f_1(x, t)]. \quad (4.5.7)$$

Обе эти формулы могут быть получены из единого выражения (22.22) книги (*Климонтович*, II) для источника $A(x, x', t)$ в уравнении для одновременного коррелятора $\langle \delta\tilde{N} \delta\tilde{N} \rangle_{x,x',t}$.

Используем теперь уравнения (1.6.3), (1) для функций f_1, $\delta\tilde{N}$ для установления уравнения баланса энтропии.

4.5.3. Связь интенсивности источника Ланжевена и производства энтропии. Напомним, что метод моментов в приближении малых флуктуаций для среднего значения производства энтропии привел нас к выражению (1.9.16). Полезно получить это выражение и с помощью уравнения Ланжевена. Заметим, что система уравнений (1.6.3), (1) в приближении малых флуктуаций может быть записана в виде единого уравнения Ланжевена

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \tilde{F}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right)\tilde{N}(x, t) = I_{\text{Б}}\{\tilde{N}\tilde{N}\} + y(x, t). \quad (4.5.8)$$

Используя определение энтропии (1.4.7), с помощью этого уравнения получим следующее выражение для среднего производства энтропии:

$$\langle\tilde{\sigma}\rangle = -kn\int\langle \ln\tilde{f} I_{\text{Б}}\{\tilde{f}\tilde{f}\}\rangle\, dx - k\int\langle \ln\tilde{f} y\rangle\, dx. \quad (4.5.9)$$

В приближении малых флуктуаций оно принимает вид

$$\langle\tilde{\sigma}\rangle = -kn\int \ln f I_{\text{Б}}\, dx + \frac{kn}{2}\int\frac{\langle\delta\tilde{f}\delta\tilde{f}\rangle}{f^2} I_{\text{Б}}\, dx +$$

$$+ \frac{k}{2}\int\frac{\delta(x - x')}{\bar{N}(x, t)}[(\delta\tilde{I}_{\mathbf{p}} + \delta\tilde{I}_{\mathbf{p}'})\langle\delta\tilde{N}\delta\tilde{N}\rangle_{x,x',t} - 2\langle\delta\tilde{N} y\rangle_{x,x',t}]\, dx dx'. \quad (4.5.10)$$

Отличие от (1.9.16) состоит лишь в замене $A(x, x', t)$ на $\langle\delta\tilde{N} y\rangle_{x,x',t}$. Основываясь на уравнении Ланжевена (1), покажем, что имеет место равенство

$$\langle\delta\tilde{N} y\rangle_{x,x',t} = A(x, x', t)/2, \quad (4.5.11)$$

в котором $A(x, x', t)$ — интенсивность источника Ланжевена $y(x, t)$ в (2). Это и будет служить доказатель-

ством эквивалентности выражений (1.9.16), (10), поскольку будет показано, что источник в уравнении (1.6.7) и интенсивность источника Ланжевена (2) совпадают.

Для доказательства используем уравнение (1) и учтем, что для вычисления коррелятора $\langle \delta\tilde{N} y \rangle$ достаточно знать решение $\delta\tilde{N}$ лишь на временах $\tau \ll \tau_{кор}$. На этом основании уравнение (1) можно существенно упростить (ср. с (2.6) при выводе уравнения Фоккера — Планка):

$$\frac{\partial \delta\tilde{N}}{\partial t} = y(x, t), \quad \text{отсюда} \quad \delta\tilde{N}(x, t) = \int_0^\infty y(x, t-\tau)\, d\tau. \tag{4.5.12}$$

Подстановка этого решения в выражение для коррелятора $\langle \delta\tilde{N} y \rangle$ с учетом (2) приводит к равенству (11).

Таким образом, метод моментов и уравнение Ланжевена приводят к одинаковым выражениям для производства энтропии. Это лишь одно из проявлений эквивалентности двух способов описания флуктуационных процессов (*Климонтович*, II).

В заключение сделаем замечание.

Выражение (1.6.9) для функции $A(x, x', t)$, полученное из условия $\langle \tilde{\sigma} \rangle = 0$, справедливо лишь для близких (в смысле физически бесконечно малого) значений x, x'. Вместе с тем метод моментов и метод Ланжевена дают возможность найти эту функцию для всех значений x, x'. Таким образом, уравнение $\langle \tilde{\sigma} \rangle = 0$ содержит неполную информацию о функции $A(x, x', t)$. Это естественно, так как и энтропия и производство энтропии содержат лишь одноточечные моменты. Однако использование уравнения $\langle \tilde{\sigma} \rangle = 0$ для определения функции $A(x, x', t)$ имеет некоторые преимущества. Отметим одно из них.

Уравнение $\langle \tilde{\sigma} \rangle = 0$ позволяет, как мы видели в п. 1.9.2, определить для неравновесных состояний *эффективный источник Ланжевена* (1.9.23).

4.5.4. Флуктуации N-частичного распределения в газе Больцмана. Выше рассматривались два примера уравнений для N-частичных функций распределения: уравнение Леонтовича для газа Больцмана; квантовое кинетическое уравнение для N-частичной функции распределения системы атомы — поле. Уравнение Леонтовича является более простым по структуре, так как интеграл столкновений в нем линейно зависит от функции распределения f_N.

Уравнение Леонтовича (1.7.1) рассматривалось в п. 2.6.1 как пример уравнения сплошной среды в $6N$-мерном фазовом пространстве. При этом роль «среды» играла совокупность систем, составляющих ансамбль Гиббса. Однако структура ансамбля Гиббса является дискретной. Это можно учесть путем введения в уравнение Леонтовича соответствующего источника Ланжевена $y_N(X, t)$. Моменты источника определяются выражениями

$$\begin{gathered}\langle y_N(X, t)\rangle = 0,\\ \langle y_N(X, t) y_N(X', t)\rangle = A_{\text{л}}(X, X', t)\delta(t-t'),\end{gathered} \tag{4.5.13}$$

которые аналогичны формулам (2). Интенсивность источника Ланжевена в уравнении Леонтовича можно записать в форме, подобной (5). Однако более удобна форма записи, соответствующая (1.6.10).

Введем обозначение $\delta\widehat{I}_X$ для «линеаризованного» оператора столкновений, соответствующего (1.7.2). (Кавычки поставлены, так как интеграл (1.7.2) зависит от функции распределения линейно.) Тогда функция $A_{\text{л}}(X, X', t)$ имеет вид

$$\begin{aligned}&A_{\text{л}}(X, X', t)=\\ &\quad = [(\delta\widehat{I}_X + \delta\widehat{I}_{X'}) - (\delta\widehat{I}_X + \delta\widehat{I}_{X'})_0]\,\langle\delta f_N\delta f_N\rangle_{X,X',t}.\end{aligned} \tag{4.5.14}$$

Здесь опущен индекс «ист», так как для совокупности невзаимодействующих систем, составляющих ансамбль Гиббса, имеется точное выражение для одновременного коррелятора (ср. с формулой (2.5.3))

$$\langle\delta f_N\delta f_N\rangle_{X,X',t} = \delta(X - X')\, f_N(X, t) - f_N(X, t)\, f_N(X', t). \tag{4.5.15}$$

Здесь

$$f_N(X, t) = \langle\tilde{f}_N(X, t)\rangle, \qquad \delta f_N = \tilde{f}_N - f_N. \tag{4.5.16}$$

Случайная функция распределения $\tilde{f}_N$ удовлетворяет уравнению Леонтовича (1.7.1), но с источником Ланжевена:

$$\frac{\partial\tilde{f}_N}{\partial t} + \sum_{1\leqslant i\leqslant N}\left(v_i\frac{\partial}{\partial r_i} + F_i\frac{\partial}{\partial p_i}\right)\tilde{f}_N = I_N\{\tilde{f}_N\} + y_N(X, t), \tag{4.5.17}$$

δf_N — флуктуация функции распределения.

В равновесном состоянии f_N есть N-частичное распределение Максвелла для газа Больцмана. Тем самым из-

вестной является и интенсивность (14). Задача расчета флуктуаций, таким образом, сводится к решению уравнения (17) с заданным источником Ланжевена.

В общем случае интенсивность источника сама зависит от решения уравнения Леонтовича (1.7.1).

4.5.5. Иерархия условий неполноты статистического описания. Заметим, что выражение (15) для одновременного коррелятора флуктуаций N-частичной функции распределения совпадает по виду с формулой (2.5.3). Однако имеется и существенное различие. В (2.5.3) основным является микроскопическое распределение $f_N^{\text{м}}$. Точное определение этой функции отвечает полному (с точки зрения классической механики) описанию. При неполном описании коррелятор (2.5.3) и дисперсия (2.5.4) отличны от нуля. Энтропия минимальна при полном описании, когда дисперсия флуктуаций функции распределения равна нулю.

При использовании выражения (15) положение в некотором смысле обратное. Действительно, здесь рассматриваются флуктуации относительно распределения $f_N = \langle \tilde{f}_N \rangle$, которое отвечает приближению сплошной среды — ансамблю Гиббса. В этом случае при учете флуктуаций мы получаем дополнительную информацию о системе. По этой причине при заданном значении средней энергии энтропия уменьшается. Это есть следствие теоремы Гиббса.

Таким образом, обе рассмотренные ситуации отвечают двум противоположным исходным позициям. В первом случае исходным служит *наиболее полное описание*, которое задается микроскопической функцией распределения $f_N^{\text{м}}$, что отвечает полному (с точки зрения классической механики) описанию (см. также начало 2.5).

Напротив, во втором случае, когда состояние описывается функцией распределения $f_N = \langle \tilde{f}_N \rangle$, имеет место *наименее полное описание*, отвечающее приближению сплошной среды. При этом наиболее полная информация может быть получена с помощью функции $\tilde{f}_N$, т. е. с учетом флуктуаций. И здесь выражение (15) для коррелятора и соответствующее выражение для дисперсии могут служить мерой неполноты описания, получаемого с помощью функции $\langle \tilde{f}_N \rangle$, т. е. в приближении сплошной среды.

С аналогичной ситуацией мы имеем дело и в квантовой теории. Здесь мерой неполноты описания служат вы-

ражения (2.5.5), (2.5.7). При полном квантовомеханическом описании с помощью функции ρ_N (чистый ансамбль) дисперсии (2.5.6), (2.5.8) равны нулю. Одновременной коррелятор (2.5.7) (или (3.2.4) для равновесной системы) определяет интенсивность источника Ланжевена (3.5.3) в уравнении для матрицы плотности. При этом выражение (3.2.4) может быть принято за меру неполноты описания, когда под «полным» понимается описание с помощью флуктуирующей матрицы плотности f_{nm}, которая соответствует классическому сглаженному (пульсирующему) распределению $\tilde{f}_N$.

Представленная ситуация имеет место на всех уровнях описания. Таким образом, существует целая иерархия условий неполноты статистического описания. Далее мы используем изложенные выше результаты для описания флуктуационных процессов в кинетической теории и в гидродинамике.

4.6. Источники Ланжевена в уравнениях Фоккера — Планка и Эйнштейна — Смолуховского

Уравнение Фоккера — Планка (1.1) для функции распределения координат и скоростей броуновских частиц, как и уравнение Больцмана для газа, представляет пример уравнения механики сплошной среды в 6-мерном пространстве координат и скоростей броуновских частиц.

В действительности эта «среда» имеет структуру — состоит из отдельных, хотя и маленьких макроскопических частиц. Как и в теории газов, это проявляется через флуктуации, но теперь уже крупномасштабные — кинетические, функции распределения $\tilde{f}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$.

Поскольку уравнение Фоккера — Планка является линейным относительно функции распределения, то уравнение для флуктуации δf также является линейным и имеет вид

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m}\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} + \delta\widehat{I}_{\mathbf{v}}^{\Phi-\Pi}\right)\delta f(\mathbf{r},\mathbf{v},t) = y(\mathbf{r},\mathbf{v},t). \tag{4.6.1}$$

Как и выше, обозначаем флуктуирующую функцию распределения через $\tilde{f}$. Тогда флуктуация $\delta f = \tilde{f} - f$. Здесь $f = \langle \tilde{f} \rangle$ — среднее значение функции $\tilde{f}$ по ансамблю Гиббса. Функция f удовлетворяет уравнению Фоккера — Планка (1.1).

Среднее значение источника Ланжевена равно нулю, $\langle y \rangle = 0$, а второй момент можно, как и выше, представить в виде

$$\langle yy \rangle_{\mathbf{r},\mathbf{v},\mathbf{r}',\mathbf{v}',t} = A_{\Phi-\Pi}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{r}', \mathbf{v}', t)\,\delta(t - t'). \qquad (4.6.2)$$

Нам осталось определить интенсивность источника. Заметим, что входящий в уравнение (1) оператор «столкновений» $\delta\widehat{I}_{\mathbf{v}}^{\Phi-\Pi}$ определяется структурой правой части уравнения (1.1):

$$\delta\widehat{I}_{\mathbf{v}}^{\Phi-\Pi} = -D\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}^2} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}(\gamma \mathbf{v} \ldots). \qquad (4.6.3)$$

Для нахождения интенсивности источника $A_{\Phi-\Pi}$ воспользуемся выражением (5.5). Теперь в него вместо оператора Больцмана подставим (3). После некоторых преобразований получим следующее выражение:

$$A_{\Phi-\Pi} = 2\frac{D}{n}\,\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\,\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}\,\partial \mathbf{v}'}\left(\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}')\,f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)\right), \qquad (4.6.4)$$

$$D = \gamma\frac{kT}{m}.$$

Таким образом, интенсивность «молекулярного» источника флуктуаций определяется решением уравнения Фоккера — Планка (1.1). (Кавычки поставлены, так как роль молекул играют макроскопические броуновские частицы.)

С помощью формул (2), (4) найдем источники Ланжевена для «гидродинамических» функций при броуновском движении.

Из (4) следует, что интенсивность источника Ланжевена в уравнении для флуктуации плотности $\int \delta f\, d\mathbf{v}$ равны нулю, так как

$$\left\langle \int y(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)\, d\mathbf{v} \int y(\mathbf{r}', \mathbf{v}', t)\, d\mathbf{v}' \right\rangle = 0. \qquad (4.6.5)$$

Однако отлична от нуля интенсивность источника Ланжевена в уравнении для флуктуации скорости «среды»

$$\delta\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \int \mathbf{v}\,\delta f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)\, d\mathbf{v}, \qquad (4.6.6)$$

которая в общем случае зависит не только от времени, но и от координат. С помощью (4) находим следующее

выражение:

$$\left\langle \int v_i y(r, v, t)\, dv \int v'_j y(r', v', t')\, dv' \right\rangle = \\ = 2(D/n)\,\delta_{ij}\,\delta(r - r')\,\delta(t - t'). \quad (4.6.7)$$

Проведем сравнение для случая броуновского движения отдельной свободной частицы, когда при постоянном трении (ср. с (1.8), (1.9)) уравнение Ланжевена и статистические характеристики источника имеют вид

$$d\mathbf{v}/dt + \gamma\mathbf{v} = \mathbf{y}(t), \\ \langle \mathbf{y}(t)\rangle = 0, \quad \langle y_i(t)\, y_j(t')\rangle = 2D\delta_{ij}\delta(t - t'). \quad (4.6.8)$$

Рассмотрим соответствующее уравнение для средней по объему V скорости $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ для системы N броуновских частиц:

$$\delta\mathbf{u}_V = V^{-1} \int \delta\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)\, d\mathbf{r}. \quad (4.6.9)$$

Соответствующее уравнение Ланжевена по форме совпадает с (8):

$$d\delta\mathbf{u}_V/dt + \gamma\delta\mathbf{u}_V = \mathbf{y}_V(t). \quad (4.6.10)$$

Однако коррелятор источника Ланжевена определяется иным выражением:

$$\langle y_V(t)\, y_V(t')\rangle_{ij} = 2(D/N)\,\delta_{ij}\delta(t - t'), \quad N = nV. \quad (4.6.11)$$

Здесь интенсивность источника содержит фактор $1/N$ и, следовательно, при $N \gg 1$ мала по сравнению с соответствующим выражением из (8) для одной частицы.

Функция распределения в уравнении Фоккера — Планка (1.1), соответствующем уравнению Ланжевена (8), относится к ансамблю Гиббса, в котором каждая система ансамбля состоит из одной броуновской частицы. Если отдельная система ансамбля состоит из N броуновских частиц, то возникает возможность коллективного броуновского движения, при котором интенсивность источника Ланжевена в N раз меньше. Мы увидим в гл. 5, что аналогичная ситуация имеет место и для существенно более сложных систем, когда роль отдельной броуновской частицы играет, например, генератор Ван дер Поля.

Обратимся теперь к описанию диффузии броуновских частиц. Для этого используем уравнение Смолуховского для концентрации $\tilde{n}(\mathbf{r}, t)$ или функции распределения

$\tilde{f}(\mathbf{r}, t)$. С учетом источника Ланжевена оно имеет вид (3.10.1). В принятых здесь обозначениях $f^{(D)} \equiv y(\mathbf{r}, t)$.

Коррелятор силы Ланжевена $f^{(D)}$ (или $y(\mathbf{r}, t)$) определяется выражением (3.10.5). Оно так же, как и (4), может быть получено с помощью (5.5). При этом надо учесть, что оператор «столкновений» дается теперь выражением (ср. с (3))

$$\delta \hat{I}_{\mathbf{r}}^{\text{э}-\text{С}} = -D\partial^2/\partial \mathbf{r}^2, \qquad D = kT/m\gamma, \tag{4.6.12}$$

и что операторы в (5.5) действуют теперь на одновременной коррелятор (3.11.1).

С помощью выражения (3.10.5) найдем коррелятор источника Ланжевена в уравнении для среднего (по объему) значения вектора $\bar{\mathbf{r}}$ и запишем соответствующее уравнение Ланжевена:

$$\bar{\mathbf{r}}^V = N^{-1} \int\limits_V \mathbf{r}\tilde{n}(\mathbf{r}, t)\, d\mathbf{r}, \qquad d\bar{\mathbf{r}}^V/dt = \bar{y}^V = N^{-1} \int\limits_V \mathbf{r} y(\mathbf{r}, t)\, d\mathbf{r}, \tag{4.6.13}$$

$$\langle \bar{y}_i^V \bar{y}_j^V \rangle_{t,t'} = 2(D/N)\, \delta_{ij} \delta(t - t'). \tag{4.6.14}$$

С помощью (13), (14) находим средний квадрат смещения $\bar{r}^V$ за время $t - t_0$:

$$\langle (\bar{\mathbf{r}}_t^V - \bar{\mathbf{r}}_{t_0}^V)^2 \rangle = 3 \cdot 2(D/N)(t - t_0). \tag{4.6.15}$$

Проведем сравнение с известными результатами теории броуновского движения отдельной частицы. Уравнение Ланжевена в этом случае имеет вид

$$dr/dt = y(t), \qquad \langle y \rangle = 0, \qquad \langle y_i y_j \rangle_{t,t'} = 2D\delta_{ij}\delta(t - t'), \tag{4.6.16}$$

а средний квадрат смещения определяется формулой Эйнштейна

$$\langle (r_t - r_{t_0})^2 \rangle = 3 \cdot 2D(t - t_0). \tag{4.6.17}$$

Сравнение показывает, что выражение (15) для среднего квадрата смещения усредненного по объему вектора $\bar{\mathbf{r}}^V$ является аналогом формулы Эйнштейна (17). При этом эффективный коэффициент диффузии в выражении (15) в N раз меньше, так как формулы (14), (15) характеризуют коллективное движение в системе из N броуновских частиц.

В гл. 5 при рассмотрении диффузии фазы в генераторе Ван дер Поля мы столкнемся с аналогичной ситуа-

цией. Именно, в системе из N связанных генераторов возможны режимы, в которых коэффициент диффузии в N раз меньше, чем для отдельного генератора. В соответствии с этим в N раз сужается и ширина линии спектра колебаний в генераторе.

В 3.8, 4.5 и 4.6 мы рассмотрели примеры молекулярных источников Ланжевена в кинетической теории, в гидродинамике и в теории броуновского движения. Теперь рассмотрим вопрос о дополнительных источниках Ланжевена при значительном удалении от равновесного состояния, когда становится существенной как роль крупномасштабных флуктуаций, так и отклонений функций распределения от распределений для состояния локального равновесия. Напомним, что при решении возникающих при этом задач возможны два подхода.

Первый подход основан на совместном решении системы уравнений (1.6.3), (1.6.7) для функций f, $\langle\delta\tilde{N}\delta\tilde{N}\rangle$. При использовании метода Ланжевена уравнение (1.6.3) сохраняет прежний вид, но вместо (1.6.7) используется уравнение Ланжевена для флуктуации $\delta\tilde{N}(x, t)$. Была отмечена эквивалентность этих двух подходов. При этом, в частности, источник $A(x, x', t)$ в уравнении (1.6.7) для одновременного коррелятора совпадает с интенсивностью источника Ланжевена в (5.2).

Наконец, обе эти функции представляются в виде суммы двух вкладов (см. (1.5.9), (5.6)). Первый из них был назван *молекулярным*, а второй — *турбулентным*. Второй — турбулентный вклад определяется крупномасштабными флуктуациями, роль которых может быть особенно велика вдали от равновесного состояния. В настоящее время расчеты крупномасштабных флуктуаций производятся и в связи с исследованием аномальных кинетических коэффициентов (*Белый*, *Климонтович*, *Наливайко*, 1981; см. также *Климонтович* (ред.), 1988).

Второй подход основан на уравнении баланса энтропии (см. п. 1.9.2 и 4.5.3). В этом случае эффективная интенсивность источника Ланжевена (с учетом как крупномасштабных флуктуаций, так и отклонений функции распределения от распределения локального равновесия) определяется из условия равенства нулю среднего значения производства энтропии — из уравнения $\langle\tilde{\sigma}\rangle = 0$. Именно таким путем было получено выражение (1.9.23) в кинетической теории. Второй подход является более эффективным при рассмотрении состояний, далеких от равновесия.

Теперь проведем соответствующие расчеты для уравнений гидродинамики. Полученные результаты будут использованы в гл. 6, посвященной теории турбулентности, полезны они и в теории броуновского движения.

4.7. Турбулентные источники Ланжевена и флуктуационно-диссипационные соотношения в гидродинамике

Напомним, что выражения (1.9.22) и (5.10) для среднего производства энтропии при кинетическом описании были получены двумя способами. Их эквивалентность была отмечена в п. 4.5.3. Используем здесь, например, выражение (1.9.22). Из уравнения $\langle\tilde{\sigma}\rangle = 0$ была получена формула (1.9.23) для эффективного источника в кинетическом уравнении.

Найдем соответствующие выражения для эффективных источников Ланжевена в гидродинамике. Для перехода от кинетического описания к гидродинамическому можно использовать 13-моментное приближение Грэда, но для случайных функций $N(x, t) = nf$, т. е. с учетом крупномасштабных флуктуаций (*Климонтович*, IV, гл. 10, 13).

Сначала рассмотрим выражение для производства энтропии без учета источника Ланжевена $A(x, x', t)$. В этом приближении из формул (1.9.22), (5.10) следует выражение (ср. с гидродинамическим определением производства энтропии (2.6.13))

$$\langle\tilde{\sigma}_{\text{турб}}(\mathbf{r}, t)\rangle = (2\eta T)^{-1}\langle(\tilde{\pi}_{ij})^2\rangle + (\lambda T^2)^{-1}\langle(\tilde{\mathbf{S}})^2\rangle. \qquad (4.7.1)$$

Тензор вязких напряжений $\tilde{\pi}_{ij}$ и компонента вектора теплового потока $\tilde{S}_i$ определяются (3.8.2), (3.8.3) при $\delta\pi_{ij} = 0$ и $\delta S_i = 0$, т. е. без источников, отражающих наличие атомарной структуры.

Для примера рассмотрим несжимаемую жидкость, когда ρ, $T = \text{const}$, $\operatorname{div}\tilde{\mathbf{u}} = 0$. Тогда выражение (1) принимает вид (ср. с (2.6.15))

$$\langle\tilde{\sigma}_{\text{турб}}(\mathbf{r}, t)\rangle = (2\eta T)^{-1}\langle(\tilde{\pi}_{ij})^2\rangle \equiv$$
$$\equiv (2\eta T)^{-1}\left[\pi_{ij}^2 + \langle(\delta\tilde{\pi}_{ij})^2\rangle\right]. \qquad (4.7.2)$$

Здесь $\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u} + \delta\tilde{\mathbf{u}}$ и

$$\pi_{ij} = -\eta\left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i}\right), \quad \delta\tilde{\pi}_{ij} = -\eta\left(\frac{\partial\delta\tilde{u}_i}{\partial r_j} + \frac{\partial\delta\tilde{u}_j}{\partial r_i}\right). \qquad (4.7.3)$$

Индекс «турб» в (1), (2) подчеркивает, что мы рассматриваем лишь «турбулентные» вклады. Из (2) видно, что выражение для производства энтропии $\langle\tilde{\sigma}_{\text{турб}}\rangle$ представляется в виде суммы двух вкладов, определяемых гидродинамическим течением $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ (в частности, усредненным турбулентным течением и крупномасштабными — гидродинамическими флуктуациями $\delta\tilde{u}$). Такая структура позволяет провести два обобщения молекулярных кинетических коэффициентов (*Климонтович*, IV, гл. 13). Об этом уже кратко говорилось в 3.9.

Напомним, что молекулярная вязкость может быть определена двумя эквивалентными способами: по закону Ньютона для вязкого трения (*гидродинамическое* определение) и по формуле Грина — Кубо (3.9.2) через коррелятор источника Ланжевена $\delta\pi_{ij}$ (*флуктуационное* определение). Для состояний, далеких от равновесия, эти определения уже не являются эквивалентными и можно провести два обобщения, например, вязкости η: учесть влияние на вязкость гидродинамического движения и влияние крупномасштабных — турбулентных флуктуаций (пульсаций).

Первое обобщение приводит к уравнениям гидродинамики с нелинейной вязкостью, а второе — к турбулентной вязкости (*Климонтович*, IV, гл. 13, 24). Второе из этих обобщений будет использовано в гл. 6.

Обратимся теперь к выражению (1.9.23) для эффективного источника $A_{\text{эф}}$. Для перехода к гидродинамическому приближению и здесь используется 13-моментное приближение Грэда. В результате получаем выражения для обобщенных источников, введенных ранее в (3.8.8), (3.8.9) (*Климонтович*, IV),

$$A^{(\eta)}_{\text{турб}} = (\rho/2\eta)\,\langle(\tilde{\pi}_{ij})^2\rangle \equiv (\rho/2\eta)\left[\pi^2_{ij} + \langle(\delta\tilde{\pi}_{ij})^2\rangle\right]. \quad (4.7.4)$$

Соответствующий молекулярный источник имеет вид (3.8.10), (3.11.4).

Выражение для источника (4) лишь множителем $1/\rho T$ отличается от выражения (2) для среднего производства энтропии, обусловленного вязкостью. Для несжимаемой жидкости тензор $\tilde{\pi}_{ij}$ определяется формулами (3), а в общем случае — (3.8.2) при $\delta\pi_{ij} = 0$.

Таким образом, (4) также может служить для определения двух обобщенных вязкостей. Соответственно этому с помощью (4), (3.8.8) можно записать и два ФДС для состояний, сильно отличающихся от равновесного. Чтобы

получить эти ФДС, поступим следующим образом. Подставим выражение (4) в формулу (3.8.8), определяющую коррелятор случайной силы в уравнениях гидродинамики, и рассмотрим несжимаемую жидкость. Вместо $f^{(\eta)}$ используем обозначение $f^{(\eta)}_{\text{турб}}$. С учетом определения тензора $\tilde{\pi}_{ij}$ получим ФДС

$$\langle f^{(\eta)}_{\text{турб}} f^{(\eta)}_{\text{турб}} \rangle_{\mathbf{r},t,\mathbf{r}',t'} = \\ = 2\eta\rho \cdot \frac{1}{2} \langle (\partial \tilde{u}_i/\partial r_j + \partial \tilde{u}_j/\partial r_i)^2 \rangle \, \delta(t - t'). \quad (4.7.5)$$

Теперь введем две обобщенных вязкости:

$$\eta_{\text{ф}} = \eta \left(1 + \langle (\delta\pi_{ij})^2 \rangle^{-1} \pi_{ij}^2\right), \quad (4.7.6)$$

$$\eta_{\text{г}} \equiv \eta_{\text{турб}} = \eta \left(1 + \pi_{ij}^{-2} \langle (\delta\pi_{ij})^2 \rangle\right). \quad (4.7.7)$$

Индексы «ф» и «г» означают, что при записи (6) в основу положено флуктуационно-турбулентное определение вязкости, а при записи (7) — гидродинамическое.

С учетом определений $\eta_{\text{ф}}$, $\eta_{\text{турб}}$ получаем два примера ФДС в гидродинамике для состояний, далеких от равновесного, когда влияние молекулярного источника не является существенным:

$$\langle f^{(\eta)}_{\text{турб}} f^{(\eta)}_{\text{турб}} \rangle_{\mathbf{r},t,\mathbf{r}',t'} = 2\rho\eta_{\text{ф}} \cdot \frac{1}{2} \left\langle \left(\frac{\partial \delta\tilde{u}_i}{\partial r_j} + \frac{\partial \delta\tilde{u}_j}{\partial r_i} \right)^2 \right\rangle \delta(t - t'), \quad (4.7.8)$$

$$\langle f^{(\eta)}_{\text{турб}} f^{(\eta)}_{\text{турб}} \rangle_{\mathbf{r},t,\mathbf{r}',t'} = 2\rho\eta_{\text{турб}} \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right)^2 \delta(t - t'). \quad (4.7.9)$$

Конкретизируем выражения (6), (8) для случая однородной изотропной и стационарной турбулентности, когда средняя скорость равна нулю и, следовательно, $\delta\tilde{u}_i = \tilde{u}_i$, $\eta_{\text{ф}} = \eta$. Используем обозначение для параметра Колмогорова (*Колмогоров*, 1941) ε, определяющего диссипацию средней кинетической энергии в расчете на единицу массы в единицу времени:

$$\varepsilon = (\nu/2) \langle \partial\tilde{u}_i/\partial r_j + \partial\tilde{u}_j/\partial r_i)^2 \rangle, \qquad \nu = \eta/\rho. \quad (4.7.10)$$

Тогда выражение для коррелятора (8) можно записать в виде

$$\langle f^{(\eta)}_{\text{турб}} f^{(\eta)}_{\text{турб}} \rangle_{\mathbf{r},t,\mathbf{r}',t'} = 2\rho^2\varepsilon\delta(t - t'). \quad (4.7.11)$$

Этот результат принадлежит Е. А. Новикову (*Новиков*, 1964).

Мы видим, что для случая однородной изотропной и стационарной турбулентности интенсивность источника Ланжевена не зависит от координат и времени и определяется параметром Колмогорова.

Более общее выражение для турбулентной вязкости (7) будет использовано в гл. 6 при расчетах осредненного турбулентного течения в плоском канале и в трубе.

Теперь конкретизируем выражение (6), описывающее влияние осредненного турбулентного течения на вязкость. Из него следует, что это влияние зависит от характера флуктуаций и является наибольшим для масштабов порядка физически бесконечно малой длины. Выделяя этот вклад, представим выражение (6) в виде (*Климонтович*, 1981, IV)

$$\eta_{\text{ф}} \equiv \eta_{\text{эф}} = \eta\,[1 + \varepsilon_{\text{ф}}(\partial u_i/\partial r_j + \partial u_j/\partial r_i)^2], \qquad (4.7.12)$$
$$\varepsilon_{\text{ф}} = N_{\text{ф}} l_{\text{ф}}^2 / v_{\text{турб}}^2.$$

Подобная нелинейная вязкость введена в работе О. А. Ладыженской (*Ладыженская*, 1970) с целью регуляризации уравнения Навье — Стокса. При этом, однако, не был конкретизирован смысл малого параметра $\varepsilon_{\text{ф}}$. Для уравнения Навье — Стокса с нелинейной вязкостью (12) удалось доказать существование решения для всех времен.

Рассмотренным здесь способом можно дать определение и других кинетических коэффициентов: теплопроводности и диффузии.

В последние годы все больший интерес приобретают расчеты неравновесных флуктуаций в системах с переменным числом частиц — «элементарных» объектов. Это и химически реагирующие системы и частично ионизованная плазма, многие биологические системы. Рассмотрим соответствующие уравнения Ланжевена на примере плазмы с учетом процессов ионизации и рекомбинации.

4.8. Броуновское движение в системах с переменным числом частиц

Рассмотрим частично ионизованную плазму, состоящую из трех компонент — электронов, ионов и атомов. В такой системе во многих случаях можно выделить три этапа релаксации к равновесному состоянию. На первом этапе устанавливается равновесие по поступательным сте-

пеням свободы. На втором — равновесие по внутренним степеням свободы отдельных компонент. На последнем этапе устанавливается равновесие между компонентами — химическое равновесие.

Рассмотрим плазму после завершения первых двух этапов релаксации. Дальнейший процесс релаксации к равновесному состоянию можно описать на основе уравнений для концентраций отдельных компонент.

Из всех возможных химических процессов выделим (для иллюстрации) лишь один — процесс ионизации атомов электронным ударом и соответствующий процесс рекомбинации. Запишем сначала динамические уравнения для концентрации электронов n_e, ионов n_i и атомов $n_{\text{ат}}$. Обозначим через α коэффициент ионизации электронами, β — коэффициент рекомбинации электрона и иона в присутствии электрона. Уравнение для концентрации электронов имеет вид

$$dn_e/dt = \alpha n_e n_{\text{ат}} - \beta n_e^2 n_{\text{ат}}. \qquad (4.8.1)$$

К нему надо добавить еще два уравнения:

$$n_e = n_i, \; n_e + n_{\text{ат}} = n. \qquad (4.8.2)$$

Первое из них — условие равенства числа электронов и ионов. Второе — условие постоянства суммарного числа заряженных частиц, например электронов в свободном и связанном состояниях.

При установлении химического равновесия выполняется равенство

$$n_e n_i / n_{\text{ат}} = \alpha/\beta = (\mu kT/2\pi\hbar^2)^{3/2} z^{-1} \qquad (4.8.3)$$

— формула Саха.

Динамические уравнения (1), (2) соответствуют приближению сплошной среды. Для учета крупномасштабных флуктуаций в системе с химическими реакциями можно использовать один из изложенных выше методов. Используем метод Ланжевена. При этом можно выделить три задачи.

1. Вывод кинетических уравнений для функций распределения электронов, ионов и атомов частично ионизованной плазмы.

2. Введение источников Ланжевена в кинетические уравнения для частично ионизованной плазмы.

3. Переход от уравнений для функций распределения состояний электронов, ионов и атомов к уравнениям химической кинетики для флуктуирующих концентраций

электронов n_e, ионов $\tilde{n}_i$ и атомов $\tilde{n}_{ат}$. Отсылаем читателей за подробностями к литературе (*Климонтович*, II — IV; *Белый*, *Климонтович*, 1978); здесь приведем лишь простейший пример.

Рассмотрим флуктуации концентраций в равновесной частично ионизованной плазме. Через n_e, n_i, $n_{ат}$, как и выше, обозначим средние значения концентраций электронов, ионов и атомов. Они связаны формулой Саха (3). Через δn_e, δn_i, $\delta n_{ат}$ обозначим флуктуации этих величин. В состоянии равновесия флуктуации малы, поэтому можно использовать линейные уравнения Ланжевена:

$$d\delta n_e/dt + \lambda\delta n_e = \sqrt{D}\, y(t), \qquad (4.8.4)$$
$$\delta n_e = \delta n_i, \quad \delta n_e = -\delta n_{ат}.$$

Чтобы выделить флуктуационные явления, обусловленные только химическими превращениями, в (4) суммарное число заряженных частиц (в свободном и связанном состояниях) $N = Vn$ (V — объем системы) считаем заданным. Предполагается, фактически, также при записи уравнений (4), что числа частиц в каждой компоненте (N_e, N_i, $N_{ат}$) много больше единицы.

Коэффициент трения и интенсивность источника Ланжевена определяются выражениями

$$\lambda = \alpha(2n - n_e), \qquad D = (n_e/V)(n - n_e). \qquad (4.8.5)$$

При сделанных предположениях значения y распределены по закону Гаусса, поэтому достаточно знать два первых момента. Как и выше, они определяются выражениями

$$\langle y(t)\rangle = 0, \ \langle y(t)y(t')\rangle = 2\delta(t - t'). \qquad (4.8.6)$$

Из (5) вытекает, что интенсивность шума — коэффициент диффузии в соответствующем уравнении Фоккера — Планка можно представить в виде флуктуационно-диссипационного соотношения

$$D = \lambda\langle(\delta n_e)^2\rangle, \qquad (4.8.7)$$

которое является аналогом формулы Эйнштейна $D = \gamma kT/m$. Однако вместо дисперсии скорости (kT/m) в (7) входит дисперсия концентрации

$$\langle(\delta n_e)^2\rangle = (n_e/V)(n - n_e)/(2n - n_e). \qquad (4.8.8)$$

С помощью уравнений Ланжевена находим спектральную плотность флуктуаций концентрации

$$(\delta n_e)^2_\omega = [2\lambda/(\omega^2 + \lambda^2)]\,\langle(\delta n_e)^2\rangle. \qquad (4.8.9)$$

Дисперсия, а следовательно, и спектральная плотность $(\delta n_e)^2_\omega$ обращаются в нуль в двух предельных случаях: нулевая степень ионизации ($n_e = 0$) и полностью ионизованная плазма ($n_e = n$).

От уравнения Ланжевена можно перейти к уравнению Фоккера — Планка для функции распределения концентрации $f(\delta n_e, t)$. Оно имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial (\delta n_e)} + \frac{\partial}{\partial \delta n_e} (\lambda \delta n_e f). \qquad (4.8.10)$$

Равновесное решение этого уравнения — распределение Гаусса.

Итак, рассмотрен простейший пример расчета молекулярных флуктуаций в равновесной химически реагирующей системе. Практическое значение имеют, естественно, задачи расчета молекулярных и турбулентных флуктуаций в химически реагирующих системах. Этому вопросу в настоящее время посвящена большая литература. Для примера приведем книги (*Полак*, *Михайлов*, 1983; *Курамото*, 1984), посвященные теории колебаний, волн и турбулентности в химически реагирующих системах*).

---

*) Дополнением к 4.1—4.4 может служить работа *Klimontovich Yu. L.* Ito, Stratonivich and Kinetic Forms of Stochastic Equations // Physica A. 1990. V. 163. P. 515.

Глава 5

ЭНТРОПИЯ БОЛЬЦМАНА — ГИББСА — ШЕННОНА — КРИТЕРИЙ ОТНОСИТЕЛЬНОЙ СТЕПЕНИ УПОРЯДОЧЕННОСТИ В ОТКРЫТЫХ СИСТЕМАХ

В настоящей главе рассматриваются многочисленные примеры эволюции в открытых нелинейных диссипативных системах как во времени, так и в пространстве управляющих параметров. В качестве основного критерия относительной степени упорядоченности неравновесных состояний, а следовательно и критерия самоорганизации, используются значения энтропии Больцмана — Гиббса — Шеннона, перенормированные на заданное значение средней эффективной энергии. Тем самым анализ степени упорядоченности основывается на S-теореме, сформулированной в 1.12, 1.13.

Объектами исследования служат различного рода генераторы как в непрерывном, так и в дискретном времени. Последнее дает возможность использовать S-теорему и при наличии динамического хаоса. Рассматривается также простейший пример «среды» из связанных генераторов Ван дер Поля. Это позволяет продемонстрировать роль коллективных эффектов в процессах самоорганизации.

5.1. Генератор Ван дер Поля

5.1.1. Математическая модель. Генератор Ван дер Поля является диссипативной системой, поэтому согласно флуктуационно-диссипационным соотношениям для полного описания процесса генерации необходим учет флуктуаций.

С целью упрощения последующего анализа используем уравнения, симметризованные по нелинейности. Тогда динамические уравнения для обобщенной координаты x и скорости v можно записать в виде

$$\begin{aligned} dx/dt + (1/2)(-a + bE)x = v, \\ dv/dt + (1/2)(-a + bE)v + \omega_0^2 x = 0. \end{aligned} \tag{5.1.1}$$

Здесь введены обозначения для эффективной энергии колебаний

$$E = (1/2)\left(v^2 + \omega_0^2 x^2\right), \qquad E \equiv H(x, v) \tag{5.1.2}$$

с собственной частотой ω_0 и параметра нелинейного трения b. Параметр

$$a = a_н - \gamma, \tag{5.1.3}$$

где $a_н$ — параметр обратной связи (параметр накачки), γ — коэффициент линейного трения.

Из уравнений (1) следует точное (без усреднения по периоду) уравнение для энергии колебаний:

$$dE/dt = (a - bE)E. \tag{5.1.4}$$

Приведенная система уравнений для генератора Ван дер Поля имеет точное решение:

$$\begin{aligned} x(t) = \omega_0^{-1}(2E(t))^{1/2}\cos(\omega_0 t + \varphi_0), \\ v(t) = -(2E(t))^{1/2}\sin(\omega_0 t + \varphi_0), \end{aligned} \tag{5.1.5}$$

$$E(t) = E_0(a/b)\left[E_0 - (E_0 - a/b)\exp(-at)\right]^{-1}. \tag{5.1.6}$$

Эти формулы определяют временную эволюцию по заданным значениям энергии E_0 и фазы φ_0 в начальный момент времени $t = 0$. Характер эволюции существенно зависит от знака a. При $a < 0$ система приходит в состояние покоя с $E = 0$, а при $a > 0$ устанавливается стационарное колебание с частотой ω_0 и энергией *предельного цикла* $E = a/b$.

Для описания стохастического движения в генераторе в уравнения движения надо ввести соответствующие источники Ланжевена. Здесь удобнее использовать уравнение Фоккера — Планка для функций распределения $f(x, v, t)$, $f(E, t)$. Уравнение Фоккера — Планка для распределения энергии уже использовалось нами ранее (см. (3.7.15)). При этом коэффициент диффузии, определяемый тепловыми флуктуациями, зависел от энергии колебаний (см. (3.7.17)). Практически интересен также случай, когда флуктуации задаются внешним источником

с постоянной интенсивностью D. Тогда уравнение для $f(E, t)$ имеет вид

$$\frac{\partial f(E, t)}{\partial t} = D\frac{\partial}{\partial E}\left(E\frac{\partial f}{\partial E}\right) + \frac{\partial}{\partial E}[(-a + bE)Ef]. \quad (5.1.7)$$

При сравнении с уравнением (3.7.15) надо иметь в виду, что здесь изменен знак $a (a = a_н - \gamma)$.

Стационарное решение уравнения (7) также представим в форме канонического распределения Гиббса

$$f(E, a) = \exp[(F - H(E))/D], \; H(E) = -aE + (1/2)bE^2,$$
$$\int_0^\infty f\,dE = 1. \quad (5.1.8)$$

Здесь $H(E)$ — эффективная функция Гамильтона, F — соответствующая свободная энергия.

5.1.2. Н-теорема для генератора Ван дер Поля. Напомним, что в 1.11 для генератора Ван дер Поля Н-теорема сформулирована в двух разных формах: для энтропии Кульбака — неравновесной свободной энергии — и для энтропии Больцмана — Гиббса — Шеннона.

При формулировке Н-теоремы для энтропии Больцмана — Гиббса — Шеннона использовалось дополнительное условие — постоянство среднего значения эффективной функции Гамильтона $H(E)$ (см. (1.11.15))

$$\int_0^\infty H(E)\tilde{f}(E, a)\,dE = \int_0^\infty H(E)f(E, t)\,dE \quad (5.1.9)$$

и было установлено уравнение (1.11.16). Запишем его:

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} = \tilde{D}\{\tilde{f}\}\frac{\partial}{\partial E}\left(E\frac{\partial \tilde{f}}{\partial E}\right) + \frac{\partial}{\partial E}\left(\frac{dH(E)}{dE}E\tilde{f}\right). \quad (5.1.10)$$

В отличие от (7) это уравнение является нелинейным, так как перенормированный коэффициент диффузии — функционал распределения $\tilde{f}$. Из уравнения (10) и вытекает Н-теорема для перенормированной энтропии Больцмана — Гиббса — Шеннона (1.11.17). Запишем ее в явном виде:

$$\frac{d\tilde{S}}{dt} = \int_0^\infty \frac{\tilde{D}E}{\tilde{f}}\left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial E} + \frac{1}{\tilde{D}}\frac{dH}{dE}\tilde{f}\right)^2 dE \geqslant 0. \quad (5.1.11)$$

Производство энтропии обращается в нуль в стационарном состоянии, когда $\tilde{D} = D$ и распределение $\tilde{f}$ совпадает с (8).

Рост энтропии в процессе эволюции к стационарному состоянию обусловлен тем, что фиксированные параметры $a_н$, γ, b, D определяют лишь стационарное распределение (8). При этом остается произвол в выборе начального распределения. Это и открывает возможность для роста энтропии. Она остается неизменной лишь при условии, что начальное состояние совпадает со стационарным.

Наряду с временной эволюцией, в открытых системах интересен, как уже отмечалось в 1.12, 1.13, процесс эволюции стационарных состояний в пространстве управляющих параметров. Критерий относительной степени упорядоченности неравновесных состояний может быть основан на S-теореме. Проиллюстрируем это на примере генератора Ван дер Поля.

5.1.3. S-теорема. Самоорганизация в генераторе Ван дер Поля. Впервые S-теорема была сформулирована на примере генератора Ван дер Поля (*Климонтович*, 1983). За управляющий в этом случае естественно принять параметр обратной связи $a_н$.

Вернемся к распределению (8) и запишем его для трех состояний.

(1). В соответствии с определением (1.1.1) выделим состояние физического хаоса. При $a_н = 0$ для него из (8) следует ($Db/\gamma^2 \ll 1$)

$$f_{(1)} = (\gamma/D)\exp(-\gamma E/D). \qquad (5.1.12)$$

(2). Порог генерации ($a_н = \gamma$)

$$f_{(2)} = \sqrt{\frac{2b}{\pi D}}\exp\left(-\frac{bE^2}{2D}\right). \qquad (5.1.13)$$

(3). Режим развитой генерации ($\varepsilon = Db/a^2 \ll 1$, но $a/\gamma \ll 1$)

$$f_{(3)} = \sqrt{\frac{b}{2\pi D}}\exp\left(-\frac{(E-a/b)^2}{2D/b}\right). \qquad (5.1.14)$$

Соответствующие значения энтропии и средней энергии удовлетворяют неравенствам

$$S_{(1)} < S_{(2)} < S_{(3)}, \qquad \langle E\rangle_{(1)} < \langle E\rangle_{(2)} < \langle E\rangle_{(3)}. \qquad (5.1.15)$$

Таким образом, при переходе от хаоса к области развитой генерации, (1)→(3), энтропия возрастает, но при этом *увеличивается* и средняя энергия.

Согласно S-теореме для сравнения степени упорядоченности выделенных состояний используем значения энтропии, перенормированной к заданному значению

средней энергии. Перенормировка осуществляется путем изменения значений интенсивности шума в распределениях (12)—(14):

$$\widetilde{D}_{(1)} = \gamma a/b, \quad \widetilde{D}_{(2)} = (\pi/2)\, a^2/b, \quad \widetilde{D}_{(3)} = D. \qquad (5.1.16)$$

В результате находим перенормированные значения энтропии

$$\widetilde{S}_{(1)} = \ln\frac{a}{b} + 1, \quad \widetilde{S}_{(2)} = \ln\frac{\pi a}{2b} + \frac{1}{2}, \quad \widetilde{S}_{(3)} = \ln\sqrt{\frac{2\pi D}{b}} + 1, \qquad (5.1.17)$$

которые удовлетворяют неравенствам

$$\widetilde{S}_{(1)} > \widetilde{S}_{(2)} > \widetilde{S}_{(3)}. \qquad (5.1.18)$$

Этот результат и является простейшей иллюстрацией S-теоремы: *по мере увеличения управляющего параметра — параметра обратной связи* $a_н$ *— энтропия*, перенормированная к заданному значению, *уменьшается* и, следовательно, *имеет место процесс самоорганизации.* Перенормировка осуществляется изменением интенсивности шума. При этом (см. (16)) выполняется неравенство (1.12.7).

Выбор в качестве управляющего параметра величины $a_н$ для генератора Ван дер Поля представляется очевидным. Правильность этого выбора подтверждается результатом. Именно, перенормированная энтропия с увеличением параметра $a_н$ убывает монотонно.

Мы увидим, что для соответствующего генератора в дискретном времени положение существенно иное. Анализ показывает, что в области динамического хаоса параметр $a_н$ является управляющим, т.е. по мере его увеличения перенормированная энтропия уменьшается, лишь в ограниченной области значений параметра $a_н$. Основываясь на S-теореме, можно, тем самым, проконтролировать правильность выбора управляющего параметра для разных участков области его возможного изменения. Более того, мы увидим, что при наличии нескольких управляющих параметров открывается возможность проводить на основе S-теоремы оптимизацию выбора наиболее упорядоченных состояний.

5.1.4. Локальная форма S-теоремы для генератора Ван дер Поля. Конкретизируем для рассматриваемого примера выражение (1.13.7), определяющее скорость изменения энтропии по $a_н$. В формулы (1.13.2), (1.13.4) надо

подставить выражения $U = -a_н E$, $H = \gamma E$. В результате получаем простую формулу для эффективной силы

$$F_{эф} = (1 + (\gamma/D)\,|d\bar{D}/da_н|)\,E. \qquad (5.1.19)$$

Это позволяет в явном виде записать уравнение баланса энтропии:

$$dS/da_н = -a_н(1 + (\gamma/D)\,|d\bar{D}/da_н|)\langle(\delta E)^2\rangle < 0. \quad (5.1.20)$$

Мы видим, что скорость убывания энтропии пропорциональна величине $a_н$ и дисперсии флуктуаций энергии.

Во избежание недоразумений заметим, что область развитой генерации выделяется двумя условиями (14). Второе из них ограничивает сверху возможные значения параметра a/γ. В противном случае вместо (7) надо использовать более общее уравнение Фоккера — Планка (3.7.15), в котором коэффициент диффузии зависит от энергии колебаний и, следовательно, от значения параметра $a_н$.

5.1.5. Энтропия Шеннона — «S-информация». Г. Хакен предложил использовать энтропию Шеннона для расчета информации в процессах самоорганизации (*Хакен*, 1986, 1985, 1988). Для генератора Ван дер Поля при использовании распределения $f(E)$ информация I совпадает с энтропией Больцмана — Гиббса — Шеннона:

$$I \equiv S = -\int \ln f(E)\, f(E)\, dE. \qquad (5.1.21)$$

Г. Хакен назвал выражения вида (21) «S-информацией». Этим подчеркивается роль Шеннона (Shannon) в развитии теории информации.

Для иллюстрации проведем сравнение значений перенормированной энтропии $\bar{S}$ с соответствующими значениями S-информации.

С помощью формул (21), (13), (14) найдем разность информаций для состояния (3) — режима развитой генерации и состояния (2) — порога генерации:

$$I_{(3)} - I_{(2)} = \ln 2 > 0. \qquad (5.1.22)$$

Мы видим, что при переходе от порога генерации к режиму развитой генерации происходит увеличение информации на величину $\ln 2$. Это обусловлено следующим: в состоянии (2) работает лишь одна половина распределения (13), так как энергия $E > 0$, а в состоянии (3) работают обе «половины» распределения (14). Тем самым вдвое увеличивается число «возможностей», что и определяет разность информаций (22).

Расчет S-информации несомненно полезен. Однако он не отражает наличия процесса самоорганизации в генераторе при увеличении обратной связи. Это проявляется в том, что при переходе от порога генерации к области развитой генерации прирост информации (22) не зависит от значения управляющего параметра $a_н$. Разность же перенормированных энтропий для тех же состояний определяется согласно формуле (17) выражением

$$\tilde{S}_{(2)} - \tilde{S}_{(3)} = \frac{1}{2}\left(\ln\frac{\pi}{8\varepsilon} - 1\right), \quad \varepsilon = \frac{Dp}{a^2} \ll 1, \quad (5.1.23)$$

и увеличивается по мере роста управляющего параметра $a_н$.

В дальнейшем мы продолжим сравнение различных критериев степени упорядоченности с критерием, основанным на S-теореме. А теперь перейдем к рассмотрению более сложных примеров.

5.2. Генератор с инерционной нелинейностью

Движение в генераторе Ван дер Поля является двухмерным. В этом случае имеются лишь *простые* аттракторы — состояние покоя и предельный цикл. Рассмотрим простейшие примеры систем, в которых наряду с простыми имеются и *странные* аттракторы.

Странные аттракторы — области в фазовом пространстве системы, в которых траектории динамически неустойчивы, имеет место экспоненциальное расхождение траекторий и, как следствие, положительность энтропии Крылова — Колмогорова — Синая.

После классических работ Э. Лоренца (*Лоренц*, 1963) и Д. Рюэлля и Ф. Такенса (*Рюэлль*, *Такенс*, 1971) стало ясно, что странные аттракторы могут существовать в маломерных (с числом степеней свободы $N \geqslant 3$) системах. Этому вопросу в настоящее время посвящена большая литература. К числу наиболее удобных для экспериментального и численного исследования сложных движений в «простых» системах относится, несомненно, генератор с инерционной нелинейностью. Он был впервые предложен К. Ф. Теодорчиком (*Теодорчик*, 1945; см. также *Ланда*, 1980; *Анищенко*, 1990).

Генератор Теодорчика отличается от генератора Ван дер Поля наличием в колебательном контуре термосопротивления, благодаря которому и возникает инерционная нелинейность. Однако, как показали проведенные иссле-

дования, такого рода нелинейность в автономном генераторе еще недостаточна для возникновения странных аттракторов. Для генерации сложных движений в работах В. С. Анищенко и его сотрудников (*Анищенко*, *Астахов*, 1983; *Анищенко*, 1990) предложен *модифицированный генератор с инерционной нелинейностью*, в котором введена дополнительная обратная связь с инерционным преобразователем. При этом характер движения существенно зависит от степени асимметрии нелинейной характеристики инерционного преобразователя. Наиболее разнообразные каскады бифуркаций в модифицированном генераторе с инерционной нелинейностью наблюдаются при использовании полупериодного детектора.

В связи с открытием странного аттрактора (*Лоренц*, 1963) заметим следующее. «Странные» нерегулярные решения нелинейных уравнений того же типа, что и уравнения Лоренца, были обнаружены независимо (*Грасюк*, *Ораевский*, 1964; см. также *Ораевский*, 1986) при исследовании колебаний в молекулярном генераторе. Этому, однако, не было уделено достаточного внимания, так как для молекулярных генераторов такого рода сложные, нерегулярные режимы колебаний не представлялись интересными. Напротив, появление сложных — хаотических режимов колебаний для Лоренца было весьма существенным, поскольку проливало свет на причины практической невозможности (в то время) долгосрочного прогноза погоды.

Итак, оказалось, что одним из наиболее удобных объектов для исследования стохастических колебаний является модифицированный генератор с инерционной нелинейностью.

В работах (*Анищенко*, *Астахов*, 1983; *Анищенко*, 1990) путем радиофизического и численного экспериментов было установлено, что по мере увеличения параметра обратной связи (при фиксированном значении параметра инерционности) в генераторе возникает последовательность удвоения периода колебаний по схеме Фейгенбаума (*Фейгенбаум*, 1983; см. также более ранний обзор *Мэя*, 1976). За критической точкой Фейгенбаума возникает странный аттрактор со сложным чередованием областей хаоса и порядка. Было продемонстрировано прекрасное соответствие результатов физического и численного экспериментов. Такое соответствие показывает, в частности, что в широких областях значений управляющего параметра естественные и технические шумы в генераторе

не меняют качественно поведение системы. Этот вывод не касается, однако, критических областей — областей в непосредственной близости к точкам бифуркаций, поскольку в них флуктуации всегда играют существенную роль.

В работе (*Анищенко, Климонтович*, 1984) для количественной оценки степени хаотичности различных состояний генератора с инерционной нелинейностью использован предложенный ранее критерий (*Климонтович*, 1983) на основе S-теоремы.

Расчет энтропии проводился по схеме, описанной выше. Перенормировка функций распределения осуществлялась при заданной интенсивности колебаний (аналог условия (9)). Исследовалась область значений параметра обратной связи до критической точки Фейгенбаума. Результаты расчета показали, что по мере приближения к области странного аттрактора, т. е. в процессе удвоения периода колебаний, перенормированная на заданное значение интенсивности колебаний энтропия уменьшалась. Это свидетельствует о возрастании степени упорядоченности. Иными словами, последовательность удвоения периода можно рассматривать как процесс самоорганизации.

Расчет энтропии для самой области странного аттрактора в генераторе с инерционной нелинейностью пока не проводился. Эту задачу целесообразно рассмотреть сначала на более простом примере одномерного процесса в дискретном времени, который описывается известным *логистическим уравнением*

$$x_{n+1} = \alpha(1 - x_n)x_n \quad (0 \leqslant \alpha \leqslant 4,\ 0 \leqslant x \leqslant 1), \qquad (5.2.1)$$

которое широко используется в экологии и в биофизике (*Мэй*, 1976; *Шапиро, Луппов*, 1983; *Базыкин*, 1985). В уравнении (1) шаг дискретного времени равен единице. Ниже рассматривается последовательность рекуррентных уравнений с двумя управляющими параметрами: параметром обратной связи и шагом дискретного времени.

Использование таких уравнений открывает новый путь построения одномерных математических моделей сложного движения. При этом возможность сложного движения обусловлена не выходом с плоскости в пространство, как при замене генератора Ван дер Поля генератором с инерционной нелинейностью, а переходом к дискретному времени. Оценка относительной степени упорядоченности и здесь будет проводиться на основе S-теоремы.

В последние годы широко обсуждается вопрос о связи турбулентного движения и сложного движения в маломерных (с $N \geqslant 3$) системах.

Традиционный способ описания турбулентности базируется на гипотезе Рейнольдса, согласно которой уравнение Навье — Стокса считается справедливым и для случайных пульсаций поля скорости. В теории термодинамических флуктуаций гипотезе Рейнольдса соответствует гипотеза Онзагера. Последняя имеет обоснование в статистической физике. Вопрос же обоснования уравнений теории турбулентности в значительной мере остается открытым, хотя в этом направлении и проводятся интенсивные исследования (см. гл. 6 и список литературы).

В связи с этим интересен и важен сравнительный анализ различных способов описания сложного движения в «простых» динамических системах.

Прежде всего заметим, что с помощью одномерного логистического уравнения (1) — *уравнения последования* можно качественно описать каскад бифуркаций удвоения периода колебаний в генераторе с инерционной нелинейностью, а также некоторые закономерности картины бифуркаций в области динамического хаоса — странного аттрактора. Таким образом, одномерное уравнение в дискретном времени (1) моделирует существенные свойства системы трех дифференциальных уравнений. Это оказывается возможным в силу специфики диссипативных свойств генератора с инерционной нелинейностью (малой дробной части фрактальной размерности) вблизи бифуркационной линии на плоскости двух управляющих параметров (обратная связь и время инерционности).

В дальнейшем мы увидим, что на основе логистического уравнения (1) можно построить последовательность разностных уравнений и соответствующих им дифференциальных уравнений, которые служат математическими моделями обобщенных генераторов в дискретном и непрерывном времени, но сначала продолжим анализ генератора Ван дер Поля.

5.3. Инвариантные меры. Примеры распределений Гиббса для открытых систем

5.3.1. Инвариантные меры — стационарные распределения. Движения в нелинейных диссипативных системах были разделены на два класса: динамические и стохастические. В основу такого разделения поло-

жено свойство *воспроизводимости движения* при численном эксперименте по заданным начальным условиям.

В диссипативных системах, как уже неоднократно отмечалось, в силу флуктуационно-диссипационных соотношений (гл. 3) проявление шумов — флуктуаций неизбежно. Вследствие этого динамическое описание диссипативных систем следует рассматривать лишь как идеализацию, подобную, например, идеализации обратимых — квазистатических процессов в термодинамике. Степень допустимости этой идеализации уменьшается по мере приближения к точкам бифуркации. В самих точках бифуркации дипамическое описание — описание без учета флуктуаций — вообще невозможно.

На этом основании полное описание процессов в открытых диссипативных системах проводится либо на основе уравнений Ланжевена — динамических уравнений с дополнительными случайными источниками, либо на основе соответствующих уравнений для функций распределения. В соответствии с этим инвариантные меры — стационарные распределения могут быть найдены двумя способами. 1. Путем решения уравнений для функций распределения. 2. По реализации уравнения Ланжевена или (в более грубом приближении) по реализации — решению динамического уравнения.

При использовании способа 2, т. е., в частности, динамических уравнений, надо иметь в виду, что исключение роли флуктуаций может производиться двумя принципиально различными способами. Поясним это на примере уравнений для генератора Ван дер Поля.

Вернемся к динамическим уравнениям (1.1) для обобщенной координаты и скорости и введем динамическую функцию распределения в пространстве x, v:

$$f^{(\text{д})}(x,\ v,\ t)=\delta(x-x(t))\,\delta(v-v(t)). \qquad (5.3.1)$$

По структуре она напоминает микроскопическое распределение (1.2.5). Однако теперь функции $x(t)$, $v(t)$ являются макроскопическими характеристиками при динамическом описании диссипативной системы. Нетрудно убедиться с помощью (1.1), что распределение (1) удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial f^{(\text{д})}}{\partial t}+v\frac{\partial f^{(\text{д})}}{\partial x}-\omega_0^2 x\frac{\partial f^{(\text{д})}}{\partial v}=$$
$$=\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}[(-a+bH(x,v))xf^{(\text{д})}]+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial v}[(-a+bH(x,v))\,vf^{(\text{д})}]. \qquad (5.3.2)$$

Приведем теперь соответствующее уравнение Фоккера — Планка для функции распределения $f(x, v, t)$. Для этого в динамические уравнения (1.1) введем источники Ланжевена. Для естественных флуктуаций интенсивность источника определяется по схеме, рассмотренной в 4.2, и из-за нелинейности уравнений Ланжевена зависит от энергии колебаний. Рассмотрим случай шума с заданной интенсивностью D. Тогда уравнение Фоккера — Планка имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v\frac{\partial f}{\partial x} - \omega_0^2 x\frac{\partial f}{\partial v} = \frac{D}{2\omega_0^2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{D}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial v^2} +$$

$$+ \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}[(-a + bH(x, v))xf] + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial v}[(-a + bH(x, v))vf]. \tag{5.3.3}$$

Сопоставление уравнений (2), (3) показывает, что имеются две возможности исключения источника флуктуаций. Рассмотрим их по отдельности.

Интенсивность шума тождественно равна нулю, т. е. $D \equiv 0$. При этом (3) совпадает с (2) для динамического распределения (1). Последнее определяется решением динамических уравнений (1.1). Таким образом, условие $D \equiv 0$ означает, что источники Ланжевена равны нулю, и задача сводится к решению динамических уравнений.

Чтобы найти инвариантную меру — стационарное распределение для динамической системы, надо после нахождения функции $f^{(д)}(x, v, t)$ по решению динамических уравнений произвести усреднение по времени. В результате приходим к распределению

$$f^T(x, v, t) = T^{-1}\int_t^{t+T} \delta(x - x(t'))\,\delta(v - v(t'))\,dt', \tag{5.3.4}$$

которое в общем случае зависит как от текущего времени t, так и от интервала усреднения T. Подобное выражение уже встречалось нам при анализе соотношения временных и фазовых средних. Инвариантная мера — стационарное распределение — существует, если можно найти интервал усреднения T (или нижнюю границу T), когда в (4) исчезает зависимость как от t, так и от интервала усреднения.

Для примера найдем инвариантную меру для генератора Ван дер Поля в динамическом приближении. Стационарное решение определяется формулами (1.5), (1.6).

При этом $E(\infty) = a/b$. Установление происходит за время

$$\tau_{\text{уст}} \sim 1/a \tag{5.3.5}$$

и, следовательно, существенно зависит от близости к точке бифуркации рождения предельного цикла $a = 0$. Итак, при $t - t_0 > 1/a$ устанавливается периодическое движение

$$\begin{aligned} x(t) &= \omega_0^{-1}(2a/b)^{1/2}\cos(\omega_0 t + \varphi_0), \\ v(t) &= -(2a/b)^{1/2}\sin(\omega_0 t + \varphi_0). \end{aligned} \tag{5.3.6}$$

Подставим это решение в (4) и усредним по периоду $T = 2\pi/\omega_0$. В результате придем к распределению

$$\begin{aligned} &\tilde{f} = T^{-1}\int_0^T f^{(\text{д})}(x, v, t)\,dt = C\delta(H(x, v) - a/b), \\ &\int \tilde{f}\,dx\,dv = 1, \end{aligned} \tag{5.3.7}$$

которое совпадает с микроканоническим распределением Гиббса при движении на предельном цикле с энергией $H(x, v) = a/b$.

Этот результат является естественным, поскольку для периодического движения нет необходимости совершать предельный переход $T \to \infty$ — усреднение проводится по периоду $T = 2\pi/\omega_0$.

На этом простейшем примере эргодической системы можно пояснить ряд вопросов, существенных при описании неравновесных процессов в открытых системах.

Временное среднее определяется интегралом по заданному интервалу T. Такое усреднение вносит неопределенность в динамическое описание, поскольку в общем случае нельзя восстановить функцию по заданному интегралу. Вносимая при временном усреднении неопределенность в силу условия эргодичности отвечает соответствующей неопределенности при использовании ансамбля Гиббса.

Покажем, что усреднение по периоду эквивалентно ансамблю Гиббса из генераторов Ван дер Поля с равномерным распределением по фазам. Для этого найдем распределение координаты гармонического осциллятора $f(x) = \int f(x, v)\,dv$:

$$f(\bar{x}) = \pi^{-1}(1 - \bar{x}^2)^{-1/2}, \tag{5.3.8}$$

$$\int_{-1}^{1} f(\bar{x})\,d\bar{x} = 1, \quad \bar{x} = x\omega_0(2a/b)^{-1/2},$$

и соответствующее распределение по фазе. Учтем, что $\bar{x} = -\cos\varphi$. Тогда

$$f(\varphi) = f(\bar{x})\, d\bar{x}/d\varphi = \pi^{-1}, \quad \int_0^{\pi} f(\varphi)\, d\varphi = 1. \qquad (5.3.9)$$

Таким образом, мы пришли к равномерному распределению по фазам. Соответствующее распределение энергии имеет, очевидно, вид

$$f(E) = \delta(E - a/b). \qquad (5.3.10)$$

Вернемся теперь к уравнению Фоккера — Планка (3) и рассмотрим его стационарные решения при различных соотношениях параметров.

5.3.2. Распределения Гиббса для генератора Ван дер Поля. Нетрудно проверить, что стационарное решение уравнения (3) можно записать в виде

$$f(x, v) = C \exp[-(H(x, v) - a/b)^2 (2D/b)^{-1}],$$
$$\int f\, dx\, dv = 1. \qquad (5.3.11)$$

Мы видим, что, как и равновесные распределения Гиббса, распределение (11) полностью определяется видом функции Гамильтона $H(x, v)$ (1.2). Однако в отличие от распределений Гиббса форма зависимости от $H(x, v)$ характеризуется двумя энергетическими параметрами: энергией a/b и эффективной температурой D/γ. В зависимости от соотношения этих параметров можно выделить два предельных распределения.

1. *Микроканоническое распределение Гиббса.* В режиме развитой генерации, когда параметр $\varepsilon = Db/a^2 \ll 1$ (см. (1.14)), распределение следует из (11) в нулевом приближении по ε (т. е. в пределе $D \to 0$):

$$f(x, v) = C\delta(H(x, v) - a/b),$$
$$C^{-1} = \int \delta(H(x, v) - a/b)\, dx\, dv. \qquad (5.3.12)$$

Мы пришли, таким образом, к микроканоническому распределению на поверхности энергии предельного цикла.

2. *Каноническое распределение Гиббса.* Рассмотрим невозбужденный генератор, когда обратная связь равна нулю, т. е. $a_н = 0$, $a = -\gamma < 0$. В этом случае распределение (11) характеризует пассивную нелинейную дис-

сипативную систему. Рассмотрим, как и выше (см. (1.12)), генератор с малой нелинейностью, когда параметр

$$b\langle H(x, v)\rangle\gamma^{-2} \ll 1. \qquad (5.3.13)$$

В нулевом приближении по этому параметру из (11) и следует каноническое распределение Гиббса:

$$f(x, v) = C\exp\left(-\frac{H(x, v)}{D/\gamma}\right), \quad \int f\,dx\,dv = 1. \quad (5.3.14)$$

Таким образом, микроканоническое и каноническое распределения Гиббса (12), (14) являются предельными случаями более общего стационарного распределения (11) для генератора Ван дер Поля, т. е. для открытой нелинейной диссипативной системы.

Естественно, что соответствующие предельные распределения следуют и из стационарного распределения энергии (1.8). Действительно, в нулевом приближении по параметру $\varepsilon = Db/a^2$ из (1.8) или из (1.14) следует микроканоническое распределение (12). В другом предельном случае — для невозбужденного генератора — из (1.8) следует распределение (1.14) — каноническое распределение Гиббса с эффективной температурой D/γ.

Итак, для генератора Ван дер Поля мы показали, что инвариантное распределение, получаемое усреднением по времени решения динамических уравнений, совпадает с микроканоническим распределением. Последнее следует из (11) в пределе $D \to 0$. Тем самым для системы с простым аттрактором — предельным циклом, выделенные два предельных случая по интенсивности ($D \equiv 0$ в исходных уравнениях, $D \to 0$ в решении уравнения Фоккера — Планка) оказываются эквивалентными при нахождении инвариантного распределения.

Однако уравнение Фоккера — Планка позволяет найти и более общее решение (11), справедливое при всех значениях $a_н$, D (в частности, и на пороге генерации). Более того, для невозбужденного генератора оно приводит к каноническому распределению Гиббса (14).

Описанная сравнительно простая ситуация имеет место лишь для систем с простыми аттракторами (состояния покоя, предельные циклы). При наличии странных аттракторов ситуация существенно усложняется. Вопрос о соотношении статистического и динамического описаний при определении инвариантных — стационарных распределений становится при этом гораздо более трудным, но и более интересным и более важным для практиче-

ских приложений. Существенно возрастает и роль флуктуаций.

Динамическому и статистическому описанию систем со странными аттракторами посвящается следующий материал настоящей главы. Здесь же уместен лишь один пример, позволяющий сравнить распределение (8) для координаты с распределением переменной, удовлетворяющей логистическому уравнению (2.1) при наибольшем значении управляющего параметра $\alpha = 4$. Получаемое при этом инвариантное распределение является классическим примером распределения для состояния *динамического хаоса*.

5.3.3. Распределение для состояния динамического хаоса. Вернемся к логистическому уравнению (2.1). В 5.4 мы увидим, что к уравнению такого типа сводится уравнение для энергии колебаний генератора в дискретном времени.

Уравнение (2.1) при значениях параметра в пределах $3 \leqslant \alpha \leqslant 4$ описывает очень сложные — «хаотические» движения. Состояние наибольшего хаоса достигается при максимальном значении параметра $\alpha = 4$. Соответствующее инвариантное распределение может быть найдено как путем численного эксперимента, так и аналитически. Идея расчета была предложена в работе Улама — Неймана. Полученное по их методу распределение имеет вид

$$f(x) = \pi^{-1}(1 - x^2)^{-1/2}, \qquad \int_0^1 f(x)\,dx = 1. \qquad (5.3.15)$$

Для некоторого упрощения расчета проведем в уравнении (2.1) при $\alpha = 4$ замену переменной $x = (\bar{x} + 1)/2$. В результате придем к уравнению (черту над x опускаем)

$$x_{n+1} = 1 - 2x_n^2, \qquad -1 \leqslant x \leqslant 1. \qquad (5.3.16)$$

Распределение $f(x)$ находим следующим образом (*Лихтенберг, Либерман*, 1984; *Неймарк, Ланда*, 1987). Заменой $x = -\cos(\pi y)$ (16) сводится к линейному уравнению

$$y_{n+1} = 2y_n, \qquad 0 \leqslant y \leqslant 1. \qquad (5.3.17)$$

Отсюда вытекает равномерное распределение для y: $f(y) = 1$ при $0 \leqslant y \leqslant 1$, и, следовательно, распределение $f(x) = f(y)\,dy/dx$ имеет вид

$$f(x) = \pi^{-1}(1 - x^2)^{-1/2}, \qquad \int_{-1}^1 f(x)\,dx = 1. \qquad (5.3.18)$$

Заметим, что это распределение совпадает по виду с распределением (8) для координаты гармонического осциллятора. Естественно, что при этом совпадают и значения энтропии Больцмана — Гиббса — Шеннона. Это, однако, не означает, что степень хаотичности состояния наибольшего динамического хаоса для логистического уравнения и ансамбля осцилляторов с равномерным распределением по фазам одинакова. Такое сравнение не имеет определенного смысла, так как речь здесь идет о сравнении разных характеристик разных систем.

5.4. Обобщенные генераторы Ван дер Поля. Бифуркации энергии предельного цикла и периода колебаний

5.4.1. Генераторы с ветвлениями значений энергии предельного цикла. Покажем, что на основе логистического уравнения могут быть построены математические модели обобщенных генераторов Ван дер Поля, в которых возможны каскады бифуркаций двух типов: ветвление значений энергии предельного цикла (генераторы с мультистабильными стационарными состояниями) и бифуркации периода колебаний, а также комбинации этих двух типов (*Климонтович*, 1985, 1987; *Климонтович, Четвериков*, 1987). Ниже проводится оценка относительной степени упорядоченности различных состояний обобщенных генераторов Ван дер Поля по различным критериям.

Вернемся к уравнению (1.4), которое описывает эволюцию энергии колебаний в генераторе Ван дер Поля. Используем безразмерные переменные

$$t' = \omega_0 t, \quad a' = a/\omega_0, \quad E' = bE/\omega_0, \quad D' = Db/\omega_0^2. \qquad (5.4.1)$$

При переходе к дискретному времени $t' = \Delta n$, при этом $0 \leqslant \Delta \leqslant 1$, $n = 0, 1, 2, \ldots$ Знак «$'$» ниже опускаем. В безразмерных переменных уравнение (1.4) для энергии колебаний принимает вид

$$dE/dt = (a - E)E. \qquad (5.4.2)$$

Оно описывает два простых аттрактора: состояние покоя $E = 0$ при $a < 0$ и предельный цикл с энергией $E = a$ при $a > 0$. Здесь нет ограничения сверху на значение энергии предельного цикла.

Обобщим уравнение (2) таким образом, чтобы по мере увеличения управляющего параметра возникла последо-

вательность ветвлений значений энергии предельного цикла. Одна из возможностей такого обобщения основана на использовании вместо (2) соответствующего уравнения в дискретном времени с шагом Δ:

$$E_{\Delta(n+1)} - E_{\Delta n} = \Delta(a - E_{\Delta n}) E_{\Delta n}. \qquad (5.4.3)$$

Это уравнение соответствует схеме запаздывания, при которой значение энергии $E_{\Delta(n+1)}$ определяется значением $E_{\Delta n}$. При единичном шаге $\Delta = 1$ из (3) следует одна из форм логистического уравнения:

$$E_{n+1} = (a+1) E_n - E_n^2 \equiv F(E_n); \quad E_{n+k} = F^{(k)}(E_n); \quad 0 \leqslant a+1 \leqslant 4, \quad 0 \leqslant E \leqslant 4. \qquad (5.4.4)$$

Теперь (при значениях $k = 1, 2, \ldots$) введем совокупность дифференциальных уравнений для энергии E на основе правила соответствия:

$$(E_{n+k} - E_n)/k \leftrightarrow dE/dt. \qquad (5.4.5)$$

Полученные таким образом уравнения запишем в виде

$$dE/dt = k^{-1}(F^{(k)}(E) - E), \qquad k = 1, 2, \ldots \qquad (5.4.6)$$

При $k = 1$ отсюда вытекает (2). Запишем в явном виде уравнение при $k = 2$:

$$dE/dt = (1/2)(a - E) E [E^2 - (a+2)E + a + 2]. \qquad (5.4.7)$$

Здесь уже возможны четыре стационарных состояния:

$$E_1 = 0 \text{ при } a \leqslant 0; \; E_2 = a \text{ при } 0 \leqslant a \leqslant 2;$$
$$E_{3,4} = (a+2)/2 \pm [(a+2)^2/4 - (a+2)]^{1/2} \text{ при } a \geqslant 2. \qquad (5.4.8)$$

Таким образом, при $a = 2$ происходит ветвление значений энергии предельного цикла и возникает бистабильное состояние. В общем случае в области значений a до критической точки Фейгенбаума число стационарных состояний равно 2^k. При этом возможные значения энергии предельного цикла совпадают со значениями энергии E в неподвижных точках логистического уравнения (4).

Соответствующим образом обобщаются уравнения (1.1) для функций $x(t)$, $v(t)$. В них надо произвести замену

$$a - E \to k^{-1}(F^{(k)}(E) - E)/E. \qquad (5.4.9)$$

Решения уравнений для $x(t)$, $v(t)$ определяются, попрежнему, формулами (1.5), но теперь $E(t)$ — решение уравнения (6).

5.4.2. Генераторы в дискретном времени. Бифуркации энергии предельного цикла и периода колебаний. Вернемся к уравнениям (4). Первое из них является логистическим уравнением, а второе — его следствием после $k-1$ итерации. Сделаем во втором уравнении замену E_{n+k} на E_{n+1}. В результате получим совокупность уравнений

$$E_{n+1} = F^{(k)}(E_n), \qquad k = 1, 2, \ldots \qquad (5.4.10)$$

При $k = 1$ следует логистическое уравнение (4). Однако при $k > 1$ (10) уже не совпадает со вторым уравнением (4), так как в левой части (10) стоит функция E_{n+1}, а не E_{n+k}. Покажем, что обобщенное таким образом логистическое уравнение описывает новые режимы генерации.

Решение уравнения (10) при $k = 1$, т. е. логистического уравнения, хорошо известно. Соответствующая бифуркационная диаграмма приведена на рис. 3*а*. Последовательность бифуркаций удвоения начинается в точке

Рис. 3. Бифуркационные диаграммы для обобщенного логистического уравнения (5.4.10) с управляющим параметром в области значений $0 \leqslant a < \sqrt{8}$ при $k = 1$ (*а*) и $k = 2$ (*б*, *в*). Диаграммы *б*, *в* отвечают различным начальным условиям

$a = 2$. Значение $a = \sqrt{8}$ отвечает появлению наиболее широкого окна упорядоченности в закритической (по Фейгенбауму) области. При значении $a = 3$ возникает состояние «динамического хаоса».

При $k = 2$ для уравнения (10) в точке $a = 2$ происходит ветвление значений энергии предельного цикла — возникает бистабильность. В зависимости от начальных условий система попадает либо на нижнюю, либо на верхнюю ветви (рис. 3*б*, *в*). Процесс удвоения теперь начинается лишь в точке $a = \sqrt{6}$, когда для логистического уравнения происходит уже учетверение периода. В точке $a = 2{,}6785$ происходит фазовый переход «хаос — хаос», в результате которого возникает «хаотическое» движение, характерное для логистического уравнения. В этом можно убедиться путем наложения рис. 3*б*, *в*.

Заметим, для сравнения, что при $k = 2$ дифференциальное уравнение (6) описывает лишь процесс ветвления значений энергии предельного цикла при $a = 2$. Других бифуркаций нет.

Обратимся теперь к случаю $k = 3$.

Для дифференциального уравнения (6) предельный цикл с энергией $E = a$ теперь устойчив до значения $a = \sqrt{8}$. В этой точке возникают три стационарных состояния с разными энергиями. Существенно отличен от случая с $k = 2$ и характер решения уравнения (10).

Диаграмме, изображенной на рис. 4*а*, приведена в соответствие бифуркационная диаграмма для уравнения (10) при $k = 1$, а на рис. 4*б* при $k = 3$. Хорошо видно, в частности, различие состояний в самых широких окнах упорядоченности — в областях, в которых возможны колебания с периодом три: на рис. 4*а* видны все три возможных состояния, на рис. 4*б* — лишь одно верхнее. Это означает, что лишь одно из трех состояний имеет достаточную для наблюдения область притяжения.

Чтобы определить, в какой мере это различие фиксируется разными критериями относительной степени упорядоченности, на рис. 4 изображены зависимости от a следующих величин: средней энергии $\langle E \rangle$ (рис. 4*в*, *г*), среднего квадрата энергии $\langle E^2 \rangle$ (рис. 4*д*, *е*) энтропии

$$S(a) = -\int \ln f(E, a) f(E, a)\, dE \qquad (5.4.11)$$

(рис. 4*ж*, *з*), которая определяется по реализации $E_n(a)$, и, наконец, показателя Ляпунова (рис. 4*и*, *к*).

Мы видим, что при $k = 1$, 3 функции $\langle E \rangle$, $\langle E^2 \rangle$, S более четко отражают различие состояний в окнах упорядоченности, чем показатели Ляпунова, изменения в поведении которых практически незаметны.

Таким образом, путем численного эксперимента удается выявить различие эффективности оценки относительной степени упорядоченных неравновесных состояний по разным критериям.

5.4.3. Функция распределения энергии для состояния «динамического хаоса». Уравнения для функций распределения будут рассмотрены в следующих разделах. Здесь же лишь приведем выражение для стационарного распределения энергии для состояния развитого «динамического хаоса». В дальнейшем мы проведем сравнение по критерию S-теоремы степени упорядоченности этого «хаоса» по

Рис. 4. Совокупность характеристик решений обобщенного логистического уравнения (5.4.10) для области значений управляющего параметра $\sqrt{6} \leqslant a \leqslant 3$ при $k = 1$ (левый столбец) и $k = 3$ (правый столбец)

сравнению с другими состояниями, например на пороге генерации.

Распределение энергии может быть найдено численными методами по реализации $E_n(a)$. Одним из немногих примеров аналитического решения является распределение Улама — Неймана (3.15) для логистического уравнения при максимальном возможном значении параметра $a = 3$. Для уравнения в форме (4) это распределение имеет вид

$$f(E) = \pi^{-1}[E(4 - E)]^{-1/2}, \quad \int_0^\infty f(E)\,dE = 1. \quad (5.4.12)$$

Мы увидим, что по критерию S-теоремы степень упорядоченности состояния динамического хаоса с распределением (12) выше, чем на пороге генерации, т. е. при $a = 2$.

5.5. Динамические и статистические распределения

5.5.1. Генераторы с ветвлениями значений энергии предельного цикла. Введем в динамические уравнения (1.1) (после замены (4.9)) гауссовские источники Ланжевена с заданной интенсивностью D. Запишем соответствующее уравнение Фоккера — Планка для распределения $f(E, t)$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D\frac{\partial}{\partial E}\left(E\frac{\partial f}{\partial E}\right) + \frac{\partial}{\partial E}\left[-k^{-1}\left(F^{(k)}(E) - E\right)f\right]. \quad (5.5.1)$$

При $k = 1$ уравнение (1) совпадает с (1.7). Отметим некоторые особенности стационарного решения уравнения Фоккера — Планка (1) при $k = 2$.

Напомним, что в динамическом режиме при $k = 2$ и значении $a = 2$ имеет место точка ветвления значений энергии предельного цикла (см. (4.8)). Для наглядности выделим три частных случая.

1. Область ниже точки ветвления ($a < 2$). В приближении Гаусса

$$f(E) = \left[(2\pi D)^{-1}\frac{2-a}{2}\right]^{1/2}\exp\left[-(2D)^{-1}\frac{2-a}{2}(E-a)^2\right],$$
$$0 \leqslant a \leqslant 2. \quad (5.5.2)$$

Здесь и далее в условиях нормировки нижний предел $E = 0$ заменен на $E = -\infty$, что оправдано при условии $\varepsilon = Db/a^2 \ll 1$ (ср. с (1.14)). Из (2) следует, что при

приближении к точке ветвления — критической точке, дисперсия флуктуаций энергии растет как $2/(2-a)$, т. е. по закону Кюри для рассматриваемого неравновесного фазового перехода.

2. Точка ветвления — критическая точка ($a=2$). Распределение имеет вид

$$f(E)=\left[\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)\right]^{-1}\left(\frac{2}{D}\right)^{1/4}\exp\left[-\frac{(E-a)^4}{8D}\right],\qquad a=2. \quad (5.5.3)$$

Относительная дисперсия энергии в критической точке теперь пропорциональна $\sqrt{\varepsilon}$, где $\varepsilon=Db/a^2$, а не ε.

3. Область выше точки ветвления ($a>2$). В приближении Гаусса парциальные (для отдельных ветвей) распределения имеют вид

$$f_{1,2}(E)=\left(\frac{a-2}{2\pi D}\right)^{1/2}\exp\left[-\frac{a-2}{2D}(E-E_{1/2})^2\right], \quad (5.5.4)$$
$$E_{1,2}=2\pm\sqrt{a-2}.$$

При приближении к точке ветвления сверху относительная дисперсия также возрастает по закону Кюри, но с фактором $1/(a-2)$.

5.5.2. Скачок энтропии в критической точке. Покажем, что при приближении к критической точке снизу и сверху в приближении Гаусса (2), (4) имеет место скачок энтропии.

Обозначим значение энтропии ниже критической точки через S_-, а выше — через S_+. С помощью (2), (4) находим $S_\pm$. При этом оказывается, что разность энтропий

$$S_- - S_+ = \ln\sqrt{2} > 0. \quad (5.5.5)$$

Таким образом, при переходе через точку ветвления в сторону увеличения a энтропия уменьшается. Поскольку по распределениям (2), (4) в непосредственной близости к критической точке средние энергии совпадают ($\langle E\rangle_- = \langle E\rangle_+ = 2$), то согласно S-теореме разность энтропий может служить количественной мерой увеличения степени упорядоченности при переходе через критическую точку в области ветвления.

Роль *параметра порядка* рассматриваемого неравновесного фазового перехода играет разность средних энергий двух ветвей:

$$\eta=\langle E_1\rangle-\langle E_2\rangle=2(a-2)^{1/2},\qquad a\geqslant a_{\text{кр}}=2. \quad (5.5.6)$$

В критической точке $a=2$ параметр порядка $\eta=0$.

5.5.3. Динамические распределения. Чтобы получить уравнение для динамического распределения $f^{(д)} = \delta(E - E(t))$ в непрерывном времени, можно обратиться к уравнению Фоккера — Планка (1) и положить в нем $D \equiv 0$. После этого решение можно представить в виде $\delta(E - E(t))$. При этом функция $E(t)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению (4.6). Стационарное динамическое распределение имеет вид $f^{(д)}(E) = \delta(E - E_\infty)$. (Здесь E_∞ — установившееся решение уравнения (4.6).) Для генератора Ван дер Поля оно совпадает с микроканоническим распределением (3.12).

Рассмотрим два других примера.

1. Положим в (4.6) $k = 2$. В точке $a = 2$, как мы знаем, происходит ветвление значений энергии предельного цикла. Выбор верхней или нижней ветви зависит от начальных условий, поэтому стационарное динамическое распределение имеет вид

$$f^{(д)}(E) = \delta(E - E_{3,4}),$$
$$E_{3,4} = \frac{a+2}{2} \pm \left[\left(\frac{a+2}{2}\right)^2 - (a+2)\right]^{1/2}. \qquad (5.5.7)$$

2. Положим в (4.6) $k = 3$. Тогда при $a < \sqrt{8}$ существует предельный цикл с энергией $E = a$. В точке $a = \sqrt{8}$ происходит касательная бифуркация, в результате которой рождаются три пары состояний с энергиями E_1, E_2, E_3. При небольшом повышении над порогом в каждой паре одно из состояний устойчиво, а второе неустойчиво. В результате рождается предельный цикл для колебаний с частотой ω_0 и тремя возможными значениями энергии. Рождение отдельной пары (устойчивого и неустойчивого состояний) подобно процессу в генераторе Ван дер Поля с жестким возбуждением. Вид стационарного динамического распределения зависит от условий возбуждения генератора.

Рассмотрим теперь динамические распределения для генераторов в дискретном времени

$$f^{(д)}(E, n) = \delta(E - E_n), \qquad (5.5.8)$$

где E_n — решение логистического уравнения (4.4) или более общего уравнения (4.10).

Переход к стационарному распределению (по мере увеличения дискретного времени) возможен лишь при значениях параметра a в интервале $0 \leqslant a < 2$, когда

$E_n \to a$. По мере увеличения параметра a в области $2 \leqslant a \leqslant 3$ движение будет периодическим, и после каскада удвоений оно становится (за исключением окон упорядоченности) столь сложным, что воспринимается как хаотическое. При этом динамическое распределение по мере увеличения a не стремится к стационарному. Для получения стационарных распределений необходимо усреднение динамического распределения по времени, т. е. переход к сглаженному распределению

$$\tilde{f}^{(N)}(E, n) = N^{-1} \sum_{k=0}^{\infty} f^{(g)}(E, n+k). \qquad (5.5.9)$$

Здесь n — начальный момент, а N — интервал усреднения. В области периодических движений за N принимаем период. Для области динамического хаоса величина N определяется, фактически, путем численного эксперимента по условию достаточной степени стационарности сглаженного распределения, когда практически исчезает зависимость от начального значения n.

Серия стационарных распределений $f(E, a)$, полученных по решениям логистического уравнения при разных значениях a, представлена на рис. 5, взятом из работы (*Климонтович*, *Четвериков*, 1987). На первом рисунке представлено распределение для периодического движения с периодом четыре. На последнем рисунке изображено распределение для наиболее «хаотического» состояния ($a = 3$). Оно практически совпадает с распределением Улама — Неймана. Полезно сравнить эти распределения с распределениями $f(D, a)$, приведенными на рис. 2.

5.5.4. Уравнения Фоккера — Планка для генераторов в дискретном времени. Устойчивость стационарных решений по Н-теореме. Вопросу о влиянии шумов на динамические системы со сложным — «хаотическим» поведением посвящена значительная литература (*Кручфелд*, *Фармер*, *Хуберман*, 1982; *Анищенко*, *Сафонова*, 1987; *Климонтович*, УФН, 1989). До настоящего времени основное внимание уделялось исследованиям воздействия шума на системы, которые описываются дискретными отображениями (например, логистическим уравнением, двухмерным отображением Хенона). В последние годы появились работы, посвященные кинетическому описанию сложных движений в ансамблях «простых» систем. Этим вопросам посвящена, например, гл. 10 книги (*Хакен*, 1985). Мы кратко рассмотрим лишь вопрос о возможности использо-

вания уравнений Фоккера — Планка при описании процессов в дискретном времени. Здесь возникает новая проблема об устойчивости стационарных решений уравнений

Рис. 5. Серия стационарных (инвариантных) распределений $f(E, a)$ для области значений управляющего параметра $\sqrt{6} \leqslant a \leqslant 3$ при $0 \leqslant E \leqslant 4$.

Фоккера — Планка. Покажем, что она может быть решена с привлечением Н-теоремы для открытых систем, сформулированной в 1.11.

Перейдем от (1) к уравнению в дискретном времени по правилу соответствия (4.5):

$$\partial f(E, t)/\partial t \leftrightarrow [f(E, n+k) - f(E, n)]/k, \quad f(E, t) \leftrightarrow f(E, n). \tag{5.5.10}$$

В результате приходим к уравнению

$$f(E, n+k) - f(E, n) = \\ = \frac{\partial}{\partial E}\left(D\frac{\partial f(E, n)}{\partial E}\right) - \frac{\partial}{\partial E}\left[\left(F^{(k)}(E) - E\right)f(E, n)\right], \quad k = 1, 2, \ldots, \tag{5.5.11}$$

а вернее, к совокупности уравнений, отвечающих разным значениям k. При $k=1$ условие соответствия (10) применяется непосредственно к уравнению Фоккера — Планка (1.7), которое определяет распределение энергии для генератора Ван дер Поля.

Заметим, что, формально, стационарные решения уравнений (1) и (11) соответственно в непрерывном и дискретном времени совпадают. Так, в частности, при $k=1$ стационарные решения уравнений (1), (11) имеют вид (1.8). При этом, однако, возникает вопрос: являются ли эти стационарные решения устойчивыми? Для ответа на него надо исследовать поведение малых отклонений

$$f_1(E, t)=f(E, t)-f_0(E), \quad f_1(E, n)=f(E, n)-f_0(E) \tag{5.5.12}$$

от стационарного решения $f_0(E, a)$.

Сначала рассмотрим эту задачу для генератора Ван дер Поля в непрерывном времени. Используем Н-теорему (1.11.14), которая определяет характер временной эволюции разности свободных энергий (энтропии Кульбака) при эволюции к стационарному распределению $f_0(E)$. Подставим $f=f_0+f_1$ в выражение (1.11.13) для разности свободных энергий и проведем разложение по f_1. Тогда неравенство (1.11.14) примет вид

$$\frac{d}{dt}(F-F_0)=\frac{D}{2}\frac{d}{dt}\int\frac{1}{f_0}f_1^2\,dE\leqslant 0. \tag{5.5.13}$$

Отсюда и вытекает, что функция f_1 убывает со временем и, следовательно, стационарное решение уравнения Фоккера — Планка (1.7) устойчиво.

Рассмотрим аналогичную задачу для генератора Ван дер Поля в дискретном времени при $k=1$, когда стационарное решение уравнения (11) также имеет вид (1.8).

Введем фактор q, связывающий функции f_1 в два соседних момента дискретного времени (с шагом Δ),

$$|f_1(E, \Delta(n+1)|=q|f_1(E, \Delta n)|, \tag{5.5.14}$$

и снова вернемся к Н-теореме (1.11.14) и к (13) для генератора Ван дер Поля. Используем введенное в (1.11.14) обозначение для аналога «производства энтропии» $\sigma_F\geqslant 0$ и запишем его при малых f_1:

$$\sigma_F=D\int\frac{DE}{f_0}\left(\frac{\partial f_1}{\partial E}+\frac{f_1}{D}\frac{dH}{dE}\right)^2 dE\geqslant 0, \tag{5.5.15}$$

а производную в (13) заменим конечной разностью в соответствии с условием (10) при $k = 1$:

$$\frac{d}{dt}(F - F_0) =$$

$$= D\int \frac{f_1}{f_0}\frac{df_1}{dt}dE \to D\int \frac{f_1(E, \Delta n)}{f_0}\frac{f(E, \Delta(n+1)) - f_1(E, \Delta n)}{\Delta}dE =$$

$$= \frac{D}{\Delta}(q-1)\int \frac{f_1^2(E, \Delta n)}{f_0}dE = -\sigma_F \leqslant 0. \quad (5.5.16)$$

Здесь принято во внимание определение (14) для фактора q. Из этого определения вытекает и условие устойчивости: $|q| < 1$, т. е. условие уменьшения функции $|f_1(E, n)|$ с ростом дискретного времени n. В соответствии с последним равенством в (16) условие устойчивости можно представить в виде

$$|q| = \left|1 - \Delta\sigma_F\left(D\int f_0^{-1}f_1^2 dE\right)^{-1}\right| \leqslant 1, \quad (5.5.17)$$

и, следовательно, область устойчивости определяется неравенствами

$$0 \leqslant \Delta\sigma_F\left(D\int f_0^{-1}f_1^2 dE\right)^{-1} \leqslant 2. \quad (5.5.18)$$

Таким образом, при заданном стационарном решении f_0 и произвольном по форме, но малом по значению отклонении f_1 найдется достаточно малый шаг дискретного времени, при котором стационарное распределение устойчиво.

Чтобы сделать условие устойчивости (18) более ощутимым, конкретизируем структуру функции f_1. Допустим, что нестационарное решение может быть получено из выражения (1.8) для стационарного распределения f_0 путем вариации управляющего параметра δa и изменения функции Гамильтона $H(E) \to H(E) + \delta a E$ (введение специального внешнего поля). Таким образом, определяем f_1 выражением

$$f_1 = \exp\frac{F(D, a+\delta a) - H(E, a) - \delta a E}{D} - \exp\frac{F(D, a) - H(E, a)}{D}. \quad (5.5.19)$$

В случае малых δa величина σ_F и интеграл в (18) имеют вид

$$\sigma_F = (\delta a)^2\langle E\rangle, \qquad \int f_0^{-1}f_1^2 dE = (\delta a)^2\langle(\delta E)^2\rangle D^{-2} \quad (5.5.20)$$

и, следовательно, выражаются через среднюю энергию $\langle E\rangle$ и дисперсию энергии $\langle(\delta E)^2\rangle$ по стационарному распределению f_0. Условие устойчивости принимает теперь вид

$$0 \leqslant \Delta D\langle E\rangle/\langle(\delta E)^2\rangle \leqslant 2. \qquad (5.5.21)$$

Из него, в частности, следует значение максимально допустимого шага дискретного времени

$$\Delta_{\max} = 2\langle(\delta E)^2\rangle/D\langle E\rangle. \qquad (5.5.22)$$

Максимально допустимый шаг дискретного времени, при котором стационарное решение f_0 еще устойчиво, зависит от управляющего параметра. Конкретизируем его для режима развитой генерации, когда f_0 определяется выражением (1.14) и, следовательно, $\langle E\rangle = a$ и $\langle(\delta E)^2\rangle = D$. Тогда условия (21), (22) принимают вид

$$0 \leqslant \Delta a \leqslant 2, \quad \Delta_{\max} = 2/a. \qquad (5.5.23)$$

Эти условия не содержат D и, следовательно, отвечают пределу $D \to 0$, т. е. динамическому распределению.

Заметим, наконец, что при единичном шаге $\Delta = 1$ условие устойчивости рассматриваемого сейчас стационарного распределения для режима развитой генерации сводится к ограничению на значение управляющего параметра:

$$0 \leqslant a \leqslant 2. \qquad (5.5.24)$$

Оно совпадает с условием устойчивости предельного цикла с энергией $E = a$ по логистическому уравнению, а также по уравнениям для обобщенного генератора в дискретном времени при $k = 2$. Напомним, что в точке $a = 2$ возникает либо бифуркация удвоения периода, либо бифуркация ветвления значений энергии предельного цикла. Для статистических режимов при единичном шаге $\Delta = 1$ условие устойчивости вытекает из (21). В общем случае в него входят кроме управляющего параметра a, например, коэффициент диффузии, а также коэффициенты линейного и нелинейного трения.

Мы исследовали устойчивость стационарного решения уравнения (11) при $k = 1$. Следует ожидать, что условия устойчивости стационарного решения уравнения (11) при $k = 2$ будут более широкими.

Использованный метод H-теоремы для исследования устойчивости стационарных решений имеет, конечно, более широкое значение. Именно, основываясь на сформу-

лированных выше H-теоремах для кинетических, гидродинамических и диффузионных уравнений, можно провести оценку устойчивости прежних стационарных решений при переходе к дискретному времени. Такой переход неизбежен при численном эксперименте.

Естественно, что при этом производится дискретизация и по остальным переменным (например, энергии в распределении $f(E, t)$). Основываясь на H-теоремах, можно получить информацию о допустимых размерах шага дискретного времени в зависимости от размера ячейки в фазовом пространстве, а также от значений параметров системы, в частности управляющих параметров a.

5.6. Сравнение степени упорядоченности в точках бифуркаций и в состоянии «динамического хаоса»

5.6.1. Энтропия при каноническом и микроканоническом распределениях Гиббса — иллюстрация к S-теореме. Прежде чем перейти к основной теме, рассмотрим пример использования S-теоремы, представляющий несомненный методический интерес.

Вернемся к уравнению Фоккера — Планка (3.3), которое имеет стационарное решение (3.11). В двух предельных случаях из него вытекает микроканоническое (3.12) и каноническое (3.14) распределения Гиббса для функции $f(x, v)$. С их помощью находим два распределения для более простой функции $f(x)$. Из (3.12) следует, что

$$f(x) = \pi^{-1}(2E/\omega_0^2 - x^2)^{-1/2}, \qquad 2\int_0^{(2E/\omega_0^2)^{1/2}} f(x)\,dx = 1. \tag{5.6.1}$$

Это распределение для безразмерной переменной совпадает с (3.8). Из канонического распределения для $f(x)$ получим распределение Гаусса

$$f(x) = \left(2\pi\frac{kT}{\omega_0^2}\right)^{-1/2}\exp\left(-\frac{\omega_0^2x^2}{2D/\gamma}\right), \qquad 2\int_0^\infty f(x)\,dx = 1. \tag{5.6.2}$$

Примем состояние с распределением (2) за состояние физического хаоса. Ему отвечает эффективная функция Гамильтона $H(x) = \omega_0^2x^2/2$. Обозначим через $S_м$, $S_к$ энтропии, отвечающие микроканоническому и каноническо-

му распределениям. В соответствии с S-теоремой сравним энтропии при одинаковых значениях средней эффективной энергии $\langle H(x)\rangle$. Из этого условия найдем перенормированную интенсивность шума $\tilde{D}=\gamma a/b$. В результате разность энтропий

$$\tilde{S}_{\text{к}}-S_{\text{м}}=\ln\left[2\left(\frac{\tilde{D}}{\pi\gamma a/b}\right)^{1/2}\right]+\frac{1}{2}=\ln\frac{2}{\sqrt{\pi}}+\frac{1}{2}>0 \tag{5.6.3}$$

и, следовательно, перенормированная энтропия $\tilde{S}_{\text{к}}$, отвечающая каноническому распределению (2), больше энтропии, отвечающей микроканоническому распределению (1). Такой результат является естественным, так как при каноническом распределении, наряду с равномерным распределением по фазе, которое имеет место и при микроканоническом распределении, имеется еще и разброс значений энергии.

Результат (3) может формально рассматриваться как следствие теоремы Гиббса, сформулированной в **1.10.** При этом, однако, в рассматриваемой ситуации имеется существенная особенность.

При использовании теоремы Гиббса условие (1.10.2) служит ограничением на класс «произвольных» функций $f(x)$ и нет необходимости в перенормировке канонического распределения (1.10.1).

В рассматриваемой ситуации распределение (1) является частным (предельным) случаем более общего *заданного неравновесного* распределения (3.11). По этой причине для выполнения равенства средних эффективных энергий и необходима перенормировка распределения, отвечающего состоянию, которое принято за состояние физического хаоса. Таким образом, (3) является следствием и вместе с тем иллюстрацией S-теоремы.

5.6.2. Обобщенный генератор. Сравнение степени упорядоченности трех состояний: порог генерации, точка ветвления, динамический хаос. На пороге генерации распределение энергии определяется выражением (1.13). Запишем его в виде распределения Гиббса (ср. с (1.8)):

$$f(E)=(2/\pi D)^{1/2}\exp(-H(E)/D),\quad H(E)=E^2/2. \tag{5.6.4}$$

Примем это состояние за состояние физического хаоса (1) и сравним степень его упорядоченности (хаотичности) со степенью упорядоченности состояния динамического хаоса, которое описывается распределением

(4.12),— состояния (3). Из (4) следует, что сравнение надо производить при дополнительном условии

$$\langle E^2 \rangle = \text{const}. \tag{5.6.5}$$

Запишем для состояний (1), (3) выражения для энтропий и средних эффективных функций Гамильтона (5):

$$\begin{aligned} S_{(1)} &= \ln (\pi D/2)^{1/2} + (1/2), & \langle E^2 \rangle_{(1)} &= D; \\ S_{(3)} &= \ln \pi, & \langle E^2 \rangle_{(3)} &= 6. \end{aligned} \tag{5.6.6}$$

Из (5), (6) находим перенормированную интенсивность шума $\widetilde{D}_{(1)} = \mathcal{E}$. В результате искомая разность энтропий

$$\widetilde{S}_{(1)} - S_{(3)} = \ln \sqrt{3/\pi} + 1/2 > 0. \tag{5.6.7}$$

Таким образом, степень хаотичности состояния, принятого за физический хаос,— состояния (1), больше степени хаотичности состояния «динамического хаоса».

Это, разумеется, не означает, что при движении от порога генерации, когда управляющий параметр $a = 0$, к состоянию «динамического хаоса», когда $a = 3$, степень упорядоченности растет монотонно. С помощью численных расчетов энтропии Больцмана — Гиббса — Шеннона (рис. 4 *ж*, *з*) и среднего квадрата энергии $\langle E^2 \rangle$ (рис. 4 *д*, *е*) можно рассчитать локальное изменение перенормированной к заданному значению $\langle E^2 \rangle$ энтропии. Некоторые выводы можно, однако, сделать и без детального расчета.

1. В области за критической точкой Фейгенбаума $a_\infty < a < 3$ степень упорядоченности меняется немонотонно.

2. Эволюция степени упорядоченности в зависимости от параметра a для генераторов с разными значениями итерационного параметра $k = 1, 3$ неодинакова. Для генератора с $k = 3$ можно получить режимы генерации с большей степенью упорядоченности, чем при $k = 1$. При этом наибольшая степень упорядоченности для генератора с $k = 3$ достигается в широком «окне» упорядоченности, которое начинается при значении $a = \sqrt{8}$. Это обусловлено тем, что устойчивым является лишь одно из трех значений энергии предельных циклов, и при этом наибольшее.

3. Показатели Ляпунова для генераторов с $k = 1, 3$ (рис. 4 *и*, *к*) почти тождественны. Это означает, что

критерий степени упорядоченности, основанный на S-теореме, является для рассматриваемой ситуации более чувствительным, чем критерий, основанный на вычислении энтропии Крылова — Колмогорова — Синая.

5.7. Эволюция энтропии в системах с двумя управляющими параметрами

5.7.1. Генератор Ван дер Поля с мягким и жестким возбуждением. Мы уже отмечали, что расчеты, основанные на S-теореме, не только служат критериями относительной степени упорядоченности различных состояний, но и играют конструктивную роль. На основе этих расчетов можно контролировать правильность выбора управляющих параметров, а также оптимизировать поиск наиболее упорядоченных состояний при наличии нескольких управляющих параметров.

Один из примеров системы с двумя управляющими параметрами был рассмотрен выше, когда наряду с параметром обратной связи вторым был масштаб дискретного времени Δ. Рассмотрим еще два примера систем с двумя управляющими параметрами (*Климонтович*, *Бониц*, 1986).

Вернемся к уравнениям (1.1) для генератора Ван дер Поля и изменим в них нелинейные диссипативные члены путем замены

$$-a + bE \to -a - bE + cE^2, \qquad c > 0, \qquad (5.7.1)$$

где c — постоянный коэффициент, а коэффициенты a, b имеют структуру

$$a = a_н - \gamma, \quad b = b_н - \beta; \quad \gamma > 0, \quad \beta > 0. \qquad (5.7.2)$$

Величины $a_н \geqslant 0$, $b_н \geqslant 0$ — параметры обратной связи при мягком и жестком возбуждении. Примем их за управляющие параметры и произведем соответствующие изменения в уравнениях Фоккера — Планка (1.7), (3.3).

Рассмотрим стационарное решение уравнения для распределения $f(E, t)$. Представим его в виде (ср. с (1.8))

$$f(E) = \exp[(F - H(E))/D], \; H(E) = -aE - (b/2)E^2 + (c/3)E^3, \qquad (5.7.3)$$
$$\int_0^\infty f\,dE = 1.$$

Введем также обозначение для эффективной функции Гамильтона H_0 для состояния физического хаоса, когда управляющие параметры $a_н = 0$, $b_н = 0$.

Расчеты показывают, что перенормированные энтропии $\tilde{S}(a_н, b_н = 0)$, $\tilde{S}(a_н = 0, b_н)$ уменьшаются по мере увеличения значений управляющих параметров, соответственно $a_н$ и $b_н$. Таким образом, и по мере развития генерации в генераторе с жестким возбуждением имеет место процесс самоорганизации.

При одновременном изменении управляющих параметров в области $0 \leqslant a_н \leqslant a_{max}$, $0 \leqslant b_н \leqslant b_{max}$ перенормированная энтропия $\tilde{S}(a_н, b_н)$ может иметь меньшие значения, чем для генератора с мягким и жестким возбуждением по отдельности. Следовательно, при использовании двух управляющих параметров $a_н$, $b_н$ можно добиться более высокой (по рассматриваемому критерию) степени упорядоченности, чем при изменении одного (любого из двух) параметра.

Для иллюстрации приведем результаты расчета изменения энтропии при увеличении управляющих параметров в режиме жесткого возбуждения, когда выполняется неравенство $b = b_н - \beta > 2\sqrt{\gamma}$,

$$\tilde{S} - S = \ln[\langle E\rangle (2\pi D)^{-1/2}(b + 4a)^{1/4}] + 1/2. \quad (5.7.4)$$

Средняя энергия определяется выражением

$$\begin{gathered}\langle E\rangle = b/2 + (b^2/4 + a)^{1/2},\\ a = a_н - \gamma, \quad b > 2\sqrt{\gamma}, \quad a_н \geqslant 0.\end{gathered} \quad (5.7.5)$$

Из формулы (4) следует, что разность энтропий при фиксированном значении параметра жесткого возбуждения $b > 2\sqrt{\gamma}$ положительна и при нулевом значении управляющего параметра $a_н$. По мере увеличения параметра $a_н$ от значения $a_н = 0$ разность энтропий (4) возрастает. Увеличивается, следовательно, и степень упорядоченности. Тем самым наличие второго управляющего параметра позволяет выявить режимы генерации, более совершенные по критерию S-теоремы.

5.7.2. Генератор Ван дер Поля при внешнем резонансном воздействии. Проведем в уравнении Фоккера — Планка (3.3) с дополнительным учетом внешнего резонансного воздействия усреднение по периоду и рассмотрим стационарное решение усредненного уравнения. Для функ-

ции распределения энергии и фазы $f(E, \varphi)$ это решение имеет вид

$$f(E, \varphi) = C \exp\left[-\frac{(b/2)(E - a/b)^2 + (2E)^{1/2} F \cos\varphi}{D}\right],$$
$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} f dE\, d\varphi = 1, \tag{5.7.6}$$

где F — амплитуда внешней силы, φ — фаза колебаний. При $F = 0$ это выражение совпадает с распределением (1.14).

Как и в (1.14), считаем, что параметр $Db/a^2 \ll 1$. Это отвечает режиму развитой генерации. При этом условии в (6) в члене $(2E)^{1/2}F\cos\varphi$ возможна замена $E \to a/b$. В результате распределение (6) распадается на произведение распределений энергии $f(E)$ и фазы $f(\varphi)$.

Предполагаем управляющий параметр $a_н$ заданным. При этом задано и среднее значение энергии $\langle E \rangle = a/b$. В качестве второго управляющего параметра принимаем амплитуду внешней силы F.

За состояние физического хаоса при заданном значении $a_н$ принимаем состояние, когда внешняя сила отсутствует, т. е. $F = 0$. При этом распределение по фазе и соответствующая энтропия определяются формулами

$$f_{(0)}(\varphi) = (2\pi)^{-1}, \qquad S_{(0)} = -\int_0^{2\pi} f_{(0)} \ln f_{(0)}\, d\varphi = \ln 2\pi. \tag{5.7.7}$$

При $F \neq 0$ функция распределения $f(\varphi)$ имеет вид

$$f(\varphi) = [2\pi I_0(x)]^{-1} e^{-x\cos\varphi}, \quad x = (2a/b)^{1/2} F/D. \tag{5.7.8}$$

Средняя энергия остается прежней, $\langle E \rangle = a/b$, а разность энтропий, определяемых распределениями (7), (8), задает изменение относительной степени упорядоченности рассматриваемых состояний:

$$S_{(0)} - S = x\, dI_0(x)/dx - \ln I_0(x) \geqslant 0. \tag{5.7.9}$$

Здесь и в (8) $I_0(x)$ — функция Бесселя мнимого аргумента.

Полученная разность энтропий и характеризует увеличение степени упорядоченности состояния генератора по мере увеличения амплитуды резонансного воздействия F. Уменьшение энтропии по мере увеличения F свидетельствует о наличии процесса самоорганизации и, в то

же время, о правильности выбора величины F в качестве второго управляющего параметра.

Выражение (9) существенно упрощается в двух предельных случаях слабого и сильного внешнего воздействия. Именно,

$$\begin{aligned} S_{(0)} - S &= x^2/4 \geqslant 0, & x &\ll 1; \\ S_{(0)} - S &= \ln(2\pi x)^{1/2} > 0, & x &\gg 1. \end{aligned} \qquad (5.7.10)$$

Рассмотренные здесь простейшие примеры иллюстрируют конструктивность утверждения, составляющего содержание S-теоремы. Она заключается, во-первых, в контроле правильности выбора параметров, управляющих процессами самоорганизации, и, во-вторых, в возможности количественной оценки сравнительной степени упорядоченности состояний, отвечающих разным значениям управляющих параметров.

Рассмотрим теперь простейший пример «среды» из связанных генераторов.

5.8. Среда из связанных генераторов

5.8.1. Базовые математические модели теории самоорганизации — синергетики. Генераторы Ван дер Поля, наряду с другими более сложными генераторами, могут служить элементами активных (возбудимых) сред. Первые математические модели активных сред были предложены около сорока лет тому назад в известных работах Н. Винера и А. Розенблюта; И. М. Гельфанда и М. Л. Цетлина (см. *Романовский*, *Степанова*, *Чернавский*, 1975). К числу основополагающих работ по теории активных (возбудимых) сред относится и работа Л. Д. Ландау (*Ландау*, 1944; см. также *Ландау* и *Лифшиц*, 1986), посвященная теории возникновения турбулентности.

В настоящее время теория активных сред базируется в значительной мере на уравнениях реакционно-диффузионного типа

$$\frac{\partial X(R, t)}{\partial t} = F(X(R, t)) + \frac{\partial}{\partial R_i}\left(D_{ij}(X)\frac{\partial X}{\partial R_j}\right). \qquad (5.8.1)$$

Здесь $X(R, t)$ — совокупность макроскопических функций, характеризующих систему, например, концентрации веществ химически реагирующей среды; $F(X)$ — нелиней-

ные функции, определяемые структурой системы и характером рассматриваемых процессов; D_{ij} — коэффициенты пространственной диффузии «элементов» системы.

Конкретные примеры уравнений вида (1) предложены сравнительно давно в работах (*Фишер* (см. *Марри*, 1983); *Колмогоров*, *Петровский*, *Пискунов*, 1937; *Зельдович*, 1984; *Франк-Каменецкий*, 1967; *Тьюринг*, 1952). К типу (1) относятся и различные модификации уравнения Гинзбурга — Ландау, которые широко используются в теории равновесных и неравновесных фазовых переходов (*Ландау* и *Лифшиц*, 1976; *Паташинский*, *Покровский*, 1982; *Хакен*, 1980, *Хакен*, 1985; *Климонтович*, III, IV; *Гапонов-Грехов*, 1987; *Гапонова-Грехова* (ред.), 1981 и др.).

Уравнения реакционно-диффузионного типа описывают широкий класс физических, химических и биологических явлений. Поскольку выше большинство примеров строилось на основе модели симметризованного по нелинейности генератора Ван дер Поля, то естественно следовать этой «традиции» и при рассмотрении примеров распределенных активных сред.

Начнем с примера пространственной диффузии независимых генераторов — «броуновских частиц» в пространстве. Если при описании генераторов (см. (1.1) — (1.4)) ограничиться информацией лишь об энергии колебаний, то распределенную систему следует характеризовать функцией

$$E(R, t), \qquad E(t) = V^{-1} \int E(R, t)\, dR. \tag{5.8.2}$$

Соответствующее уравнение Колмогорова — Петровского — Пискунова (КПП) для этой функции при постоянном коэффициенте пространственной диффузии $D_{\text{п}}$ имеет вид

$$\partial E(R, t)/\partial t = [a - bE(R, t)]\, E(R, t) + D_{\text{п}} \partial^2 E/\partial R^2. \tag{5.8.3}$$

Однако этого уравнения недостаточно для полного статистического описания распределенной системы невзаимодействующих генераторов, так как наряду с пространственной диффузией имеется и другая причина нарушения динамического режима генерации. Она обусловлена действием шумов на внутренние степени свободы генератора и при заданном внешнем шуме характеризуется интенсивностью D. Совместное влияние обоих факторов

учитывается уравнениями для функции распределения $f(E, R, t)$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D\frac{\partial}{\partial E}\left(E\frac{\partial f}{\partial E}\right) + \frac{\partial}{\partial E}[(-a + bE)Ef] + D_{\text{п}}\frac{\partial^2 f}{\partial R^2},$$
$$\int_0^\infty dE \int \frac{dR}{V} f = 1. \tag{5.8.4}$$

Это уравнение существенно упрощается в двух предельных случаях.

1. Шумы, действующие на внутренние степени свободы генераторов, пренебрежимо малы ($D \equiv 0$). Тогда (4) имеет решение

$$f(E, R, t) = \delta(E - E(R, t)), \qquad \langle E\rangle = \int_0^\infty Ef\,dE = E(R, t). \tag{5.8.5}$$

При этом функция $E(R, t)$ удовлетворяет уравнению КПП (3), что отвечает самосогласованному приближению.

2. Коэффициент пространственной диффузии настолько велик, что соответствующее время диффузии τ_D много меньше всех остальных релаксационных времен. Тогда на временах $t - t_0 \gg \tau_D$ распределение $f(E, R, t)$ становится пространственно однородным и функция $f(E, t)$ удовлетворяет уравнению Фоккера — Планка (1.7).

5.8.2. Система взаимодействующих генераторов. Когерентная генерация. Наиболее полное статистическое описание системы N взаимодействующих генераторов может быть проведено на основе кинетического уравнения для «N-частичного» распределения

$$f_N(X, t), \quad X = (x_1, v_1, R_1, V_1, \ldots, x_N, v_N, R_N, V_N). \tag{5.8.6}$$

Переменные x_i, v_i характеризуют внутреннее движение генераторов, а R_i, V_i — движение генераторов как целого.

Рассмотрим частное поведение этой сложной системы, отвечающее когерентному движению генераторов системы. Предположим, что генераторы взаимодействуют через общую энергию (имеют общий источник питания и общую обратную связь). Тогда для суммарной энергии колебаний генераторов $\mathscr{E}$ в динамическом режиме имеет место следующее уравнение:

$$d\mathscr{E}/dt = (Na_{\text{н}} - \gamma - b\mathscr{E}), \quad \mathscr{E} = (1/2)\sum_{1\leqslant i\leqslant N}(v_i^2 + \omega_0^2 x_i^2). \tag{5.8.7}$$

Если наличие связи между генераторами не влияет на процесс пространственной диффузии генераторов и источники шума, действующие на внутренние степени свободы отдельных генераторов, независимы, то кинетическое уравнение для распределения $f(\mathscr{E}, R, t)$ имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} = ND\frac{\partial}{\partial \mathscr{E}}\left(\mathscr{E}\frac{\partial f}{\partial \mathscr{E}}\right) + \frac{\partial}{\partial \mathscr{E}}[(-Na_{\text{н}} + \gamma + b\mathscr{E})\mathscr{E}f] + D_{\text{п}}\frac{\partial^2 f}{\partial R^2}. \tag{5.8.8}$$

При $N = 1$ (отдельный генератор) уравнение (7) совпадает с динамическим уравнением (3) для энергии колебаний одного генератора, а кинетическое уравнение (8) — с уравнением (4).

Сравним стационарные решения уравнений (8), (4) при пространственно однородном распределении генераторов. Решение уравнения (4) совпадает с решением (1.8) уравнения Фоккера — Планка (1.7). В частных случаях (порога генерации и развитой генерации) выражение (1.8) принимает, соответственно, вид (1.13), (1.14).

Для уравнения (8) стационарное решение при пространственно однородном распределении имеет вид

$$f_0(\mathscr{E}) = \exp\frac{F - H}{ND}, \quad H = (-Na_{\text{н}} + \gamma)\mathscr{E} + \frac{1}{2}b\mathscr{E}^2. \tag{5.8.9}$$

По сравнению с (1.8) порог генерации осуществляется при условии $a_{\text{н}} = \gamma/N$ и, следовательно, понижается в N раз. При $a_{\text{н}} = 0$ и $b = 0$, т. е. для «идеального газа» невозбужденных генераторов, распределение (8) принимает вид

$$f_0(\mathscr{E}) = \frac{\gamma}{ND}\exp\left(-\frac{\gamma\mathscr{E}}{ND}\right), \quad \langle E\rangle = N\frac{D}{\gamma}. \tag{5.8.10}$$

В другом предельном случае — в режиме развитой генерации, когда параметр генерации $Db/Na_{\text{н}}^2 \ll 1$, — распределение (9) принимает вид

$$f_0 = \left(\frac{b}{2\pi ND}\right)^{1/2}\exp\left[-\frac{(\mathscr{E} - Na_{\text{н}}/b)^2}{2ND/b}\right], \quad \frac{\langle(\delta\mathscr{E})^2\rangle}{\langle\mathscr{E}\rangle^2} = \frac{Db}{Na_{\text{н}}^2} \propto N^{-1}. \tag{5.8.11}$$

Отсюда следует, что влияние коллектива приводит к снижению относительной дисперсии в N раз, что указывает на бо́льшую степень упорядоченности процесса генерации в системе, когда колебания когерентны. Количе-

ственную оценку увеличения степени упорядоченности можно провести на основе S-теоремы. Для этого согласно (1.14), (9) находим значения энтропии в расчете на один генератор:

$$S^{(1)} = \ln\left(\frac{2\pi D}{b}\right)^{1/2} + \frac{1}{2}, \qquad S^{(N)} = \ln\left(\frac{2\pi D}{Nb}\right)^{1/2} + \frac{1}{2}. \quad (5.8.12)$$

Поскольку соответствующие средние энергии одинаковы, то разность энтропий (12) определяет относительную степень упорядоченности двух генераторов (свободного и в среде):

$$S^{(1)} - S^{(N)} = \ln\sqrt{N} \geqslant 0, \qquad N \geqslant 1. \qquad (5.8.13)$$

Мы видим, что величина N (при фиксированном значении параметра накачки $a_н$) играет роль управляющего параметра. При этом производная по N для разности энтропий положительна:

$$\frac{d}{dN}\left(S^{(1)} - S^{(N)}\right) > 0, \qquad N \gg 1. \qquad (5.8.14)$$

Мы видим, что разность энтропий $S^{(1)} - S^{(N)}$ является функционалом Ляпунова Λ_S. Поскольку неравенства (13), (14) имеют одинаковые знаки, то в «пространстве» управляющего параметра N состояние отдельного генератора ($N = 1$) неустойчиво и с ростом N идет процесс самоорганизации.

Функционалы Ляпунова можно построить, разумеется, и для уравнений (4), (8), которые описывают временную эволюцию генераторов. Так, например,

$$\Lambda_F = F(t) - F_0 = D\int \ln\frac{f(E, R, t)}{f_0}\, f\, dE\, \frac{dR}{V} \geqslant 0, \qquad \frac{d\Lambda_F}{dt} \leqslant 0. \qquad (5.8.15)$$

Здесь f_0 — стационарное решение, а $f(E, R, t)$ — функция распределения в текущий момент. Из (15) следует, что стационарное состояние, определяемое заданными значениями параметров a, b, D, $\bar{D}$, является устойчивым.

Итак, на примере уравнения (3) продемонстрированы различные обобщения уравнений реакционно-диффузионного типа, которые в настоящее время служат базовыми уравнениями теории самоорганизации — синергетики. Приведенные обобщения — переход от уравнений для термодинамических функций $X(R, t)$ (например, $E(R, t)$) к соответствующим кинетическим уравнениям (например,

уравнениям (4), (8) для распределений $f(E, R, t)$, $f(\mathscr{E}, R, t)$). Естественно, что наиболее общим для системы генераторов является уравнение для «N-частичного» распределения (6), на основе которого можно получить наиболее полное статистическое описание процессов в системе генераторов.

Существенной является и другая возможность обобщения уравнения (3). Она состоит в использовании в качестве «элементов» системы более сложных генераторов. Так, например, вместо исходного динамического уравнения Ван дер Поля (1.4) можно использовать обобщенные уравнения (4.6) для энергии генераторов. Тогда, например при $k=2$, в отдельных элементах системы возможны ветвления энергии и, следовательно, возможны бистабильные состояния.

5.9. Кинетический подход в теории химически реагирующих сред, фазовых переходов и в гидродинамике

На примере броуновского движения генератора Ван дер Поля была показана возможность использования двух уровней описания: 1. На основе уравнения Колмогорова — Петровского — Пискунова (8.3) для «полевой переменной» $E(\mathbf{R}, t)$. 2. На основе кинетического уравнения (8.4) для функции распределения $f(E, \mathbf{R}, t)$, в котором одновременно учитывается как пространственная диффузия, так и диффузия по внутренним переменным рассматриваемого «элементарного» объекта. Подобное обобщение возможно, естественно, и для других систем. Приведем для иллюстрации простые примеры.

Вернемся к уравнению (4.8.10) для функции распределения $f(\delta n_e, t)$ флуктуаций плотности электронов в частично ионизованной плазме. В нем уже учтено случайное воздействие на внутренние переменные. Поскольку, однако, химическая реакция, сводящаяся в данном примере к процессу ионизации и рекомбинации, происходит локально, то может оказаться существенной и пространственная диффузия химически реагирующего комплекса. Тогда вместо (4.8.10) следует использовать более общее кинетическое уравнение для функции распределения $f(\delta n_e, \mathbf{R}, t)$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D\frac{\partial^2 f}{\partial (\delta n_e)^2} + \frac{\partial}{\partial \delta n_e}(\lambda \delta n_e f) + D_{\text{п}}\frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{R}^2}. \qquad (5.9.1)$$

Второй пример относится к теории фазовых переходов второго рода. Аналогом уравнения Колмогорова — Петровского — Пискунова здесь является уравнение Гинзбурга — Ландау для обобщенной поляризуемости (*Ландау*, *Лифшиц*, 1976; *Паташинский*, *Покровский*, 1982; *Климонтович*, IV, гл. 21)

$$\frac{\partial X(\mathbf{R}, t)}{\partial t} = (a - bX^2(\mathbf{R}, t))\, X(\mathbf{R}, t) + D_{\text{п}} \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{R}^2}. \qquad (5.9.2)$$

В критической области величина $a \sim T - T_{\text{кр}}$, и, следовательно, в критической точке $a = 0$. Значениям $a > 0$ отвечает менее симметричная (более упорядоченная) фаза.

Если, как и в (8.4), принять во внимание не только пространственную диффузию нелинейных «элементарных» объектов, но и случайные воздействия на внутренние переменные, то (при постоянной интенсивности этого воздействия D) приходим к кинетическому уравнению для распределения $f(X, \mathbf{R}, t)$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D\frac{\partial^2 f}{\partial X^2} + \frac{\partial}{\partial X}[(-a + bX^2)\, Xf] + D_{\text{п}} \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{R}^2}, \quad \int f\, dX \frac{d\mathbf{R}}{V} = 1. \qquad (5.9.3)$$

Уравнения (8.3), (8.4); (4.8.10), (1); (2), (3) служат примерами уравнений сплошной среды. Однако в каждом из рассмотренных случаев среда состоит из соответствующих нелинейных «элементарных» объектов и, следовательно, имеет «атомарную» структуру. В соответствии с изложенным выше учет крупномасштабных — кинетических флуктуаций может быть проведен путем введения в приведенные уравнения соответствующих источников Ланжевена.

С помощью распределений $f(\delta n_e, \mathbf{R}, t)$, $f(X, \mathbf{R}, t)$ могут быть построены функционалы Ляпунова (ср. (8.15)), которые полезны во многих практических приложениях.

Отметим, наконец, что кинетический подход эффективен и при описании флуктуационных процессов в гидродинамике. На этой основе может быть развит отличный от традиционного (гл. 6) подход к описанию гидродинамической турбулентности.

Мы вернемся к этому вопросу в Дополнении.

Глава 6

ТУРБУЛЕНТНОЕ ДВИЖЕНИЕ. СТРУКТУРА ХАОСА

> Я помню, что фон Карман в своем вступительном слове сказал, что, когда он, наконец, предстанет перед Создателем, первое откровение, о котором он бы просил, будет раскрытие тайн турбулентности.
>
> *Г. Моффат*

Турбулентное движение и по сей день остается одним из самых сложных и загадочных видов движения. Явление турбулентности было открыто при изучении течения несжимаемой жидкости в трубах и вследствие этого долгие годы рассматривалось лишь в курсах механики жидкости. Впервые, по-видимому, обсуждение турбулентности как физического явления появилось в курсе «Статистическая физика» лишь в 1982 г. (*Климонтович*, IV).

Такой «сдвиг» был обусловлен достигнутым в последние годы пониманием, что турбулентное движение является одним из самых распространенных видов движения в природе. Турбулентное движение стало широко исследоваться в атмосфере, в неравновесной плазме, в различных химически реагирующих средах, в различных полях (в частности, в неравновесном электромагнитном поле, в полях, создаваемых скоплениями звезд) и т. д.

Для систематического изучения турбулентности надо обратиться к специальной литературе. Цель настоящей главы состоит лишь в выявлении некоторых особенностей турбулентного движения, позволяющих рассматривать переход от ламинарного движения к развитому стационар-

ному турбулентному движению как процесс самоорганизации. Это показывает бо́льшую сложность и вместе с тем потенциально большее богатство турбулентного движения по сравнению с ламинарным.

Естественно, что в замкнутой системе турбулентное движение, созданное в начальный момент, деградирует к равновесному. Это лишний раз показывает, что процесс самоорганизации может иметь место лишь в открытой системе при наличии управляющих параметров.

6.1. Характерные особенности турбулентного движения. Основные проблемы

Во Введении уже было отмечено, что, хотя понятие «турбулентное движение» было введено более ста лет назад, на вопрос: что такое турбулентность? — определенного ответа нет и по настоящее время.

Не менее сложным оказался и вопрос: следует ли рассматривать переход от ламинарного движения к турбулентному как переход от более упорядоченного к менее упорядоченному движению или, напротив, как переход от более хаотического движения к более сложному, но и более упорядоченному движению?

Ответом на первый вопрос может быть перечисление основных характерных особенностей турбулентного движения.

1. Турбулентное движение является неравновесным и характеризуется макроскопическими переменными (функциями распределения в кинетической теории, плотностью, скоростью и температурой в гидродинамике, электрическими токами и зарядами, а также напряженностями электромагнитного поля в электродинамике и т. д.).

2. Турбулентное движение характеризуется очень большим числом макроскопических степеней свободы $N_{\text{турб}}$. Таким образом, число $N_{\text{турб}} \gg 1$, однако оно много меньше числа Авогадро N_A — характерного числа при микроскопическом описании.

3. Крупномасштабные — гидродинамические флуктуации играют при турбулентном движении (течении) существенную, а во многих случаях и определяющую роль. Вследствие этого для описания турбулентных движений надо выйти за рамки уравнений сплошной среды — уравнений (2.6.2) — (2.6.4), которые используются для описания ламинарных движений.

4. Турбулентное движение в силу чрезвычайной сложности — возбуждения большого числа макроскопических степеней свободы — практически *непредсказуемо*. Конкретная реализация турбулентного движения существенно меняется при малом изменении начальных и граничных условий, т. е. имеет место динамическая неустойчивость движения, описываемого уравнениями гидродинамики (2.6.2) — (2.6.4).

Естественно, что для изучения теории турбулентности надо обратиться к специальным руководствам и обзорам (*Монин*, *Яглом*, 1965, 1967; *Ландау*, *Лифшиц*, 1986; *Шлихтинг*, 1962; *Фрост*, *Моулден*, 1980; *Климонтович*, 1982, гл. 23; *Монин*, 1986). Цель настоящей главы — выявить некоторые особенности турбулентного движения как открытой системы и применить для анализа турбулентного движения изложенные выше методы статистической теории открытых систем.

Основное внимание уделяется здесь трем основным проблемам.

1. Выявление флуктуационного механизма перехода от ламинарного движения к турбулентному на примере стационарных течений в канале и в трубе. Это позволит описать начало нарушения профиля Пуазейля.

2. Установление связи критического числа Рейнольдса с одной из констант полуэмпирической теории развитой турбулентности. Это открывает возможность обобщения теории Прандтля — Кармана на произвольные числа Рейнольдса. Устанавливается связь турбулентной вязкости и производства энтропии.

3. Обсуждение свойств турбулентного движения, позволяющих трактовать переход от ламинарного движения к стационарному турбулентному движению как неравновесный фазовый переход от менее упорядоченного (ламинарного) к более упорядоченному (турбулентному) движению, т. е. как процесс самоорганизации.

Используемые критерии относительной степени упорядоченности основаны на S-теореме и на сопоставлении значений производства энтропии неустойчивого (в закритической области) ламинарного и устойчивого турбулентного движений. На основе результатов сравнения производства энтропии будет сформулирован «*принцип минимума производства энтропии в процессах самоорганизации*».

6.2. Несжимаемая жидкость. Уравнение Рейнольдса. Напряжения Рейнольдса

Вернемся к уравнениям гидродинамики (2.6.2)—(2.6.4) и используем их для несжимаемой жидкости. В рамках этой модели плотность и температура постоянны и $\operatorname{div}\mathbf{u}=0$. В соответствии с изложенным в п. 3.8.1 для описания гидродинамических течений с учетом флуктуаций используем уравнения гидродинамики для случайных (пульсирующих) функций (3.8.1). В выражении для тензора вязких напряжений (3.8.2) опустим молекулярный источник Ланжевена $\delta\pi_{ij}$, так как здесь нас интересуют лишь турбулентные флуктуации, интенсивности источников для которых, согласно (4.7.5), полностью определяются для несжимаемой жидкости скоростью $\tilde{\mathbf{u}}$.

Таким образом, для несжимаемой жидкости в качестве исходной запишем следующую систему уравнений для случайной скорости:

$$\partial\tilde{u}_i/\partial t+\partial\tilde{u}_i\tilde{u}_j/\partial r_j=\rho^{-1}\,\partial\tilde{p}/\partial r_i-\rho^{-1}\,\partial\tilde{\pi}_{ij}/\partial r_j, \qquad (6.2.1)$$

$$\Delta\tilde{p}=-\rho\,(\partial\tilde{u}_i/\partial r_j)\,\partial\tilde{u}_j/\partial r_i, \qquad (6.2.2)$$

$$\tilde{\pi}_{ij}=-\eta\,(\partial\tilde{u}_i/\partial r_j+\partial\tilde{u}_j/\partial r_i)\equiv-\eta\tilde{u}_{ij}. \qquad (6.2.3)$$

Эти уравнения и будут служить для описания как ламинарных, так и турбулентных течений.

Ламинарные течения характеризуются небольшим числом характерных параметров длины и времени. В развитом турбулентном потоке, напротив, число макроскопических степеней свободы очень велико — течение характеризуется целым спектром масштабов. Наибольшие — *основные* масштабы длины и времени — обозначим через L, T, а наименьшие — через L_0, T_0. Для *развитой* турбулентности выполняются неравенства

$$L\gg L_0\gg l_{\text{ф}}^{(\text{г})};\qquad T\gg T_0\gg\tau_{\text{ф}}^{(\text{г})}. \qquad (6.2.4)$$

Здесь $l_{\text{ф}}^{(\text{г})}$, $\tau_{\text{ф}}^{(\text{г})}$ — физически бесконечно малые масштабы при гидродинамическом описании. Они определяются формулами (2.6.11). Сглаживание микроскопических функций по объему $V_{\text{ф}}$ (или $\tau_{\text{ф}}$) определяет сглаженные функции $\tilde{u}$, $\tilde{\rho}$.

Проведем усреднение сглаженных функций по ансамблю Гиббса (см. 1.4) и представим их в виде сумм средних по ансамблю Гиббса и флуктуаций:

$$\tilde{u}_i=u_i+\delta u_i;\quad \tilde{p}=p+\delta p;\quad \delta\tilde{u}_{ij}=u_{ij}+\delta u_{ij}. \qquad (6.2.5)$$

Теперь усредним сами уравнения (1)—(3) для случайных функций. Уравнение для средней скорости имеет вид

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial r_j} = \rho^{-1}\frac{\partial p}{\partial r_i} - \rho^{-1}\frac{\partial \pi_{ij}}{\partial r_j} - \frac{\partial}{\partial r_j}\langle \delta u_i \delta u_j \rangle. \quad (6.2.6)$$

В него, по сравнению с уравнением Навье — Стокса, входит дополнительный член

$$\rho\langle \delta u_i(r, t)\delta u_j(r, t)\rangle$$

— *тензор напряжений Рейнольдса.*

Уравнения для средних по ансамблю $\mathbf{u}$, p не являются замкнутыми, так как в них входят вторые моменты флуктуаций $\delta\mathbf{u}$. Уравнения для вторых моментов содержат тройные корреляции флуктуаций $\delta\mathbf{u}$, δp, и т. д. Таким образом, в рамках модели сплошной среды получается бесконечная цепочка уравнений для моментов. В полном виде она не поддается решению, поэтому возникает проблема эффективного обрыва бесконечной системы уравнений — *проблема замыкания.* Каковы же основания для такого замыкания? Для ответа на этот вопрос надо более глубоко вникнуть в структуру турбулентного потока.

6.3. Развитая турбулентность. Турбулентная вязкость

Отложим пока вопрос о возникновении турбулентности. Предположим, что переход уже произошел и числа Рейнольдса $\mathrm{Re} \equiv R = uL/\nu$ настолько велики, что турбулентность можно считать развитой. Тогда выполняются неравенства (2.4).

Для дальнейшего удобно ввести обозначения для характерного числа Рейнольдса, определяемого минимальными масштабами турбулентного течения,

$$R^0_{\text{кр}} = u_0 L_0/\nu. \quad (6.3.1)$$

Этот постоянный параметр связан, как мы увидим, с одной из двух констант развитой теории турбулентности — константой Кармана $\varkappa = 0{,}4$.

Развитая турбулентность является *локально однородной* и *изотропной.* Для полностью однородной и изотропной турбулентности средняя скорость $\mathbf{u} = 0$ $(\delta\mathbf{u} = \tilde{\mathbf{u}})$. Вследствие этого уравнение баланса кинетической энер-

гии имеет простой вид

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho\frac{\langle\tilde{\mathbf{u}}^2\rangle}{2}\right) = -\rho\varepsilon, \qquad \varepsilon = \frac{\nu}{2}\left\langle\left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial r_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial r_i}\right)^2\right\rangle. \qquad (6.3.2)$$

Величина ε называется *параметром Колмогорова* и нам уже встречалась (см. (4.7.10)). Она определяла интенсивность эффективного источника Ланжевена (4.7.11) в уравнениях гидродинамики несжимаемой жидкости. Выражение (4.7.11) было в свою очередь получено с помощью (4.7.2) для среднего производства энтропии при турбулентном движении. Выражение (4.7.2) привело нас и к формуле (4.7.7) для турбулентной вязкости. Из (4.7.7) вытекает, что второй член в скобках, определяющий вклад крупномасштабных — турбулентных флуктуаций, пропорционален параметру ε — параметру Колмогорова.

Непосредственное использование турбулентной вязкости (4.7.7) при применении условия замыкания Кармана — Прандтля (см. ниже) затруднительно, поэтому, основываясь на результатах Колмогорова и Обухова, преобразуем (4.7.7) к более удобному для практических приложений виду.

Обозначим через L', T', u' характерные масштабы локально однородной турбулентности и выделим две подобласти масштабов:

инерционный интервал

$$L > L' > L_0, \quad T > T' > T_0; \qquad (6.3.3)$$

вязкий интервал

$$L' \sim L_0, \quad T' \sim T_0. \qquad (6.3.4)$$

Левые неравенства позволяют выделить область локально однородной турбулентности, в которой зависимость от основных масштабов не является явной. Правые неравенства позволяют при рассмотрении инерционного интервала пренебречь влиянием вязкости.

Возможность выделения инерционного интервала для развитой турбулентности обусловлена следующим.

Из определения диссипативной функции (2) вытекает связь пространственной спектральной плотности этой функции с спектральной плотностью средней кинетической энергии ($\tilde{u}_i \approx \delta u_i$)

$$\varepsilon_{\text{к}} = 2\nu k^2 (\tilde{u})^2_{\text{к}}. \qquad (6.3.5)$$

Естественно считать, что максимум средней кинетической энергии приходится на масштабы, близкие к основному L, т. е. на $k \approx 1/L$. Это допущение подтверждается экспериментальными исследованиями. Из соотношения (5) следует, что из-за наличия множителя k^2 функция $\varepsilon_к$ в области основных масштабов мала. Она максимальна на границе вязкого интервала.

На этом основании можно использовать следующую оценку для ε:

$$\varepsilon \sim \nu u_0^2/L_0^2. \tag{6.3.6}$$

С помощью формул (1), (6) находим три соотношения между масштабами L_0, T_0, u_0, которые содержат два параметра ε, $R^0_{кр}$:

$$u_0 \sim (\varepsilon L_0 R^0_{кр})^{1/3}, \quad u_0 \sim (\varepsilon T_0 R^0_{кр})^{1/2}, \quad T_0 \sim (L_0^2/\varepsilon R^0_{кр})^{1/3}. \tag{6.3.7}$$

Используем теперь гипотезу Колмогорова: в инерционном интервале статистические характеристики турбулентности полностью определяются параметром ε (здесь еще и $R^0_{кр}$), т. е. *не зависят от кинематической вязкости* ν. Основываясь на этой гипотезе, можно использовать (7) и для масштабов инерционного интервала L', T', u':

$$u' \sim (\varepsilon L' R^0_{кр})^{1/3}, \; u' \sim (\varepsilon T' R^0_{кр})^{1/2}, \quad T' \sim (L'^2/\varepsilon R^0_{кр})^{1/3}. \tag{6.3.8}$$

Первое из этих условий выражает закон Колмогорова — Обухова. Наличие в приведенных формулах параметра $R^0_{кр}$, который для области развитой турбулентности — порядка единицы, существенно при обобщении полуэмпирической теории на область перехода, а также при сопоставлении результатов расчета с экспериментальными данными (см. ниже).

Вернемся к формуле (4.7.7) для турбулентной вязкости. Преобразуем второй член в скобках, который пропорционален интенсивности крупномасштабных флуктуаций — точнее, величине ε. Для этого используем приведенные соотношения между масштабами. Учтем также, что турбулентная вязкость вводится через среднее производство энтропии, которое пропорционально не скоростям, а производным скоростей. Вследствие этого возникает зависимость не от числа Рейнольдса R, а от свя-

занного с ним законом сопротивления динамического числа Рейнольдса

$$R = R(R_*), \qquad R_* = v_* L/\nu. \tag{6.3.9}$$

Здесь v_* — динамическая скорость, связанная с напряжениями на стенке канала (см. ниже). В результате, например, для течения в плоском канале получаем следующее выражение для турбулентной вязкости (*Климонтович*, 1982; *Климонтович*, *Энгель-Херберт*, 1984)

$$\eta_{\text{турб}}(y) = \eta\left[1 + f(y)\, R_*/R^0_{\text{кр}}\right]. \tag{6.3.10}$$

Здесь введена функция $f(y)$ (ось y перпендикулярна стенкам канала ширины $2h$). Функция $f(y = \pm h) = 0$. Это обеспечивает равенство $\eta_{\text{турб}} = \eta$ на стенках. Функция $f(y)$ определяется по экспериментальным данным (*Рейхардт*, 1956; *Шлихтинг*, 1969). С учетом наличия ламинарного подслоя толщины $l_{\text{л}}$ функцию $f(y)$ можно представить в виде

$$f(y) = \begin{cases} 0, & h - l_{\text{л}} \leqslant |y| \leqslant h, \\ (1/2)\left[(1 - l_{\text{л}}/h)^2 - (y/h)^2\right], & 0 \leqslant |y| \leqslant h - l_{\text{л}}. \end{cases} \tag{6.3.11}$$

В заключение проведем оценку *числа степеней свободы* при развитом турбулентном течении. Число степеней свободы определяется отношением объемов, отвечающих масштабам L и L_0:

$$N_{\text{турб}} \sim L^3/L_0^3. \tag{6.3.12}$$

Используя определение числа Рейнольдса $R = uL/\nu$, а также формулы (1), (7) и (8) при замене $L' \to L$, получим соотношения между масштабами L, L_0 и соответствующими скоростями:

$$L/L_0 \sim \left(R/R^0_{\text{кр}}\right)^{3/4}, \qquad u/u_0 \sim (L/L_0)^{1/3}. \tag{6.3.13}$$

С помощью первого соотношения из (12) находим искомую оценку числа турбулентных степеней свободы через число Рейнольдса R и параметр $R^0_{\text{кр}}$:

$$N_{\text{турб}} \sim \left(R/R^0_{\text{кр}}\right)^{9/4}. \tag{6.3.14}$$

Отсюда видно, что для области развитой турбулентности, когда $R \gg R^0_{\text{кр}}$, число степеней свободы $N_{\text{турб}}$ очень велико. Напротив, для области перехода, когда $R^0_{\text{кр}} \sim R$, число степеней свободы $N_{\text{турб}} \sim 1$.

Теперь можно перейти к рассмотрению некоторых конкретных вопросов полуэмпирической теории развитой турбулентности в каналах.

6.4. Полуэмпирическая теория турбулентности Прандтля — Кармана

Рассмотрим двумерные стационарные течения Куэтта и Пуазейля в плоском канале, расстояние между стенками которого равно $2h$. Ось x направлена вдоль оси канала, а ось y — перпендикулярно стенкам канала. Для установившегося двумерного течения скорость $u_x \equiv u(y)$, $u_y = u_z = 0$, поэтому уравнение (2.6) принимает вид

$$-\frac{d}{dy}\langle \delta u_x \delta u_y \rangle + \nu \frac{d^2 u}{dy^2} = 0; \qquad -\frac{\Delta p}{\rho l}, \tag{6.4.1}$$

где Δp — перепад давления, l — длина канала. В правой части (здесь и ниже) значения до знака «;» относятся к течению Куэтта, а после — к течению Пуазейля. Граничные условия имеют вид

$$u(y = \pm h) = \pm u_0; \quad 0. \tag{6.4.2}$$

Динамическая скорость v_* и числа Рейнольдса определяются выражениями

$$\tau_h = \eta \left| \frac{du}{dy} \right|_{y=h} = \rho v_*^2; \qquad R = \frac{u2h}{\nu}, \qquad R_* = \frac{v_* h}{\nu}, \tag{6.4.3}$$

где τ_h — напряжение на стенке.

Интегрирование по y с учетом (2), (3) приводит к уравнению

$$-\langle \delta u_x \delta u_y \rangle + \nu\, du/dy = v_*^2; \quad -v_*^2 y/h \quad (-h \leqslant y \leqslant h). \tag{6.4.4}$$

Использовав определение турбулентной вязкости $\eta_{\text{турб}}(y) = \rho \nu_{\text{турб}}(y)$ по Карману — Прандтлю, получим

$$\langle \delta u_x \delta u_y \rangle = -(\nu_{\text{турб}}(y) - \nu)\, du/dy. \tag{6.4.5}$$

Можно переписать уравнение (4) в виде

$$\nu_{\text{турб}}(y)\, du/dy = v_*^2; \quad -v_*^2 y/h \quad (-h \leqslant y < h). \tag{6.4.6}$$

Оно, как (4), еще не является замкнутым, так как пока вместо одной неизвестной функции — $\langle \delta u_x \delta u_y \rangle$ в (4) введена другая — $\nu_{\text{турб}}(y)$ в (6). С целью замыкания используем для турбулентной вязкости выражение (3.10), в котором функция $f(y)$ выбирается в виде (3.11) (на основе экспериментальных данных).

Заметим, что соотношение Кармана — Прандтля (5) содержит три функции. С помощью уравнения (6) исключим одну из них — функцию du/dy. В результате получим прямую связь напряжения Рейнольдса с турбулентной вязкостью:

$$\langle \delta u_x \delta u_y \rangle = -\frac{\nu_{\text{турб}}(y) - \nu}{\nu_{\text{турб}}(y)} v_*^2; \qquad \frac{\nu_{\text{турб}}(y) - \nu}{\nu_{\text{турб}}(y)} v_*^2 \frac{y}{h}. \tag{6.4.7}$$

Мы видим, что зависимость напряжения Рейнольдса от y полностью определяется функцией $f(y)$ (3.11) и выражением (3.10) для $\nu_{\text{турб}}(y)$.

Детали расчета законов сопротивления, профилей скорости и других характеристик течения Куэтта и Пуазейля в плоском канале, а также течения Пуазейля в трубе можно найти в работах (*Шлихтинг*, 1969; *Миллионщиков*, 1969; *Новожилов*, 1977; *Климонтович*, *Энгель-Херберт*, 1984). Приведем лишь некоторые результаты, необходимые для дальнейшего изложения.

Для течения Куэтта в определении числа Рейнольдса (3) положим $u = u_0$. Тогда для ламинарного течения закон сопротивления имеет вид

$$R = 2R_*^2 \qquad (\text{или } u_0 = (v_*^2/\nu)\, h). \tag{6.4.8}$$

Приведем соответствующее выражение для развитого турбулентного течения $(R_* \gg R_{\text{кр}}^0)$:

$$R = 2R_{\text{кр}}^0 R_* \ln\left(2R_*/R_{\text{кр}}^0\right) + 2\delta R_*. \tag{6.4.9}$$

Здесь введено обозначение для безразмерного параметра δ, связанного с толщиной ламинарного подслоя $l_л$ (см. (3.11)): $\delta = (l_л/h)\, R_*$.

Сопоставим выражение (9) с законом сопротивления, установленным Рейхардтом по экспериментальным данным:

$$R = 5R_* \ln R_* + 14{,}5R_*. \tag{6.4.10}$$

На основании экспериментальных данных в правой части выделены два вклада: вклад, пропорциональный $R_* \ln R_*$, и вклад, пропорциональный R_*. Выражение (10) содержит две числовые константы (точнее, величины, очень слабо зависящие от числа Рейнольдса).

Мы видим, что выражения (9), (10) имеют одинаковую структуру. Количественное совпадение достигается при следующих значениях параметров:

$$R_{\text{кр}}^0 \equiv 1/\varkappa = 2{,}5, \qquad \delta = 7{,}8. \tag{6.4.11}$$

Величина $\varkappa$ и есть константа Кармана, о которой упоминалось выше.

Приведем выражения для профилей $u(y)$ ламинарного и турбулентного течений Куэтта. Для ламинарного течения

$$u(y) = (v_*^2/\nu)\, y = u_0 y/h, \qquad -h \leqslant y \leqslant h, \qquad (6.4.12)$$

и для развитого $(R_* \gg R_{\text{кр}}^0)$ турбулентного течения

$$u(y) = v_* R_{\text{кр}}^0 \ln\left[(R_*/R_{\text{кр}}^0)\, y/h\right] + \delta v_*. \qquad (6.4.13)$$

При $y = 2h$ отсюда (с учетом определения чисел Рейнольдса R, R_*) следует закон сопротивления (10). Формула (13) перестает «работать» при малых значениях y, так как при этом нарушается условие ее применимости.

Итак, на основе полуэмпирической теории можно произвести расчеты основных характеристик ламинарного и развитого турбулентного течений. Результаты расчетов течений Куэтта и Пуазейля в плоском канале (в трубе) в двух предельных случаях (ламинарное течение и развитая турбулентность) содержат два параметра $R_{\text{кр}}^0$, δ, которые при развитой турбулентности могут считаться постоянными (практически не зависят от числа Рейнольдса), а в приближении ламинарного течения исчезают из формул.

Наша ближайшая задача — попытаться обобщить полуэмпирическую теорию и на область перехода. При этом возникает новый параметр — критическое число Рейнольдса. Мы покажем, что для течения Пуазейля величина $R_{\text{кр}}$ может быть выражена через одну из констант полуэмпирической теории — константу δ. Тем самым обобщенная полуэмпирическая теория будет также содержать лишь два числовых параметра $R_{\text{кр}}^0 \equiv \varkappa^{-1}$, δ.

6.5. Возникновение турбулентности при стационарных течениях Куэтта и Пуазейля

6.5.1. Квазилинейное приближение. Рассмотрим, как и выше, двумерное стационарное течение в плоском канале; $\delta u(x, y, t)$ — отклонение скорости от стационарного течения Куэтта или Пуазейля. Оно выражается через функцию тока $\delta\psi$, которую задаем в виде $\varphi(y)$, умноженной на волновой фактор (форма, принятая в теории устойчивости):

$$\delta u_x = -\partial\delta\psi/\partial y, \quad \delta u_y = \partial\delta\psi/\partial x,$$
$$\delta\psi = \varphi(y)\exp(-i\omega t + ikx) + \text{к. с.} \qquad (6.5.1)$$

Комплексная функция $\varphi(y)$ удовлетворяет уравнению Орра — Зоммерфельда (*Шлихтинг*, 1969; *Монин*, *Яглом*, 1965, 1967; *Монин*, 1986), которое здесь удобно записать в нестандартном виде

$$-i(\omega - u(y)k + i\nu k^2)\left(\frac{d^2\varphi}{dy^2} - k^2\varphi\right) - ik\frac{d^2u}{dy^2}\varphi(y) = \\ = \nu\frac{d^2}{dy^2}\left(\frac{d^2\varphi}{dy^2} - k^2\varphi\right). \quad (6.5.2)$$

При такой записи диссипативные члены разделены на две группы: «резонансные» (они перенесены в левую часть) и «нерезонансные» (они оставлены в правой части уравнения). В дальнейшем «резонансные» члены учитываются точно, а «нерезонансные» — в нулевом приближении по малому параметру ν (по безразмерному параметру $1/R$). В результате приходим к уравнению второго порядка для комплексной функции:

$$\frac{d^2\varphi}{dy^2} - k^2\varphi = -(\omega/k - u(y) + i\nu k)^{-1}\frac{d^2u}{dy^2}\varphi(y). \quad (6.5.3)$$

Напряжение Рейнольдса в (4.1) выражается через функцию $\varphi(y)$:

$$\langle\delta u_x\delta u_y\rangle = ik[(d\varphi/dy)\varphi^* - (d\varphi^*/dy)\varphi], \quad (6.5.4)$$

поэтому система уравнений (4.1), (3) является замкнутой для функций $u(y)$, $\varphi(y)$.

Заметим, что в правой части равенства мы опустили знак усреднения — угловые скобки, так как в силу билинейности в правой части выпала зависимость по координате x. Тем самым отпала необходимость усреднения по координате — необходимость в операции $l^{-1}\int_0^l \ldots dx$, которая соответствует усреднению.

Для дальнейшего полезно также выражение для диагонального элемента тензора напряжений Рейнольдса

$$\langle\delta u_y\delta u_y\rangle = 2k^2|\varphi(y)|^2. \quad (6.5.5)$$

Используя выражения (4), (5), можно с помощью (3) получить уравнение, связывающее напряжения Рейнольдса $\langle\delta u_x\delta u_y\rangle$, $\langle\delta u_y\delta u_y\rangle$:

$$-\frac{d}{dy}\langle\delta u_x\delta u_y\rangle = \frac{\nu}{(\omega/k - u(y))^2 + \nu^2k^2}\frac{d^2u}{dy^2}\langle\delta u_y\delta u_y\rangle. \quad (6.5.6)$$

Система уравнений (4.1), (6) не является замкнутой, так как содержит три функции: u, $\langle \delta u_x \delta u_y \rangle$, $\langle \delta u_y \delta u_y \rangle$. Таким же путем, как было получено уравнение (6), можно получить уравнения и для остальных напряжений Рейнольдса $\langle \delta u_x \delta u_x \rangle$, $\langle \delta u_y \delta u_x \rangle$ и тем самым замкнуть систему. В этом, однако, нет необходимости, так как информация о возможности существования стационарного турбулентного течения (в рассматриваемом квазилинейном приближении) может быть получена и на основе уравнений (4.1), (6). Начнем с течения Куэтта.

6.5.2. Устойчивость стационарного ламинарного течения Куэтта. Заметим прежде всего, что для ламинарного течения Куэтта, когда флуктуации скорости $\delta \mathbf{u}$ тождественно равны нулю, система (4.1), (6) сводится к одному уравнению $d^2u/dy^2 = 0$, решение которого и приводит к ламинарному профилю течения Куэтта.

Допустим, что в рассматриваемом квазилинейном приближении существует стационарное решение с отличными от нуля напряжениями Рейнольдса. Тогда уравнение (6) при использовании (4.1) для течения Куэтта сводится к уравнению

$$1 + \frac{\nu}{(\omega/k - u(y))^2 + \nu^2 k^2} \langle \delta u_y \delta u_y \rangle = 0,$$

которое не может быть удовлетворено. Тем самым сделанное предположение не оправдалось и мы приходим к выводу, что в рамках рассматриваемого квазилинейного приближения ламинарное турбулентное течение устойчиво. Устойчивость ламинарного течения Куэтта подтверждается и при использовании устойчивости по линейному приближению (*Монин*, 1986).

6.5.3. Возникновение турбулентности при течении Пуазейля. Снова используем систему уравнений (4.1), (6), но теперь уже для течения Пуазейля. Покажем, что в отличие от течения Куэтта при течении Пуазейля может существовать стационарное течение с отличными от нуля напряжениями Рейнольдса.

Перейдем от уравнения (6) к интегральному уравнению. Для этого проинтегрируем по y в пределах от 0 до h и учтем равенства

$$\langle \delta u_x \delta u_y \rangle_{y=0,h} = 0. \qquad (6.5.7)$$

Обращение в нуль напряжения Рейнольдса при $y = h$ есть следствие граничного условия $\tilde{\mathbf{u}} = 0$ на стенке (условие прилипания). Второе равенство при $y = 0$ есть

следствие симметрии течения Пуазейля относительно оси $y=0$. Оно следует и из второго выражения (4.7) при $y=0$. В результате приходим к уравнению

$$\int_0^h \frac{\nu k}{(\omega/k-u(y))^2+\nu^2k^2}\frac{d^2u}{dy^2}\langle\delta u_y\delta u_y\rangle\,dy=0. \qquad (6.5.8)$$

Заметим, что мы пришли бы к этому же уравнению и при интегрировании по области $-h\leqslant y\leqslant h$, так как все сомножители под интегралом являются четными функциями y.

С помощью (4.1) для течения Пуазейля уравнение (8) можно записать в виде

$$\int_0^h \frac{\nu k}{(\omega/k-u(y))^2+\nu^2k^2}\left(\frac{d\langle\delta u_x\delta u_y\rangle}{dy}-\frac{\Delta p}{\rho l}\right)\langle\delta u_y\delta u_y\rangle\,dy=0. \qquad (6.5.9)$$

Уравнения (8), (9) удовлетворяются для ламинарного течения, когда флуктуации $\delta\mathbf{u}=0$. Мы увидим, что они удовлетворяются с большой точностью (по параметру $1/R$) и при отличных от нуля напряжениях Рейнольдса.

При расчете турбулентного движения в 6.3, 6.4 мы видели, что профиль $u(y)$ характеризуется двумя параметрами длины: шириной канала h и толщиной ламинарного подслоя $l_л=(\delta/R_*)h$. В последнее выражение входит одна из констант теории развитой турбулентности δ.

Наличие двух характерных масштабов длины проявляется уже в результатах численного решения уравнения Орра — Зоммерфельда (2), т. е. в линейной теории гидродинамической устойчивости. Так, в работах (*Томас*, 1953; *Нахтшейм*, 1964) найдено комплексное решение $\varphi(y)$ уравнения Орра — Зоммерфельда. Расчеты показали, что максимальное значение $\operatorname{Im}\varphi(y)$ достигается на расстоянии порядка $l_л$ от стенки. Результаты этих расчетов приведены в книге (*Ланда*, 1983, гл. 14).

Основываясь на этих результатах, введем сразу два характерных масштаба

$$h,\quad l_л=(\delta/R_*)h\ll h \qquad (6.5.10)$$

и в теории перехода от ламинарного течения к турбулентному. Приведенные ниже оценки показывают, что новая константа δ в (10) близка по значению к величине $\delta=7{,}8$ теории развитой турбулентности. Это показывает, что при рассмотрении области перехода нет необходимо-

сти вводить новую константу, кроме уже введенных в теории развитой турбулентности констант $R^0_{кр} \equiv \varkappa^{-1} = 2{,}5$; $\delta = 7{,}8$.

Вернемся к уравнению (8). Первый сомножитель под интегралом указывает на наличие в некоторой точке y_0 волнового резонанса $\omega/k = u(y)$. Ширина резонанса порядка $1/R$ при $kh \approx 1$. Таким образом, в нулевом приближении резонансную кривую можно заменить на δ-функцию:

$$\frac{\nu k}{(\omega/k - u(y))^2 + \nu^2 k^2} \to \pi\delta(\omega/k - u(y_0)).$$

В результате уравнение (8) при $u(y_0) = \omega/k$ принимает вид

$$d^2u/dy^2|_{y_0} = 0. \qquad (6.5.11)$$

Таким образом, критерием зарождения турбулентности является появление точки перегиба при значении $y = y_0$, определяемом условием волнового резонанса. Естественно считать, что точка y_0 близка к точке максимума функции $\operatorname{Im}\varphi(y)$ и, следовательно, $y_0 \approx h - l_л$. Нет необходимости требовать точного выполнения условия (11). Достаточно, чтобы была мала вторая производная профиля (по параметру $1/R$).

Экспериментальные исследования изменения профиля Пуазейля при переходе через критическое значение $R_{кр}$ проводились методом лазерной доплеровской анемометрии (*Дубнищев*, *Рынкевичус*, 1982). На профиле скорости $u(y)$ при $R = R_{кр}$ было обнаружено изменение, соответствующее проявлению (в пределах точности эксперимента) точки перегиба в области, примыкающей к стенке канала.

6.5.4. Уравнение для профиля скорости в критической области. Проведем оценку критического числа Рейнольдса, второй производной профиля в точке волнового резонанса y_0, а также опишем качественно изменение профиля Пуазейля в области перехода.

Вернемся к уравнениям (4.1), (6) и исключим производную напряжения Рейнольдса $d\langle\delta u_x \delta u_y\rangle/dy$. В результате придем к уравнению

$$\left[\frac{\langle\delta u_y \delta u_y\rangle}{(\omega/k - u(y))^2 + \nu^2 k^2} + 1\right]\nu\frac{d^2u}{dy^2} = -\frac{\Delta p}{\rho l}. \qquad (6.5.12)$$

Оно не является замкнутым, так как наряду с функцией $u(y)$ в него входит напряжение Рейнольдса $\langle\delta u_y \delta u_y\rangle$.

Из (8) следует, что в силу узости волнового резонанса при $R \gg 1$ (напомним, что критическое число Рейнольдса для течения Пуазейля более 10^3) достаточно иметь оценку напряжения Рейнольдса в точке резонанса. Проведем эту оценку, используя понятие макроскопического числа степеней свободы $N_{\text{турб}}$ при турбулентном движении. Наличие двух параметров длины дает возможность определить $N_{\text{турб}}$ через отношение двух характерных объемов:

$$N_{\text{турб}} = h^3/l_{\text{л}}^3. \tag{6.5.13}$$

Тем самым число степеней свободы при ламинарном течении принимается за единицу.

Результаты физических и численных экспериментов свидетельствуют о том, что возбуждение турбулентности при течении Пуазейля является жестким. Это означает, что рассматриваемое нами стационарное течение может возникнуть лишь при конечных значениях напряжения Рейнольдса $\langle \delta u_y \delta u_y \rangle$. Оценим это значение по формуле

$$\langle \delta u_y \delta u_y \rangle / \langle u \rangle^2 = N_{\text{турб}}^{-1}, \tag{6.5.14}$$

которая связывает относительную флуктуацию скорости с макроскопическим числом степеней свободы. В (14) $\langle u \rangle$ — средняя скорость. Она связана с максимальной скоростью $u_{\max} \equiv u$, через которую выражается число Рейнольдса $R = uh/\nu$, соотношением $\langle u \rangle = (2/3)u$. С учетом этого приходим к следующему выражению для напряжения Рейнольдса:

$$\langle \delta u_y \delta u_y \rangle = (4/9)\, N_{\text{турб}}^{-1} u^2. \tag{6.5.15}$$

Подстановка этого выражения в (12) приводит к замкнутому уравнению для скорости:

$$\left[\frac{4}{9} N_{\text{турб}}^{-1} \frac{u_{\max}^2}{(\omega/k - u(y))^2 + \nu^2 k^2} + 1 \right] \nu \frac{d^2 u}{dy^2} = -\frac{\Delta p}{\rho l} = -\frac{v_*^2}{h}. \tag{6.5.16}$$

Введем безразмерные переменные

$$u' = u/u_{\max}, \qquad y' = y/h, \qquad \omega/ku = c;$$

$$R = uh/\nu, \qquad R_* = v_* h/\nu$$

и используем закон сопротивления для ламинарного течения Пуазейля

$$2R = R_*^2, \tag{6.5.17}$$

который приближенно справедлив и в области перехода. Используем, наконец, равенство $c = u(y_0)$ (см. (11)). В результате, опуская штрихи у безразмерных переменных, приходим к уравнению

$$\left[\frac{(4/9)\,N_{\text{турб}}^{-1}}{(u(y_0)-u(y))^2+R^{-2}}+1\right]\frac{d^2u}{dy^2}=-\frac{R_*^2}{R}=-2. \quad (6.5.18)$$

Чтобы найти связь критического числа Рейнольдса $R_{\text{кр}}$ с числом $N_{\text{турб}}$, положим в (18) $y = y_0$, т. е. рассмотрим точку волнового резонанса. Это приводит нас к уравнению

$$\left[(4/9)\,N_{\text{турб}}^{-1}R^2+1\right]d^2u/dy^2=-2. \quad (6.5.19)$$

В области перехода, когда $R_{\text{кр}} \sim N_{\text{турб}}$ (см. ниже), второй член в скобках порядка $1/R$ по отношению к первому. С учетом этого приходим к следующему выражению для второй производной профиля скорости в точке резонанса:

$$|\,d^2u/dy^2\,|_{y=y_0}=(2/R)\,(9/4)\,N_{\text{турб}}R^{-1}. \quad (6.5.20)$$

Вернемся к условию (11), которое рассматривалось в качестве критерия зарождения турбулентности при течении Пуазейля. Мы уже отмечали, что (11) следует понимать лишь как условие малости второй производной скорости в точке резонанса по параметру $1/R$. С учетом сомножителя 2, который возник в (18) при использовании закона сопротивления (17), приходим вместо (11) к равенству ($R = R_{\text{кр}}$)

$$|\,d^2u/dy^2\,|_{y=y_0}=2/R_{\text{кр}}. \quad (6.5.21)$$

При этом критическое число Рейнольдса выражается через число степеней свободы:

$$R_{\text{кр}}=(9/4)\,N_{\text{турб}}. \quad (6.5.22)$$

Используя определение (13), можем выразить число $R_{\text{кр}}$ через отношение двух характерных параметров длины:

$$R_{\text{кр}}=(9/4)\,(h/l_{\text{л}})^3; \quad (6.5.23)$$

с учетом определения $l_{\text{л}}$ (см. (10)) критическое число Рейнольдса выражается через константу δ:

$$R_{\text{кр}}=(8/5)\,(\delta/2)^6. \quad (6.5.24)$$

Отождествим константу δ в (24) с константой $\delta = 7{,}8$ теории развитой турбулентности. Это приводит к числовому значению для критического числа Рейнольдса $R_{\text{кр}} = 5623$, которое близко к значению $R_{\text{кр}} = 5780$, получен-

ному при численном решении уравнения Орра — Зоммерфельда (*Томас*, 1953), и к значению $R_{кр} = 5772$ (*Орзаг*, 1971). Обзор литературы и результаты численных расчетов вторичных течений в плоских каналах приведены в работе (*Рождественский*, *Симакин*, 1984).

Не следует переоценивать значение приведенных числовых оценок. Существенно то, что проведенные расчеты проливают дополнительный свет на характер возникновения турбулентного течения. Более того, они открывают возможность обобщения рассмотренной в **6.4** полуэмпирической теории на область перехода без введения дополнительных констант.

Рассмотрим вариант такого обобщения, но прежде заметим, что константу δ можно рассматривать как одно из характерных чисел Рейнольдса

$$R_{**} = v_* \delta_л / \nu = \delta. \qquad (6.5.25)$$

Полезными оказываются и другие числа Рейнольдса, определяемые комбинациями двух скоростей u, v_* и двух параметров длины h, $l_л$. В связи с этим напомним, что вторая константа теории развитой турбулентности $R^0_{кр}$ связанная с числом Кармана $\varkappa$, также представлялась как число Рейнольдса, которое, однако, определялось параметрами (масштабами u_0, L_0) развитой турбулентности.

6.5.5. Обобщение условия замыкания Кармана — Прандтля на область перехода. Итак, нарушение ламинарного течения Пуазейля при $R = R_{кр}$ происходит в малой области около точки резонанса y_0, т. е. носит локальный характер. После этого происходит «расплывание» локального возмущения по всему профилю. В результате формируется состояние, которое можно рассматривать как «начальное» при использовании полуэмпирической теории, основанной на понятии турбулентной вязкости $\nu_{турб}(y)$.

Для учета вклада турбулентной вязкости перепишем (12) в виде

$$\frac{\langle \delta u_y \delta u_y \rangle}{(\omega/k - u(y))^2 + \nu^2 k^2} \nu \frac{d^2 u}{dy^2} + \frac{d}{dy}(\nu_{турб}(y)) \frac{du}{dy} = -\frac{\Delta p}{\rho l}. \qquad (6.5.26)$$

Ранее турбулентная вязкость определялась формулами (3.10), (3.11). Это позволяло для функции $u(y)$ использовать уравнение (4.6). Мы видели, что на этом уровне удается описать два предельных течения: ламинарное и стационарное развитое турбулентное течение.

Полученное соотношение (23) позволяет обобщить выражение для турбулентной вязкости с целью качественного описания на уровне полуэмпирической теории и переходной области. С этой целью в (3.10) проводим замену

$$\frac{R_*}{R^0_{\text{кр}}} \to \frac{R_*}{R^0_{\text{кр}}} \frac{R - R_{\text{кр}}}{(R - R_{\text{кр}}) + R_{\text{кр}}} \theta(R - R_{\text{кр}}), \qquad (6.5.27)$$

где $\theta(x)$ — функция Хевисайда. Здесь учтено, что ширина области перехода $\Delta R \sim R_{\text{кр}}$. В области развитой турбулентности введенный дополнительный фактор обращается в единицу.

Роль первого (локального) члена в левой части уравнения (26) существенна лишь в непосредственной близости критической точки. Уже при небольших превышениях над порогом уравнение (26) сводится к уравнению полуэмпирической теории (4.6) для функции $u(y)$. Теперь, однако, турбулентная вязкость определяется выражениями (3.10), (3.11), (27). Это позволяет на уровне полуэмпирической теории качественно описать переход от ламинарного течения к турбулентному при произвольных значениях числа Рейнольдса. При этом переход от ламинарного течения к турбулентному выглядит как неравновесный фазовый переход (*Эбелинг*, *Климонтович*, 1984).

Проведенное нами рассмотрение перехода к турбулентному течению основано в значительной степени на квазилинейном приближении. Более последовательная нелинейная теория развитого турбулентного движения в несжимаемой жидкости до настоящего времени еще не развита, хотя и имеется несомненный прогресс в этом направлении (*Маслов*, 1986). В связи с этим полезен сравнительный анализ различных способов замыкания, приводящих к уравнениям разной сложности. В качестве примера отметим работу (*Зубарев*, *Морозов*, *Трошкин*, 1986).

6.6. Производство энтропии при ламинарном и турбулентном течениях

Итак, есть некоторые основания рассматривать переход от ламинарного течения к турбулентному как пример неравновесного фазового перехода. В качестве параметра порядка можно принять, например, напряжение Рейнольдса $\langle \delta u_x \delta u_y \rangle$, которое связано с турбулентной вяз-

костью вторым соотношением (4.7)

$$\langle \delta u_x \delta u_y \rangle = \left(v_*^2 y/h\right)\left(\nu_{\text{турб}}(y) - \nu\right)/\nu_{\text{турб}}(y). \qquad (6.6.1)$$

Турбулентная вязкость определяется формулами (3.10), (3.11), (5.27). Из (5.27) следует, что в критической точке $\nu_{\text{турб}} = \nu$ и, следовательно, на уровне полуэмпирического описания, т. е. при пренебрежении локальным источником, напряжение Рейнольдса обращается в нуль.

При фазовых переходах имеет место увеличение степени упорядоченности. На примере генератора Ван дер Поля (п. 5.5.2) мы видели, что подобное изменение степени упорядоченности имеет место и при неравновесных фазовых переходах.

В качестве характеристики сравнительной меры упорядоченности в гл. 5 использовалась перенормированная к заданному значению средней эффективной энергии энтропия Больцмана — Гиббса — Шеннона. Этот критерий, основанный на S-теореме, используется ниже и для оценки относительной степени упорядоченности ламинарного и турбулентного движений. Прежде, однако, мы рассмотрим другой критерий, основанный на сопоставлении значений производства энтропии ламинарного и турбулентного движений.

Используем в качестве исходного выражение (4.7.2) для среднего значения производства энтропии с учетом турбулентных флуктуаций. Это выражение послужило нам для определения турбулентной вязкости (4.7.7). С учетом этого определения (4.7.2) для среднего значения производства энтропии можно переписать в виде

$$\langle \tilde{\sigma} \rangle \equiv \sigma_{\text{турб}} = (\rho/2T)\,\nu_{\text{турб}}\left(\partial u_i/\partial r_j + \partial u_j/\partial r_i\right)^2. \qquad (6.6.2)$$

Конкретизируем эту формулу для стационарного течения в плоском канале. Квадрат тензора в этом случае выражается через производную скорости потока следующим образом:

$$\left(\partial u_i/\partial r_j + \partial u_j/\partial r_i\right)^2 = 2\left(du/dy\right)^2. \qquad (6.6.3)$$

Подставим это выражение в (2) и используем определение турбулентной вязкости (3.10), (3.11). В результате производство энтропии

$$\sigma_{\text{турб}}(y) = \rho\nu_{\text{турб}}(y)\,T^{-1}\left(du/dy\right)^2. \qquad (6.6.4)$$

Дальнейшие вычисления проведем для течения Куэтта.

С помощью первого уравнения (4.6) из (4) исключим производную du/dy. В результате получим для локального

$\sigma_{\text{турб}}(y)$ и интегрального $\sigma_{\text{турб}}$ производства энтропии следующие выражения:

$$\sigma_{\text{турб}}(y) = (\rho/T)\, v_*^4 \nu_{\text{турб}}^{-1}(y), \qquad \sigma_{\text{турб}} = h^{-1} \int_0^h \sigma_{\text{турб}}(y)\, dy. \tag{6.6.5}$$

Используем последнюю формулу для сравнения степени хаотичности различных состояний *по критерию производства энтропии*. При этом существенно следующее.

Напомним, что расчет энтропии по S-теореме проводился при дополнительном условии (1.12.4), т. е. при заданном значении средней эффективной функции Гамильтона рассматриваемой открытой системы. Многочисленные примеры конкретизации этого условия приведены в гл. 5.

Расчет производства энтропии с целью оценки относительной степени упорядоченности различных состояний также следует проводить при некотором дополнительном условии. Как, однако, выбрать это дополнительное условие? Рассмотрим *одну из возможностей*.

Примем во внимание, что использованные нами выражения (2), (4), (5) являются следствием более общего выражения (4.7.2) для производства энтропии. В нем учитывается как вклад усредненного движения, так и вклад флуктуаций скорости. При ламинарном течении, когда вклад флуктуаций скорости $\delta\mathbf{u}$ пренебрежимо мал, производство энтропии полностью определяется тензором *производных скорости*.

Можно, таким образом, выделить два класса характеристик в гидродинамике. Первый класс определяется скоростью движения, а второй — производными скорости. Соответственно этому вводятся и два характерных числа Рейнольдса R, R_*, связь которых (3.9) определяет закон сопротивления. Число Рейнольдса R выражается через характерную скорость потока, а число R_* — через так называемую динамическую скорость v_*. Последняя связана с производной скорости, т. е. с напряжением на стенке канала (см. (4.3)).

Это указывает на *одну*, но *естественную* возможность дополнительного условия при сопоставлении значений производства энтропии при разных видах течений. Именно, произведем сравнение при одинаковых напряжениях на стенке. Согласно (4.3) это означает, что

$$\nu \,|\, du/dy \,|_{y=h} = v_*^2 = \text{const}. \tag{6.6.6}$$

Итак, будем считать в формулах (5) для производства энтропии течения Куэтта в плоском канале величину v_* заданной и рассмотрим два значения интегрального производства энтропии при числах $R > R_{кр}$.

1. Рассмотрим стационарное турбулентное течение, которое при условии $R > R_{кр}$ является устойчивым. Тогда в (5) для турбулентной вязкости $\nu_{турб}(y)$ надо использовать выражения (3.10), (3.11). Сохраняем для него обозначение $\sigma_{турб}$.

2. Рассмотрим воображаемое мысленно ламинарное течение, которое при $R > R_{кр}$ не является устойчивым и, следовательно, не может существовать в качестве стационарного течения. Обозначим его через $\sigma_л$. Для расчета этой величины по формулам (5) в них для $\nu_{турб}$ надо взять значение обычной вязкости, т. е. положить $\nu_{турб} = \nu$.

Проводя соответствующие вычисления и учитывая условие постоянства напряжения на стенке, получим следующее выражение для отношения значений $\sigma_{турб}/\sigma_л$ (*Климонтович, Энгель — Херберт*, 1984):

$$\sigma_{турб}/\sigma_л = R/2R_*^2 \leqslant 1. \qquad (6.6.7)$$

Мы видим, что отношение энтропий устойчивого — турбулентного и неустойчивого — ламинарного течений полностью определяется законом сопротивления $R = R(R_*)$.

Для числа Рейнольдса $R < R_{кр}$, когда существует лишь одно ламинарное течение, т. е. «воображаемое» течение становится реальным, закон сопротивления для течения Куэтта определяется выражением (4.8) и, следовательно, правая часть в (7) равна единице, т. е. $\sigma_{турб} = \sigma_л$.

Для развитого турбулентного течения ($R_* \gg R_{кр}^0$, δ) закон сопротивления определяется выражением (4.9) и, следовательно,

$$\sigma_{турб}/\sigma_л = \left(R_{кр}^0 \ln R_* + \delta\right)/R_* < 1. \qquad (6.6.8)$$

Для области перехода ($R \gtrsim R_{кр}$)

$$\sigma_{турб}/\sigma_л = 1 - a(R - R_{кр})/R_{кр} < 1, \qquad a \approx 1. \qquad (6.6.9)$$

Таким образом, в обоих случаях отношение $\sigma_{турб} < \sigma_л$.

Аналогичный результат получается и для стационарного течения Пуазейля в трубе. Именно, отношение энтропий

$$\sigma_{турб}/\sigma_л = 2R/R_*^2 \leqslant 1. \qquad (6.6.10)$$

Знак равенства относится к ламинарному течению, так как в этом случае закон сопротивления имеет вид $2R = R_*^2$.

На основании приведенных результатов расчетов приходим к выводу, что при прохождении точки бифуркации $R = R_{кр}$ реальный процесс идет по пути с меньшим производством энтропии. Это служит одним из признаков большей упорядоченности стационарного турбулентного движения по сравнению с ламинарным и дает тем самым основание рассматривать переход от ламинарного движения к стационарному турбулентному движению как пример процесса самоорганизации. К такому же выводу мы придем в 6.8 при анализе эволюции энтропии при переходе от ламинарного течения к турбулентному.

6.7. Принцип наименьшей диссипации и принцип минимума производства энтропии в процессах самоорганизации

Вариационные принципы в гидродинамической теории применяются в различных формах с самого ее зарождения (см., например, *Джозеф*, 1981). Существенный прогресс в этом вопросе достигнут в работах (*Гольдштик*, 1968; *Гольдштик*, *Штерн*, 1977; *Христов*, 1979; *Христов*, *Нартов*, 1984). Отметим кратко лишь результаты последней из указанных работ.

Эта работа основана на принципе наименьшей диссипации, т. е. фактически на минимизации функционала, определяемого интегралом по рассматриваемой области течения от производства энтропии (4.7.2). Для течения Пуазейля в плоском канале это условие можно записать в виде

$$\int_0^h [\nu (du/dy)^2 + \varepsilon(y)]\, dy, \qquad \varepsilon = (\nu/2)\langle(\partial\delta u_i/\partial r_j + \partial\delta u_j/\partial r_i)^2\rangle. \tag{6.7.1}$$

Минимизация производится при ограничении, которое накладывается на среднюю скорость и флуктуации скорости $\delta\mathbf{u}$ вторым уравнением (4.1), т. е. усредненным уравнением Навье — Стокса. Уравнение (4.1) содержит лишь одну компоненту тензора Рейнольдса $\langle\delta u_x\delta u_y\rangle$, а в (1) присутствуют все компоненты тензора для двумерного течения. По этой причине функционал (1) и

уравнение (4.1) для течения Пуазейля

$$-\langle \delta u_x \delta u_y \rangle + \nu\, du/dy = -v_*^2 y/h \qquad (6.7.2)$$

еще недостаточны для решения вариационной задачи. Возможны два пути: использование того или иного полуэмпирического способа замыкания или задание дополнительной информации о случайных полях δu_x, δu_y, достаточной для получения замкнутых уравнений, которые решаются численными методами. Результаты расчета показывают, в частности, что при числах Рейнольдса $R_* = 10$ возникает стохастическое — турбулентное состояние с меньшей диссипацией, т. е. (для несжимаемой жидкости) с меньшим производством энтропии. Это согласуется, как мы видим, с результатами расчетов, приведенных в 6.6.

Теперь возвратимся к результатам, изложенным в 1.18. Там был сформулирован «принцип минимума производства энтропии в стационарных состояниях» — принцип Пригожина. Он выражается неравенствами (1.18.1). Его справедливость была, однако, доказана лишь для линейных обратимых процессов, т. е. в рамках линейной необратимой термодинамики. Для реальных нелинейных систем общее доказательство отсутствует.

Приведенные же выше результаты расчета производства энтропии при переходе от ламинарного течения к турбулентному, выражаемые неравенствами (6.7), (6.10), относятся к реальной нелинейной системе. Основываясь на этом конкретном результате — на неравенстве (1.18.2), в 1.18 и был сформулирован «Принцип минимума производства энтропии в процессах самоорганизации». Он выражается неравенством (1.18.3).

Этот принцип соответствует принципу минимума диссипации энергии лишь для несжимаемой жидкости. Он является существенно более общим и его можно, в частности, проверить на примерах открытых систем, рассмотренных в гл. 5.

Проведем, наконец, сравнение энтропий ламинарного и стационарного турбулентного течений.

6.8. Эволюция энтропии при переходе от ламинарного течения к турбулентному

Во Введении было отмечено, что на вопрос: является ли турбулентное движение более хаотическим (менее упорядоченным), чем ламинарное,— до настоящего

времени нет однозначного ответа. Подавляющее число исследователей трактуют турбулентное движение как хаотическое. Имеется, однако, и другая точка зрения (*Климонтович*, IV; *Пригожин* и *Стингерс*, 1986). Число сторонников этой точки зрения быстро возрастает.

Естественно, что для подтверждения той или иной точки зрения необходимы количественные критерии. Один из таких критериев, основанный на расчетах производства энтропии, уже был нами рассмотрен. Приведем теперь результаты расчета, основанные на S-теореме (*Климонтович*, 1984).

Исходим из того, что в стационарном ламинарном потоке имеется локальное равновесие частиц среды, распределение координат и скоростей которых описывается локальным распределением Максвелла

$$f_л(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u}_л(\mathbf{r}))^2}{2kT}\right]. \qquad (6.8.1)$$

Здесь $\mathbf{u}_л(\mathbf{r})$ — средняя скорость ламинарного потока. Предполагаем, что жидкость несжимаема, поэтому $\rho = \text{const}$ и $T = \text{const}$. С помощью распределения (1) определяем локальную энтропию:

$$S_л(\mathbf{r}) = -kn \int f_л(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \ln f_л(\mathbf{r}, \mathbf{v})\, d\mathbf{v}, \qquad n = N/V. \qquad (6.8.2)$$

При турбулентном течении скорость потока $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t)$ является случайной функцией. Случайным (пульсирующим) является, следовательно, и соответствующее распределение Максвелла

$$\tilde{f}_{турб}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m(\mathbf{v} - \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t))^2}{2kT}\right). \qquad (6.8.3)$$

Мерой неопределенности может служить среднее значение случайной (пульсирующей) энтропии:

$$S_{турб} = \langle \tilde{S}_{турб} \rangle = -kn \int \langle \tilde{f}_{турб}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \ln \tilde{f}_{турб}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \rangle\, d\mathbf{v}. \qquad (6.8.4)$$

Как же теперь сформулировать дополнительное условие (1.12.4), при котором разность энтропий $S_л$, $S_{турб}$ может служить мерой относительной степени упорядоченности ламинарного и турбулентного течений?

Чтобы ответить на этот вопрос, обратимся к распределению (1). Из него следует, что при локальном равновесии роль функции Гамильтона играет кинетическая

энергия относительного движения, т. е. энергия в системе координат, связанной со средней скоростью потока. На этом основании дополнительное условие (1.12.4) задаем в виде

$$\int \frac{m(\mathbf{v}-\mathbf{u}_{\text{л}}(\mathbf{r}))^2}{2} f_{\text{л}}\, d\mathbf{v} = \int \frac{m(\mathbf{v}-\mathbf{u}_{\text{турб}}(\mathbf{r}))^2}{2} \langle \tilde{f} \rangle\, dv. \quad (6.8.5)$$

Здесь $\mathbf{u}_{\text{турб}}$ — усредненная скорость турбулентного потока: $\mathbf{u}_{\text{турб}} = \langle \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t) \rangle$, $\langle \tilde{f} \rangle$ — усредненное случайное (пульсирующее) распределение Максвелла.

Сравним условие (5) с соответствующим дополнительным условием при анализе эволюции энтропии в генераторе Ван дер Поля. Перенормировка в распределениях (5.1.12)—(5.1.14) производилась путем изменения интенсивности шума (см. (5.1.16)). Этим достигалось равенство средних энергий для состояний генератора с распределениями (5.1.12)—(5.1.14).

Из формул (5.1.16) следует, что интенсивность шума (эффективная температура) $\tilde{D}_1$ в состоянии (1), принятом за физический хаос, больше, чем в состоянии развитой генерации (3). При этом в состояние (1) вводится хаотическое движение, которое в состоянии развитой генерации становится более упорядоченным.

Дополнительное условие (5) приводит здесь к аналогичному следствию. Действительно, из него вытекает, что при расчете энтропий $S_{\text{л}}$, $S_{\text{турб}}$ ламинарное и турбулентное течения надо сравнивать при разных температурах, причем температура турбулентного движения

$$T_{\text{турб}} = T - (m/3)\langle(\delta\mathbf{u})^2\rangle \qquad (T \equiv T_{\text{л}}) \qquad (6.8.6)$$

является более низкой. Разность температур $T_{\text{турб}}$, T определяется суммой диагональных элементов тензора напряжений Рейнольдса.

Используя приведенные формулы, находим разность значений энтропий ламинарного и турбулентного течений, вычисленных в соответствии с S-теоремой:

$$T(S_{\text{л}} - S_{\text{турб}}) = \frac{3}{2} kTn \ln \frac{kT}{kT - (m/3)\langle(\delta\mathbf{u})^2\rangle} \approx \frac{mn}{2}\langle(\delta\mathbf{u})^2\rangle. \quad (6.8.7)$$

Таким образом, при условии (5) энтропия усредненного турбулентного течения меньше, чем ламинарного. Это означает, что стационарное турбулентное течение является более упорядоченным, чем ламинарное. Тем самым

переход от ламинарного течения к турбулентному по критерию S-теоремы представляет собой процесс самоорганизации.

Полезно пояснить следующее.

Бо́льшая организованность турбулентного течения по сравнению с ламинарным проявляется, в частности, в характере переноса импульса. Именно, перенос импульса от слоя к слою, приводящий к появлению вязкости при ламинарном течении, определяется независимыми изменениями импульса отдельных молекул. В противоположность этому передача импульса от слоя к слою при турбулентном течении является процессом коллективным. Сказанное можно выразить другими словами: индивидуальное, неорганизованное сопротивление при ламинарном течении при переходе к турбулентному течению сменяется коллективным и, следовательно, более высокоорганизованным сопротивлением. Это приводит к значительному увеличению вязкости — молекулярная вязкость сменяется турбулентной.

Благодаря изменению внутреннего трения при переходе к турбулентному движению происходит и изменение профиля скорости течения. Распределение скорости, например, по параболическому закону (закону Пуазейля) при турбулентном течении в большей части сечения заменяется гораздо более сглаженным и равномерным распределением скорости.

Таким образом, при переходе к турбулентному движению между отдельными областями устанавливаются новые макроскопические — коллективные связи. Тем самым структура течения существенно усложняется.

В этой связи можно заключить, что основная задача теории турбулентности — выявление и описание «структуры хаоса». Тем самым отводится на второй план точка зрения на турбулентное движение как хаотическое. На первый план выходит точка зрения, согласно которой переход к турбулентному движению представляется как процесс самоорганизации. Если расчеты, основанные на S-теореме, показывают, что степень хаотичности возрастает, то имеет место переход не к турбулентности, а к физическому хаосу.

Итак, на основе S-теоремы, установленной для процессов эволюции в пространстве управляющих параметров, показано, что стационарное турбулентное течение может быть более упорядоченным, более высокоорганизованным, чем ламинарное. Бо́льшую упорядоченность тур-

булентного движения можно, конечно, выявить и путем рассмотрения временной эволюции, например в замкнутой системе, переходя от начального неравновесного состояния к конечному равновесному. Согласно Н-теореме энтропия при этом возрастает и, следовательно, имеет место не самоорганизация, а деградация более упорядоченного в начальный момент состояния (см. конец 1.1). Наличие деградации может быть зафиксировано по повышению температуры. Рассмотрим простейший пример.

Пусть в замкнутой системе в начальный момент создана однородная турбулентность с распределением (3). В процессе эволюции устанавливается равновесное состояние с распределением f_0 — распределением (1) при $u_л = 0$ — и энтропией S_0. Поскольку система является макроскопической, то энергия системы практически совпадает с ее средним значением, поэтому относительную степень упорядоченности начального (турбулентного) и равновесного движений можно характеризовать разностью энтропий S_0, $\langle \tilde{S}_{турб} \rangle$. Если скорость $\tilde{u}$ мала по сравнению с тепловой скоростью, то отклонения $\delta \tilde{f} = \tilde{f} - f_0$ малы и разность энтропий S_0, $\langle \tilde{S}_{турб} \rangle$ определяется выражением (ср. с (1.4.9))

$$S_0 - \langle \tilde{S}_{турб} \rangle = \frac{kn}{2} \int \frac{\langle \delta \tilde{f} \, \delta \tilde{f} \rangle}{f_0} \, d\mathbf{v} = \frac{kn}{2} \int \left(\frac{m \mathbf{v} \tilde{\mathbf{u}}}{kT} \right)^2 f_0 \, d\mathbf{v} \geqslant 0. \quad (6.8.8)$$

В результате мы снова приходим к выражению (7). Повторяя опыт при разных начальных условиях, по температурам равновесных состояний можно судить об относительной степени упорядоченности двух турбулентных движений.

В заключение сделаем несколько замечаний.

Изложенный здесь материал иллюстрирует на примере турбулентного движения в несжимаемой жидкости роль и значение методов статистической теории открытых систем при описании самых сложных движений в макроскопических системах.

Во Введении уже было отмечено разнообразие турбулентных движений. Основной чертой турбулентного движения является наличие большого числа развитых макроскопических степеней свободы. Это означает, что основную роль здесь играют коллективные движения. Именно они определяют, в частности, эффективные кинетические коэффициенты, характеризующие перенос вещества, импульса и энергии от одной области системы в другую.

Теперь, однако, процесс идет самопроизвольно, т. е. без влияния управляющих параметров, поэтому эволюция к равновесному состоянию не является здесь процессом самоорганизации. Напротив, мы имеем дело с деградацией, так как начальное (турбулентное) состояние имеет меньшую энтропию и, следовательно, является более упорядоченным, чем конечное (равновесное — ламинарное при $u_л = 0$) состояние.

Основой статистического описания турбулентного движения служат, в зависимости от цели исследования и экспериментальных возможностей, соответственно флуктуационная кинетическая теория, флуктуационная гидродинамика, флуктуационная диффузионная теория. В зависимости от рассматриваемой макроскопической системы речь может идти о турбулентном движении в газах и плазме, в жидкостях и твердых телах. При этом число частиц отдельных компонент может быть как постоянным, так и переменным, т. е. турбулентное движение возможно и в химически реагирующих системах. В последние годы широко изучаются турбулентные движения в системах атомы — электромагнитное поле, в частности, можно выделить такую область, как турбулентное движение в оптике. Естественно, что в каждой из перечисленных областей имеются свои проблемы и свои математические модели для их решения. Важно, однако, что для успешного и эффективного описания турбулентных движений на всех уровнях и в самых разнообразных системах изложенные общие идеи и методы статистической теории открытых систем являются в одинаковой степени существенными.

Итак, завершается изложение широкого круга проблем статистической теории открытых систем. Можно лишь выразить надежду, что нам удалось показать необходимость и вместе с тем эффективность нового подхода, при котором на всех уровнях рассмотрения проводится сочетание динамического и статистического способов описания явлений в макроскопических системах. Осталось лишь сделать небольшое Дополнение, в котором отмечаются некоторые новые результаты, а также краткое Заключение.

ДОПОЛНЕНИЕ

Д.1. Естественный фликкер-шум и сверхпроводимость

После открытия высокотемпературной сверхпроводимости вновь возникли старые, казалось бы, уже решенные вопросы о природе сверхпроводимости, в частности, о физической причине исчезновения сопротивления току заряженных бозе-частиц, например куперовских пар. В работе (*Климонтович*, 1990) предпринята попытка связать практически полное исчезновение сопротивления с перестройкой диссипативного члена и источника Ланжевена в уравнениях для тока и магнитного поля с перестройкой, которая происходит при возникновении естественного фликкер-шума (п. 2.6.5; 3.12). Напомним, что для области фликкер-шума диссипативный член и интенсивность источника Ланжевена в уравнениях для компонент Фурье становятся пропорциональными частоте (см. уравнение (3.12.4)).

Будем рассматривать лишь состояния значительно ниже точки фазового перехода, при котором образуются заряженные бозе-частицы. Используем диссипативные уравнения для вихря электрического тока $\mathbf{\Omega} = \mathrm{rot}\,\mathbf{j}$ и магнитного поля $\mathbf{B}$. Диссипация (за счет вязкости или электропроводности) на больших временах имеет диффузионный характер, поэтому источник Ланжевена для области низких частот определяется выражениями, аналогичными использованным в теории фликкер-шума. После сглаживания по объему V_ω (или соответствующего усреднения по распределению волновых чисел) получаем следующее уравнение Ланжевена для временной компоненты Фурье:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t}\left(\mathbf{\Omega} + \frac{e^2 n}{mc}\mathbf{B}\right)\right]_{\omega} + |\omega|\,\mathbf{\Omega}(\omega) = \mathbf{J}_\Omega(\omega), \quad (\mathbf{J}_\Omega)^2_\omega \propto |\omega|. \quad (Д.1)$$

Минимальная возможная частота (следовательно, минимальное затухание) и минимальная интенсивность шума

имеют место при $\omega = \tau_ж^{-1}$. Здесь $\tau_ж$ — время жизни установки. Оно определяет и минимальную ширину спектра. За «постоянные» составляющие принимаем средние за время $\tau_ж$. Тогда из (1) при $\omega = \tau_ж^{-1}$ следуют уравнения Лондонов:

$$\mathrm{rot}\,\mathbf{j} = -\frac{e^2 n}{mc}\mathbf{B}, \quad \frac{\partial^2 B}{\partial r^2} - \frac{1}{\delta_L^2} B = 0; \quad \delta_L^2 = \frac{mc^2}{4\pi e^2 n}. \qquad (Д.2)$$

Они определяют распределение тока и магнитного поля по сечению для области ниже точки фазового перехода. Для расчета флуктуаций в области перехода можно использовать уравнение Гинзбурга — Ландау — Горькова с соответствующим источником Ланжевена.

Основываясь на изложенном подходе, можно предположить, что существование сверхтекучести в ^{4}He при течении в узком канале также связано с соответствующей перестройкой диссипативных и флуктуационных характеристик в области низких частот. При этом коэффициент диффузии оказывается порядка постоянной Планка $\hbar$.

Отметим, наконец, что с помощью пространственно-временных спектров можно путем интегрирования по ω найти и соответствующие пространственные спектры. При этом радиальное распределение в пространстве волновых чисел пропорционально $1/k$. Таким образом, шуму «$1/f$» соответствует «естественный пространственный фликкер-шум».

Д.2. Кинетическое описание гидродинамического движения

Напомним, что при анализе неравновесных процессов в газах используются два уровня описания: кинетическое и гидродинамическое. При этом для обоснования уравнений гидродинамики при решении кинетического уравнения Больцмана применяется теория возмущений по параметру Кнудсена или обратному числу Рейнольдса (см. (2.6.10)). В нулевом приближении решение представляется в виде локального распределения Максвелла (1.9.4). В нем функции $\rho(\mathbf{r}, t)$, $u(\mathbf{r}, t)$, $T(\mathbf{r}, t)$ удовлетворяют уравнениям гидродинамики идеальной жидкости (без диссипативных членов). Для учета диссипации используется решение кинетического уравнения в первом приближении по параметру K (или $1/\mathrm{Re}$). Теория возмущений по диссипации недостаточна, однако, для практически важной области чисел Рейнольдса $\mathrm{Re} \lesssim 1$.

Для получения уравнений гидродинамики на основе кинетической теории необходимо использовать обобщенное кинетическое уравнение (1.6.3), в котором, наряду с интегралом столкновений Больцмана, учитывается и дополнительный «интеграл столкновений» $\tilde{I}$, определяемый крупномасштабными флуктуациями. Они выделяются неравенствами (1.4.14). Соответствующие физически бесконечно малые масштабы при гидродинамическом описании определяются соотношениями (2.6.11).

В простейшем приближении диссипативный вклад крупномасштабных флуктуаций определяется пространственной диффузией распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, а также подвижностью частиц под действием силы F. В результате приходим к кинетическому уравнению (*Климонтович*, 1990)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = I_{\text{Б}}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\left(D\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - b\mathbf{F}f\right). \quad (\text{Д.3})$$

Здесь D — один из трех кинетических коэффициентов в гидродинамике: коэффициент самодиффузии D, кинематическая вязкость ν, температуропроводность χ. Уравнение (3) записано для частного случая, когда $D = \nu = \chi$. Различие между коэффициентами D, ν, χ может быть учтено в окончательных уравнениях гидродинамики (см. Д.3).

Напомним, что физически бесконечно малый интервал τ_Φ определяется с помощью двух соотношений:

$$\tau_D/N_\Phi = \tau_\Phi, \qquad \tau_D = L^2/D. \quad (\text{Д.4})$$

Формулы (2.6.11) получены при использовании диффузионной связи $\tau_\Phi = l_\Phi^2/D$ масштабов τ_Φ, l_Φ, что оправдано для области низких частот. С помощью соотношений (2.6.11) можно ввести обобщенный параметр Кнудсена, характеризующий роль крупномасштабных флуктуаций,

$$K_\Phi = l_\Phi/L \approx 1/\sqrt{N_\Phi}. \quad (\text{Д.5})$$

Для описания высокочастотных (звуковых) движений в гидродинамике более естественно использовать соотношение $\tau_\Phi = l_\Phi/V_\text{т}$. Тогда обобщенный параметр Кнудсена определяется выражением

$$K_\Phi = l_\Phi/L \sim \sqrt{K}. \quad (\text{Д.6})$$

Мы видим, что при кинетическом обосновании уравнений гидродинамики вместо параметра Кнудсена K более естественно использовать теорию возмущений по параметру $1/\sqrt{N_\Phi}$ или $\sqrt{K}$. Тогда, например, в нулевом прибли-

жении по параметру $1/\sqrt{N_ф}$ из (3) получаем уравнение $I_в = 0$ и, следовательно, локальное распределение Максвелла (1.9.4). Теперь, однако, уравнения гидродинамики для неизвестных пока функций ρ, u, T находим не по теории возмущений, а из кинетического уравнения (3) при подстановке в него локального распределения $f = f^{(0)}$, т. е. при $I_в(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = 0$. В результате для перехода к уравнениям гидродинамики используется диссипативное кинетическое уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\left(D\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \mathbf{r}} - b\mathbf{F}f^{(0)}\right). \qquad (Д.7)$$

Заметим, что в равновесном состоянии при $\mathbf{F} = -\partial U/\partial \mathbf{r}$ это уравнение удовлетворяется распределением Максвелла — Больцмана при условии, что коэффициент диффузии D и подвижность b связаны соотношением Эйнштейна:

$$D = bkT. \qquad (Д.8)$$

Д.3. Уравнения гидродинамики с учетом самодиффузии

Локальное распределение $f^{(0)}$ содержит пять неизвестных функций ρ, $\mathbf{u}$, T, которые для него являются моментами скорости. Прежде чем рассматривать общую систему уравнений гидродинамики для этих функций, выделим два частных случая.

1. Отличен от нуля лишь нулевой момент скорости $nf^{(0)} = \rho\delta(\mathbf{v})$. Функция ρ удовлетворяет в этом случае уравнению самодиффузии.

2. Несжимаемая жидкость: $f^{(0)} = \delta(\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))$. В этом приближении плотность постоянна, а температура пренебрежимо мала. Из кинетического уравнения (7) при этом следуют уравнения Навье — Стокса.

В общем случае с помощью (7) получаем полную систему уравнений гидродинамики. При $F = 0$ они имеют вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\left(\rho\mathbf{u} - D\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{r}}\right) = 0, \qquad (Д.9)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r_j}\left[\left(\rho u_j - D\frac{\partial \rho}{\partial r_j}\right)u_i\right] = -\frac{\partial p}{\partial r_i} + \rho\nu\frac{\partial^2 u_i}{\partial r_j^2}, \qquad (Д.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\rho u^2}{2} + \rho\varepsilon\right) + \frac{\partial}{\partial r_i}\left[\left(\rho u_i - D\frac{\partial \rho}{\partial r_i}\right)\left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon\right) + u_i p - \right.$$
$$\left. - \rho\nu u_j\frac{\partial u_j}{\partial r_i} - c_V\rho\chi\frac{\partial T}{\partial r_i}\right] = 0. \qquad (Д.11)$$

Эти уравнения отличаются от традиционных учетом самодиффузии и структурой тензора вязких напряжений. Здесь $\pi_{ij} = -\rho\nu\partial u_i/\partial r_j$.

Приведем соответствующее уравнение баланса плотности энтропии $S(\mathbf{r}, t)$. При условии $D = \nu = \chi$ оно имеет вид

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}(uS) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\left(D\frac{\partial S}{\partial \mathbf{r}}\right) + \frac{D}{k}\int\left(\frac{\partial S(\mathbf{r}, v, t)}{\partial \mathbf{r}}\right)^2 nf^{(0)}dv. \quad (Д.12)$$

Мы видим, что производство энтропии определяется через локальную энтропию $S(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = -k\ln f^{(0)}$. В более общем случае $D \neq \nu = \chi$ поток энтропии содержит не только тепловой поток $c_V\rho\chi\,\mathrm{grad}\,T$, но и диффузионный поток $D\,\mathrm{grad}\,\rho$, а производство энтропии определяется выражением

$$\sigma = \frac{k}{m}\left[\rho D\left(\frac{\mathrm{grad}\,\rho}{\rho}\right)^2 + \rho\nu\frac{m}{kT}\left(\frac{\partial u_j}{\partial r_i}\right)^2 + c_V\rho\chi\left(\frac{\mathrm{grad}\,T}{T}\right)^2\right] \geqslant 0. \quad (Д.13)$$

В присутствии силы $\mathbf{F}$ в уравнении непрерывности возникает дополнительный вклад в поток вещества

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\left[\rho u - D\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{r}} + \rho b\mathbf{F}\right] = 0. \quad (Д.14)$$

В равновесном состоянии конвективный поток ρu равен нулю, а оставшиеся два потока компенсируют друг друга. Это возможно, если имеет место распределение Больцмана в потенциальном поле U и коэффициенты самодиффузии и подвижности связаны соотношением Эйнштейна.

Распространено мнение (например, *Сивухин*, 1975), что хотя самодиффузия и имеет место, но не проявляется в макроскопических явлениях. Существование распределения Больцмана в совокупности с соотношением Эйнштейна (8) ставят, как нам представляется, эту точку зрения под сомнение, поскольку одновременное существование распределения Больцмана и соотношения Эйнштейна возможно лишь при условии взаимной компенсации двух диссипативных потоков вещества, определяемых самодиффузией и подвижностью в заданном потенциальном поле.

Другая возможность проявления самодиффузии связана со структурой спектров молекулярного рассеяния света. Рассеяние, как известно, происходит на флуктуациях плотности и температуры. При этом без учета самодиффузии ширины спектров флуктуаций $\delta\rho$, δT опре-

деляются одним и тем же кинетическим коэффициентом — температуропроводностью χ. При учете самодиффузии получаем выражения (*Климонтович*, 1990)

$$(\delta_\rho \delta_\rho)_{\omega,\mathbf{k}} = \frac{2Dk^2}{\omega^2 + (Dk^2)^2} \frac{k\rho}{c_p},$$
$$(\delta T \delta T)_{\omega,\mathbf{k}} = \frac{2\chi k^2}{\omega^2 + (\chi k^2)^2} \frac{kT^2}{c_p \rho}. \qquad (Д.15)$$

Таким образом, теперь ширина спектра флуктуаций плотности $\delta\rho$ определяется коэффициентом самодиффузии D, а флуктуаций температуры δT — температуропроводностью χ.

Вопрос об учете самодиффузии (и самотермодиффузии) в уравнениях гидродинамики рассматривался в работах (*Слезкин*, 1951; *Валандер*, 1951). В работе (*Шапошников*, 1951) были выдвинуты контраргументы, которые, однако, не являются убедительными.

В связи с вопросом о самодиффузии отметим книгу (*Вашман*, *Пронин*, 1986), в которой содержится информация об экспериментальном и теоретическом исследовании самодиффузии, а также книгу (*Скрипов*, 1972). В ней, в частности, содержится материал о самодиффузии вблизи критической точки перехода жидкость — пар.

Отметим, наконец, что описанный здесь подход для учета роли крупномасштабных флуктуаций в гидродинамике не является единственно возможным. В работах (*Андреев*, 1978; *Морозов*, 1983) развит иной подход. Найдены, в частности, флуктуационные добавки к скорости звука и к выражению для коэффициента затухания звука. Эти поправки порядка $\sqrt{K}$, что согласуется с оценкой малого параметра (6). В целом, однако, эти два подхода не являются эквивалентными.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Напомним, что во Введении были выделены проблемы, которые мы считали основными на начальном этапе изложения современной статистической теории открытых систем. Перечислим их еще раз, но теперь уже с краткими резюме.

Первой была поставлена проблема установления и анализа критериев относительной степени упорядоченности состояний в открытых системах, позволяющих отличить «порядок» от «хаоса». Была продемонстрирована, в частности, эффективность критерия, основанного на сопоставлении значений энтропии Больцмана — Гиббса — Шеннона, перенормированных к заданному значению средней эффективной энергии открытой системы.

Вторая проблема — выявление связи статистического и динамического описания сложных движений. При ее рассмотрении особо подчеркивалась конструктивная роль динамической неустойчивости движения. Динамическая неустойчивость из-за перемешивания — экспоненциальной расходимости близких в начальный момент траекторий — определяет неизбежность перехода от необозримо сложных микроскопических уравнений движения к уравнениям для макроскопических — коллективных характеристик системы. Именно благодаря использованию таких уравнений и открываются широкие возможности выявления структур порядка в открытых системах на фоне микроскопического хаоса.

В качестве отдельной была сформулирована проблема о роли флуктуаций. Флуктуации, с одной стороны, определяют интегралы «столкновений», через которые в уравнения для макроскопических характеристик входит диссипация. Флуктуации, таким образом, ответственны за необратимость используемых кинетических уравнений. Это мелкомасштабные флуктуации. Их выделение нераз-

рывно связано с определением ансамбля Гиббса в статистической теории неравновесных процессов. Именно они определяют степень неполноты задания микроскопических состояний систем ансамбля. Но не менее важна и роль крупномасштабных флуктуаций, которые в силу флуктуационно-диссипационных соотношений связаны с диссипативными характеристиками и, следовательно, с мелкомасштабными флуктуациями. Их учет позволяет подняться над уровнем приближения сплошной среды — приближения первых моментов, и, следовательно, увеличить информацию о системе — приблизить нас к полному описанию.

Крупномасштабные флуктуации были условно разделены на два класса: молекулярные и турбулентные. Молекулярные флуктуации определяют броуновское движение «частиц» разной природы. Наличие турбулентных флуктуаций, как мы видели, вызывает новые проблемы в теории броуновского движения в открытых системах.

В процессе изложения мы видели, сколь велика и разнообразна роль энтропии и производства энтропии. Развитие статистической теории открытых систем не только не умалило, но, напротив, подняло роль этих фундаментальных характеристик. Они были широко использованы, в частности, для оценки относительной степени упорядоченности неравновесных состояний в открытых системах. Их роль проявилась также и в другом.

На примере генератора Ван дер Поля уравнение баланса энтропии (H-теорема) было использовано для анализа возможности перехода от описания в непрерывном времени к описанию в дискретном времени, которое неизбежно при использовании численных методов. Это позволило дать оценку максимального значения шага дискретного времени в зависимости от параметров системы, при котором еще не нарушаются фундаментальные свойства системы — сохраняется, например, устойчивость стационарного распределения. Это лишь один пример необходимости использования статистической теории открытых систем в вычислительной математике.

Изложение общих вопросов проиллюстрировано многочисленными примерами. При их подборе мы руководствовались принципами эффективности, простоты и доступности. Естественно, что при этом «за бортом» остались многие интересные в научном и практическом отношениях вопросы. Отметим лишь некоторые из них.

Неравновесные процессы в плазме. Различным аспектам этой проблемы в последние годы посвящены многочисленные исследования, результаты которых отражены в обзорах и книгах. Некоторые из них приведены в прилагаемом списке литературы. Отметим лишь три вопроса, связанные непосредственно с изложенным выше материалом.

1. Статистическая теория сильно неравновесной плазмы, когда крупномасштабные — кинетические, гидродинамические флуктуации сильно возбуждены и определяют аномальные кинетические коэффициенты в плазме, да и в целом турбулентное движение.

2. Описание процессов самоорганизации в плазме. Свидетельством возросшего интереса к этой проблеме является недавний доклад Б. Б. Кадомцева «Самоорганизация в плазме» на Международной конференции по физике плазмы в Киеве в апреле 1987 г. (см. также сборник *Климонтович* (ред.), 1974).

3. Статистическая теория плазменно-молекулярных систем, объединяющих свойства газов и плазмы. Имеются уже первые обзоры достижений в этой области (*Климонтович*, III; *Климонтович*, *Шевченко*, *Якименко*, *Загородний*, 1989; *Климонтович*, *Вильгельмсон*, *Загородний*, *Якименко*, 1989).

Динамический хаос, турбулентность и диссипативные структуры в оптике. Исследования в этой области развиваются очень интенсивно. Выше уже отмечался недавний обзор А. Н. Ораевского «Динамическая стохастичность и лазеры». К числу последних относятся обзоры (*Милони и др.*, 1987; *Гиббс*, 1988; *Мандель*, 1987; *Ахманов и др.*, 1986; *Корюкин и др.*, 1987; *Кравцов и др.*, 1986; *Бункин и др.*, 1985).

Процессы самоорганизации в химических и биологических системах. Здесь в настоящее время характерна общность математических моделей, основанных на уравнениях реакционно-диффузионного типа (*Полак*, *Михайлов*, 1983; *Кринский*, *Михайлов*, 1984; *Васильев и др.*, 1987; *Гапонов-Грехов*, *Рабинович*, 1987; *Курамото*, 1984).

В теории динамического хаоса в последние годы в качестве одного из критериев широко используется фрактальная размерность. Интерес физиков к этому вопросу стимулировался работами Б. Мандельброта (*Мандельброт*, 1982; см. также обзоры: *Смирнов*, 1986; *Соколов*, 1986; *Зельдович и др.* 1987). Вопрос о роли критерия

хаотичности, основанного на значении фрактальной размерности, требует специального рассмотрения.

Особое значение в последние годы приобрела проблема описания «хаотических» движений в квантовых системах (*Заславский*, *Чириков*, *Израилев*, *Шепелянский*, *Казатти* (см. список литературы)). К числу последних относится обзор (*Елютин*, 1988). Отметим следующее.

Развиваются два направления. Первое — «динамический хаос» в квантовых гамильтоновых системах. Второе — «динамический хаос» в квантовых диссипативных системах. Следует отметить, однако, условность такого разделения, так как необратимость имеет место при всех квантовых переходах. В связи со вторым направлением отметим также, что многие из изложенных выше результатов могут быть перенесены и на квантовые системы.

Процессы самоорганизации в космологии. Возникающие здесь проблемы являются поистине захватывающими своей грандиозностью и значимостью. Здесь, однако, пока больше вопросов, чем ответов. Можно лишь надеяться, что изложенное выше будет, хоть в какой-то мере, способствовать решению этих вопросов.

Отметим, наконец, что во всех рассмотренных в книге примерах изменения управляющих параметров предполагались достаточно медленными. При динамических и стохастических изменениях внешних управляющих параметров открываются, естественно, новые возможности в теории самоорганизации. Такое расширение перекидывает мостик в другие области знания, в частности в теорию управления. В этой связи мы уже упоминали сборник «Принципы самоорганизации» первого современного (мы не касаемся здесь собраний философов древности) симпозиума по проблемам самоорганизации, который был проведен в 1961 г., т. е., как мы уже отмечали, в «дофизический» период теории самоорганизации, Лабораторией применения вычислительных машин в биологии Иллинойского университета США. За прошедшие годы мы существенно продвинулись в понимании проблем теории самоорганизации. Произошло это в значительной мере благодаря развитию статистической теории открытых систем. Можно ожидать, как это было отмечено раньше, и существенного влияния статистической теории открытых систем на развитие вычислительных методов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Александров А. Ф., Богданкевич Л. С., Рухадзе А. А. Основы электродинамики плазмы.— М.: Высшая школа, 1988.

Андреев А. В., Емельянов В. И., Ильинский Ю. А. Кооперативные явления в оптике.— М.: Наука, 1988.

Анищенко В. С. Сложные колебания в простых системах: Механизмы возникновения, структура и свойства динамического хаоса в радиофизических системах.— М.: Наука, 1990.

Анищенко В. С., Астахов В. В. Экспериментальные исследования механизма возникновения и структуры странного аттрактора в генераторе с инерционной нелинейностью // Радиотехн. и электрон. 1983. Т. 28. С. 1109.

Анищенко В. С., Климонтович Ю. Л. Эволюция энтропии в генераторе с инерционной нелинейностью при переходе к стохастичности через каскад бифуркаций удвоения периода // Письма в ЖТФ. 1984. Т. 10. С. 816.

Анищенко В. С., Сафонова М. А. Бифуркации аттракторов в присутствии флуктуаций // ЖТФ. 1987. Т. 57. С. 1931.

Аносов Д. В., Арнольд В. И. Динамические системы-1. Современные проблемы математики Т. 4.— М.: Изд-во ВИНИТИ, 1985.

Арнольд В. И. Теория катастроф.— М.: Наука, 1990. Изд.4. УРСС, 2004.

Арнольд В. И., Новиков С. П. Динамические системы-4. Современные проблемы математики. Т. 4.— М.: Изд-во ВИНИТИ, 1985.

Арцимович Л. А., Сагдеев Р. З. Физика плазмы для физиков.— М.: Атомиздат, 1979.

Афраймович В. С., Быков В. В., Шильников Л. П. О возникновении и структуре аттрактора Лоренца: Тр. Моск. матем. общества. 1982. Т. 44. С. 150.

Ахманов С. А., Воронцов М. А., Пруидзе Д. В., Шмальгаузен В. И. Пространственная неустойчивость светового поля в нелинейной системе с двумерной обратной связью: Препринт/МГУ.— М., 1986.

Ахромеева Т. С., Курдюмов С. П., Малинецкий Г. Г., Самарский А. А. О классификации систем нелинейных диффузионных уравнений в окрестности точки бифуркации: Итоги науки и техники. Современные проблемы математики.— М.: Изд-во ВИНИТИ, 1986.

Бабенко К. И. О механизмах турбулентности в течениях вязкой жидкости: Сб. Математические механизмы турбулентности.— Киев: Ин-т матем. АН УССР, 1986.

Базыкин А. Д. Математическая биофизика взаимодействующих популяций.— М.: Наука, 1985.

Бакай А. С., Сигов Ю. С. Многоликая турбулентность.— М.: Знание, 1989.

Балеску Р. Статистическая механика заряженных частиц.— М.: Мир, 1967.

Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика.— М.: Мир, 1978.
Баренблат Г. И. Подобие, автомодельность, промежуточная асимптотика.— Л.: Гидрометеоиздат, 1978.
Белый В. В. Гидродинамические флуктуации в неоднородно нагретых газах // ТМФ. 1984. Т. 58. С. 421.
Белый В. В., Климонтович Ю. Л. Кинетические флуктуации в частично ионизованной плазме и химически реагирующих газах // ЖЭТФ. 1978. Т. 74. С. 1660.
Белый В. В., Климонтович Ю. Л., Наливайко В. П. Теория аномальной проводимости в столкновительной турбулентной плазме: Препринт ИЗМИРАН СССР. № 4.— М., 1981.
Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Квантовая электродинамика.— М.: Наука, 1980.
Бланк М. Л. Эргодические свойства дискретизаций динамических систем // ДАН СССР. 1984. Т. 278. С. 779.
Блехман И. И. Синхронизация динамических систем.— М.: Наука, 1971.
Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике.— М.: Гостехиздат, 1946.
Боголюбов Н. Н. О стохастических процессах в динамических системах // Физ. ЭЧАЯ. 1978. Т. 9. С. 501.
Бонч-Бруевич В. Л. Стохастические автоколебания в конденсированной среде, ч. 1.— М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986.
Бочков Г. Н., Ефремов Г. Ф. Нелинейные флуктуационно-диссипационные соотношения и стохастические модели.— Горький: Изд-во Горьковск. ун-та, 1980.
Бункин Ф. В. О тепловых флуктуациях в нелинейных системах // Радиотехн. и электрон. 1961. Т. 6, вып. 1, 3.
Бункин Ф. В., Кириченко Н. А., Лукъянчук Б. С. Бифуркации, катастрофы и структуры в лазерной термохимии // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1985. Т. 49. С. 1054.
Вайнштейн Л. А., Собельман И. И., Юков Е. А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий.— М.: Наука, 1979.
Васильев В. А., Романовский Ю. М., Яхно В. Г. Автоволны.— М.: Наука, 1987.
Веденов А. А. Моделирование элементов мышления.— М.: Наука, 1988.
Власов А. А. О вибрационных свойствах электронного газа // ЖЭТФ. 1938. Т. 8. С. 231.
Власов А. А. Теория многих частиц.— М.: Гостехиздат, 1950.
Волькенштейн М. В. Сущность биологической эволюции // УФН. 1984. Т. 143. С. 429.
Воронцов М. А., Корябин А. В., Шмальгаузен В. И. Управляемые оптические системы.— М.: Наука, 1988.
Вул Е. Б., Синай Я. Б., Ханин К. М. Универсальность Фейгенбаума и термодинамический формализм // УМН. 1984. Т. 39. С. 3.
Ганцевич С. В., Гуревич В. Л., Катилюс Р. Флуктуации в полупроводниках в сильном электрическом поле // ЖЭТФ. 1969. Т. 57. С. 503.
Ганцевич С. В., Гуревич В. Л., Катилюс Р. О связи между различными методами теории флуктуаций в неравновесном состоянии // ЖЭТФ. 1970. Т. 59. С. 533.
Гапонов-Грехов А. В., Рабинович М. И. (ред.) Нелинейные волны. Структуры и бифуркации.— М.: Наука, 1987.
Гапонов-Грехов А. В., Рабинович М. И. Уравнения Гинзбурга —

Ландау и нелинейная динамика неравновесных сред // Радиофизика. 1987. Т. 30. С. 131.
Гапонова-Грехова М. Т. (ред.) Автоволновые процессы в системах с диффузией.— Горький: ИПФ АН СССР, 1981.
Гардинер К. Стохастические методы в естественных науках.— М.: Мир. 1986.
Гиббс Д. В. Термодинамика. Статистическая физика/Под ред. Д. Н. Зубарева.— М.: Наука, 1982.
Гиббс Х. Оптическая бистабильность: управление светом с помощью света.— М.: Мир, 1988.
Гинзбург В. Л. Некоторые вопросы теории электрических флуктуаций // УФН. 1952. Т. 46. С. 340.
Гинзбург В. Л. Теоретическая физика и астрофизика.— М.: Наука, 1981, 1988.
Гледзер Е. Б., Должанский Ф. В., Обухов А. М. Системы гидродинимического типа и их применения.— М.: Наука, 1981.
Гольдштик М. А. Принцип максимальной устойчивости осредненного течения // ДАН СССР. 1968. Т. 182. С. 1026.
Гольдштик М. А., Штерн В. Н. (ред.) Устойчивость и турбулентность.— Новосибирск: Ин-т теплофизики АН СССР, 1977.
Горбань А. Н., Быков В. И., Яблонский Г. С. Очерки о химической релаксации.— Новосибирск: Наука, 1986.
Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е., Питаевский Л. П. Вычисление флуктуаций величин, определяемых кинетическими уравнениями // Тр. ИЗМИРАН, 1960, 17(27). С. 239.
Грасюк А. З., Ораевский А. Н. Переходные процессы в молекулярном генераторе // Радиотехн. и электрон. 1964. Т. 9. С. 524.
Гречанный О. А. Статистический поход и функциональные модели в кинетической теории газов // ТМФ. 1978. Т. 36. С. 224.
Гречанный О. А. Стохастическая теория необратимых процессов.— Киев: Наукова Думка, 1989.
Гурбатов С. Н., Саичев А. И., Якушкин И. Г. Нелинейные волны и одномерная турбулентность в средах без дисперсии // УФН. 1983. Т. 141. С. 221.
Гуров К. П. Основания кинетической теории. Метод Н. Н. Боголюбова.— М.: Наука, 1966.
Данилов Ю. А., Кадомцев Б. Б. Что такое синергетика?: Сб. Нелинейные волны. Самоорганизация.— М.: Наука, 1983.
Джозеф Д. Устойчивость движений жидкости.— М.: Мир, 1981.
Должанский Ф. В., Кляцкин В. И., Обухов А. М., Чусов М. А. Нелинейные системы гидродинамического типа.— М.: Наука, 1974.
Дубнищев Ю. Н., Ринкевичус Б. С. Методы лазерной доплеровской анемометрии.— М.: Наука, 1982.
Елютин П. В. Проблемы квантового хаоса // УФН. 1988. Т. 155. С. 397.
Жаботинский А. М. Концентрационные волны.— М.: Наука, 1974.
Желудев Н. И. Поляризационная неустойчивость и мультистабильность в нелинейной оптике // УФН. 1989. Т. 157. С. 883.
Жигулев В. Н. Исследование уравнений Боголюбова для сильнокоррелированных статистических систем // ТМФ. 1971. Т. 7. С. 106.
Жигулев В. Н. К проблеме фундаментальных характеристик движения сплошной среды // ТМФ. 1971. Т. 7. С. 271.
Заславский Г. М. Стохастичность динамических систем.— М.: Наука, 1984.

Заславский Г. М., Сагдеев Р. З. Введение в нелинейную физику.— М.: Наука, 1988.
Захаров В. Е., Манаков С. В., Новтков С. П., Питаевский Л. П. Теория солитонов.— М.: Наука, 1980.
Зельдович Я. Б. Химическая физика и гидродинамика.— М.: Наука, 1984.
Зельдович Я. Б., Молчанов С. А., Рузмайкин А. А., Соколов Д. Д. Перемежаемость в случайной среде // УФН. 1987. Т. 152. С. 3.
Зубарев Д. Н. Неравновесная статистическая термодинамика.— М.: Наука, 1971.
Зубарев Д. Н. Статистическая термодинамика процессов турбулентного переноса // ТМФ. 1982. Т. 53. С. 93.
Зубарев Д. Н., Морозов В. Г., Трошкин О. В. Бифуркационная модель турбулентного течения в канале // ДАН СССР. 1986. Т. 290. С. 313.
Иваницкий Г. Р., Кринский В. И., Сельков Е. Е. Математическая биофизика клетки.— М.: Наука, 1978.
Израилев Ф. М., Чириков Б. В., Шепелянский Д. Л. Квантовый хаос: локализация и эргодичность.— Новосибирск: Ин-т ядер. физ. СО АН СССР, 1986.
Ильков Л. П., Кравцов Ю. А., Мергелян О. С., Эткин В. С. Степень частотной детерминированности динамического хаоса // Радиофизика. 1985. Т. 28. С. 929.
Кадомцев Б. Б. О флуктуациях в газе // ЖЭТФ. 1957. Т. 32. С. 943.
Кадомцев Б. Б. (ред.) Синергетика.— М.: Мир, 1984.
Кадомцев Б. Б. Коллективные процессы в плазме.— М.: Наука, 1988.
Кадомцев Б. Б. Самоорганизация в плазме: Тр. Межд. конф. по физике плазмы.— Киев, 1987.
Кадомцев Б. Б. Динамика и информация: Сб. Нелинейные волны. Структуры и бифуркации.— М.: Наука, 1987.
Кац М. Несколько вероятностных задач физики и математики.— М.: Наука, 1967.
Кернер Б. С., Осипов В. В. Стационарные и бегущие диссипативные структуры в активных кинетических средах // Микроэлектроника. 1981. Т. 10. С. 407.
I. *Климонтович Ю. Л.* Статистическая теория неравновесных процессов в плазме.— М.: Изд-во Моск. ун-та, 1964; Oxford: Pergamon Press, 1967.
II. *Климонтович Ю. Л.* Кинетическая теория неидеального газа и неидеальной плазмы.— М.: Наука, 1975; Oxford: Pergamon Press, 1982.
III. *Климонтович Ю. Л.* Кинетическая теория электромагнитных процессов.— М.: Наука, 1980; Berlin; Heidelberg: Springer, 1983.
IV. *Климонтович Ю. Л.* Статистическая физика.— М.: Наука, 1982; N. Y.: Harwood Academic Publishers, 1986.
Климонтович Ю. Л. Вторичное квантование в фазовом пространстве // ДАН СССР. 1954. Т. 96. С. 43; ЖЭТФ. 1957. Т. 33. С. 982.
Климонтович Ю. Л. Определение собственных значений физических величин методом квантовой функции распределения // ДАН СССР. 1956. Т. 108. С. 1033.
Климонтович Ю. Л. Статистическая теория неупругих процессов в плазме // ЖЭТФ. 1967. Т. 52. С. 1233; ЖЭТФ. 1968. Т. 54. С. 136.

Климонтович Ю. Л. О неравновесных фуктуациях в газе // ТМФ. 1971. Т. 8. С. 109.
Климонтович Ю. Л. О кинетическом уравнении Больцмана для неидеального газа // ЖЭТФ. 1971. Т. 60. С. 1352.
Климонтович Ю. Л. Н-теорема Больцмана для неидеального газа // ЖЭТФ. 1972. Т. 63. С. 150.
Климонтович Ю. Л. Кинетические уравнения для неидеального газа и неидеальной плазмы // УФН. 1973. Т. 110. С. 537.
Климонтович Ю. Л. (ред.) Волновые и флуктуационные процессы в лазерах.— М.: Наука, 1974.
Климонтович Ю. Л. Формулы Каллена — Вельтона и Кубо для неравновесных состояний // ЖЭТФ. 1978. Т. 75. С. 361.
Климонтович Ю. Л. Мера неполноты статистического описания и необратимость. ФДС для многочастичных функций распределения // Письма в ЖЭТФ. 1982. Т. 36. С. 35.
Климонтович Ю. Л. Флуктуационно-диссипационные соотношения в задаче рассеяния и метод флуктуаций в кинетической теории газов // Письма в ЖТФ. 1982. Т. 8. С. 1005.
Климонтович Ю. Л. Диссипативные уравнения для многочастичных функций распределения // УФН. 1983. Т. 139. С. 689.
Климонтович Ю. Л. Естественный фликкер-шум // Письма в ЖТФ. 1983. Т. 9. С. 406.
Климонтович Ю. Л. Уменьшение энтропии в процессе самоорганизации. S-теорема // Письма в ЖТФ. 1983. Т. 9. С. 1412.
Климонтович Ю. Л. Возникновение турбулентности при течениях Куэтта и Пуазейля // Письма в ЖТФ. 1983. Т. 9. С. 1089.
Климонтович Ю. Л. Энтропия и производство энтропии при ламинарном и турбулентном течениях // Письма в ЖТФ. 1984. Т. 10. С. 80.
Климонтович Ю. Л. Динамическая и статистическая теория обобщенных генераторов Ван дер Поля с числом устойчивых предельных циклов 2^k при $k = 0, 1, 2, \ldots$ // Письма в ЖТФ. 1985. Т. 11. С. 21.
Климонтович Ю. Л. Последовательности бифуркаций энергии предельного цикла и периода колебаний в генераторах с двумя управляющими параметрами: величиной обратной связи и масштабом дискретного времени // Письма в ЖТФ. 1987. Т. 13. С. 175.
Климонтович Ю. Л. Флуктуационно-диссипационные соотношения. Роль конечности времени корреляции. Квантовое обобщение формулы Найквиста // УФН. 1987. Т. 151. С. 309.
Климонтович Ю. Л. Определение сравнительной степени упорядоченности состояний открытых систем на основе S-теоремы по экспериментальным данным // Письма в ЖТФ. 1988. Т. 14. С. 631.
Климонтович Ю. Л. Проблемы статистической теории открытых систем: критерии относительной степени упорядоченности состояний в процессах самоорганизации // УФН. 1989. Т. 158. С. 59.
Климонтович Ю. Л. Картина искажения профиля Пуазейля при образовании стационарного турбулентного потока. Обобщение полуэмпирической теории турбулентности на область перехода // Письма в ЖТФ. 1990. Т. 15. С. 64.
Климонтович Ю. Л., Бониц М. Определение степени упорядоченности состояний самоорганизующихся систем с двумя управляющими параметрами // Письма в ЖТФ. 1986. Т. 12. С. 1352.

Климонтович Ю. Л., Бониц М. Самоорганизация в системах без простых аттракторов // Письма в ЖТФ. 1986. Т. 12. С. 1356.
Климонтович Ю. Л., Вильгельмсон Х., Загородний А. Г., Якименко И. П. Статистическая теория плазменно-молекулярных ограниченных систем.— М.: Изд-во МГУ, 1990.
Климонтович Ю. Л., Четвериков В. И. Бифуркации и распределения энергии в обобщенном генераторе Ван дер Поля при изменении обратной связи и масштаба дискретного времени // Письма в ЖТФ. 1987. Т. 13. С. 977.
Климонтович Ю. Л., Энгель-Херберт Х. Осредненные стационарные турбулентные течения Куэтта и Пуазейля в несжимаемой жидкости // ЖТФ. 1984. Т. 54. С. 440.
Клышко Д. Н. Физические основы квантовой электроники.— М.: Наука, 1986.
Кляцкин В. И. Стохастические уравнения и волны в случайно неоднородных средах.— М.: Наука, 1980.
Кляцкин В. И., Татарский В. И. Приближение диффузионного случайного процесса в некоторых нестационарных статистических задачах физики // УФН. 1973. Т. 110. С. 499.
Коган Ш. М., Шульман А. Я. К теории флуктуаций в неравновесном газе // ЖЭТФ. 1969. Т. 56. С. 862.
Коган Ш. М. Низкочастотный токовый шум со спектром типа $1/f$ в твердых телах // УФН. 1985. Т. 145, в. 2. С. 285.
Колмогоров А. Н., Петровский И. Г., Пискунов Н. С. Исследование уравнения диффузии, соединенной с возрастанием количества вещества, и его применение к одной биологической проблеме.— Бюл. МГУ. Математика и механика. 1937. Т. I. С. 1.
Корюкин И. В., Хандохин П. А., Ханин Я. И. Периодические и хаотические пульсации в одномодовом однородно уширенном лазере: трехуровневая модель и модель Лоренца: Препринт ИПФ АН СССР № 161.— Горький, 1987.
Кравцов Ю. А., Ниязов Б. А., Петников В. Г. О степени детерминированности волновых полей в многомодовых волноводах со случайными неоднородностями // Акуст. журн. 1986. Т. 32. С. 823.
Кринский В. И., Медвинский А. Б., Панфилов А. В. Эволюция автоволновых вихрей.— М.: Знание, 1986.
Кринский В. И., Михайлов А. С. Автоволны.— М.: Знание, 1984.
Крылов Н. М., Боголюбов Н. Н. Общая теория меры в нелинейной механике // Н. Н. Боголюбов. Избранные труды. Т. 1.— Киев: Наукова думка, 1969. С. 411.
Крылов Н. М., Боголюбов Н. Н. О некоторых проблемах эргодической теории стохастических систем.— Там же. С. 517.
Крылов Н. М., Боголюбов Н. Н. О уравнениях Фоккера — Планка, получаемых в теории возмущений с помощью метода, основанного на спектральных свойствах гамильтоновых возмущений.— Там же. Т. 2. С. 5.
Крылов Н. С. Работы по обоснованию статистической физики.— М.: Наука, 1950. Изд.2. М.: УРСС, 2003.
Кухаренко Ю. А. Кинетические уравнения для систем многих частиц с сильным взаимодействием и закон возрастания энтропии // ТМФ. 1977. Т. 13. С. 133.
Ладыженская О. А. Математические вопросы динамики вязкой несжимаемой жидкости.— М.: Наука, 1970.
Ланда П. С. Автоколебания в системах с конечным числом степеней свободы.— М.: Наука, 1980.

Ланда П. С. Автоколебания в распределенных системах.— М.: Наука, 1983.
Ландау Л. Д. Кинетическое уравнение в случае кулоновского взаимодействия // ЖЭТФ. 1937. Т. 7. С. 203.
Ландау Л. Д. К проблеме турбулентности // ДАН СССР. 1944. Т. 44. С. 339.
Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. О гидродинамических флуктуациях // ЖЭТФ. 1957. Т. 32. С. 618.
Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика.— М.: Наука, 1976.
Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидромеханика.— М.: Наука, 1986.
Левин М. Л., Рытов С. М. Теория равновесных тепловых флуктуаций в электродинамике.— М.: Наука, 1967.
Леонтович М. А. Основные уравнения кинетической теории газов с точки зрения теории случайных процессов // ЖЭТФ. 1935. Т. 5. С. 211.
Леонтович М. А. Введение в термодинамику. Статистическая физика.— М.: Наука, 1983.
Лернер А. Я. (ред.) Принципы самоорганизации.— М.: Мир, 1966.
Линь Дзя-дзяо. Теория гидродинамической устойчивости.— М.: ИЛ, 1958.
Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Статистическая физика.— М.: Наука, 1978.
Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика.— М.: Наука, 1979.
Лифшиц И. М., Гредскул С. А., Пастур Л. А. Введение в теорию неупорядоченных систем.— М.: Наука, 1982.
Лихтенберг А., Либерман М. Регулярная и стохастическая динамика.— М.: Мир, 1984.
Львов В. С. Лекции по физике нелинейных явлений.— Новосибирск: Изд-во Новосибирск. ун-та, 1977.
Лэкс М. Флуктуации и когерентные явления.— М.: Мир, 1974.
Майстренко Ю. Л., Романенко Е. Ю., Шарковский А. Н. Сухая турбулентность: Сб. Математические механизмы турбулентности.— Киев: Ин-т матем. АН УССР, 1986.
Малахов А. Н. Флуктуации в колебательных системах.— М.: Наука, 1968.
Маркин В. С., Пастушенко В. Ф., Чизмаджев Ю. А. Теория возбудимых сред.— М.: Наука, 1981.
Марри Дж. Нелинейные дифференциальные уравнения в биологии.— М.: Мир, 1983.
Маслов В. П. Нарушение принципа причинности для нестационарных уравнений двухмерной и трехмерной газовой динамики при достаточно больших числах Рейнольдса // ТМФ. 1986. Т. 69. С. 381.
Маслов В. П. Когерентные структуры, резонансы и асимптотическая неединственность для уравнений Навье — Стокса при больших числах Рейнольдса // УМН. 1986. Т. 41. С. 93.
Мигдал А. Б. Качественные методы в квантовой теории.— М.: Наука, 1975.
Миллионщиков М. Д. Турбулентные течения в пограничном слое и трубах.— М.: Наука, 1969.
Михайлов А. С., Упоров И. В. Критические явления в средах с размножением, распадом и диффузией // УФН. 1986. Т. 144. С. 79.

Монин А. С. Гидродинамическая неустойчивость // УФН. 1986. Т. 150. С. 61.
Монин А. С., Яглом А. М. Статистическая гидромеханика.— М.: Наука, ч. 1, 1965; ч. 2, 1967.
Моффат Г. Некоторые направления развития теории турбулентности: Сб. Современная гидродинамика. Успехи и проблемы/ Под ред. Дж. Бетчелора, Г. Моффата.— М.: Мир, 1984.
Неймарк Ю. И., Ланда П. С. Стохастические и хаотические колебания.— М.: Наука, 1987.
Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах.— М.: Мир, 1979.
Новиков Е. А. Функционалы и метод случайных сил в теории турбулентности // ЖЭТФ. 1964. Т. 47. С. 1919.
Новожилов В. В. Теория плоского турбулентного пограничного слоя.— Л.: Судостроение, 1977.
Обухов А. М. Течение Колмогорова и его экспериментальное моделирование // УМН. 1983. Т. 38. С. 101.
Ораевский А. Н. Динамическая стохастичность и лазеры // Тр. ФИАН СССР, 1986. Т. 171. С. 3.
Паташинский А. З., Покровский В. Л. Флуктуационная теория фазовых переходов.— М.: Наука, 1982.
Песин Я. Б. Характеристические показатели Ляпунова и гладкая эргодическая теория // УМН. 1977. Т. 32. С. 39.
Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов.— М.: Наука, 1960.
Пригожин И. От существующего к возникающему.— М.: Наука, 1985. Изд.3. М.: КомКнига/URSS, 2006.
Пригожин И., Стенгерс И. Порядок из хаоса.— М.: Прогресс, 1986. Изд.5. М.: КомКнига/URSS, 2005.
Полак Л. С., Михайлов А. С. Самоорганизация в неравновесных физико-химических системах.— М.: Наука, 1983.
Рабинович М. И., Трубецков Д. И. Введение в теорию колебаний и волн.— М.: Наука, 1984.
Романовский Ю. М., Степанова Н. В., Чернавский Д. С. Математическое моделирование в биофизике.— М.: Наука, 1975.
Романовский Ю. М., Степанова Н. В., Чернавский Д. С. Математическая биология.— М.: Наука, 1984.
Рытов С. М. Введение в статистическую радиофизику. Случайные процессы.— М.: Наука, 1976.
Самарский А. А., Галактионов В. А., Курдюмов С. П., Михайлов А. П. Режимы с обострением в задачах для квазилинейных параболических уравнений.— М.: Наука, 1987.
Сигов Ю. С. Дискретное моделирование коллективных процессов в разреженной плазме (метод макрочастиц): Сб. Численное моделирование коллективных процессов в плазме/Под ред. М. В. Масленникова.— М.: ИПМ АН СССР, 1980.
Силин В. В., Рухадзе А. А. Электромагнитные свойства плазмы и плазмоподобных сред.— М.: Атомиздат, 1961.
Силин В.П. Введение в кинетическую теорию газов.— М.: Наука, 1971.
Силин В. П. Поглощение излучения турбулентной лазерной плазмой // УФН. 1985. Т. 145. С. 225.
Синай Я. Г. Стохастичность динамических систем: Сб. Нелинейные волны/Под ред. А. В. Гапонова-Грехова.— М.: Наука, 1979.
Синай Я. Г. Динамические системы-2. Современные проблемы математики, т. 2.— М.: Изд-во ВИНИТИ, 1985.
Синай Я. Г., Шильников Л. П. (ред.) Странные аттракторы.— М.: Мир, 1981.

Ситенко А. Г. Электромагнитные флуктуации в плазме.— Харьков: Изд-во Харьков. ун-та, 1965.
Ситенко А. Г. Флуктуации и нелинейное взаимодействие волн в плазме.— Киев: Наукова думка, 1977.
Ситенко А. Г. Флуктуации в турбулентной плазме // Физ. плазмы. 1975. Т. 1. С. 45.
Смирнов Б. М. Фрактальные кластеры // УФН. 1986. Т. 149. С. 177.
Соколов И. М. Размерности и другие геометрические критические показатели в теории протекания // УФН. 1986. Т. 150. С. 221.
Стратонович Р. Л. Избранные вопросы теории флуктуаций в радиотехнике.— М.: Сов. радио, 1961.
Стратонович Р. Л. Теория информации.— М.: Сов. радио, 1975.
Стратонович Р. Л. Нелинейная неравновесная термодинамика.— М.: Наука, 1985.
Татарский В. И. Вигнеровское представление квантовой механики // УФН. 1983. Т. 139. С. 587.
Теодорчик К. Ф. Генераторы с инерционной нелинейностью // ДАН СССР. 1945. Т. 50. С. 191.
Толубинский Е. В. Теория процессов переноса.— Киев: Ин-т техн. теплофиз., 1969.
Файн В. М. Фотоны и нелинейные среды.— М.: Сов. радио, 1972.
Фейгенбаум М. Универсальность в поведении нелинейной системы // УФН. 1983. Т. 141. С. 343.
Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике.— М.: Наука, 1967.
Фрост У., Моулден Т. Турбулентность.— М.: Мир, 1980.
Хакен Г. Синергетика.— М.: Мир, 1980, 1985.
Хорштемке В., Лефевер Р. Индуцированные шумом переходы.— М.: Мир, 1987.
Христов Х. И. Принцип максимальности скорости диссипации энергии и возможность его применения к турбулентному течению в плоском канале // ДАН СССР. 1979. Т. 245. С. 1071.
Христов Х. И., Нартов В. П. Бифуркации и появление стохастического решения в одной вариационной задаче, связанной с плоским течением Пуазейля // ДАН СССР, 1984.
Цетлин М. Л. Исследования по теории автоматов и моделированию биологических систем.— М.: Наука, 1969.
Цытович В. Н. Теория турбулентной плазмы.— М.: Атомиздат, 1971.
Чандрасекар С. Стохастические проблемы в физике и астрономии.— М.: ИЛ, 1947.
Чириков Б. В. Переходный хаос в квантовой и классической механике.— Новосибирск: ИЯФ СО АН СССР, 1985.
Шапиро А. П., Луппов С. П. Рекуррентные уравнения в теории популяций.— М.: Наука, 1983.
Шарковский А. Н. Сосуществование циклов непрерывного отображения прямой в себя // УМЖ. 1964. Т. 16. С. 61.
Шарковский А. Н. О циклах и структуре непрерывного отображения // УМЖ. 1965. Т. 17. С. 104.
Шарковский А. Н., Майстренко Ю. Л., Романенко Е. Ю. Разностные уравнения и их приложения.— Киев: Наукова думка, 1986.
Шелепин Л. А. Вдали от равновесия.— М.: Знание, 1987.
Шлихтинг Г. Возникновение турбулентности.— М.: ИЛ, 1962.
Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя.— М.: Наука, 1969.
Шпон Г. Теория флуктуаций и уравнение Больцмана: Сб. Уравнение Больцмана/Под ред. А. В. Бобылева, Д. Н. Зубарева.— М.: Мир, 1986.

Шустер П. Детерминистский хаос.— М.: Мир, 1988.
Эбелинг В. Образование структур при необратимых процессах.— М.: Мир, 1979.
Эйген М. Самоорганизация материи и эволюция биологических макромолекул.— М.: Мир, 1973.
Эйген М., Винклер П. Игра жизни.— М.: Наука, 1979.
Эйген М., Шустер П. Гиперцикл.— М.: Мир, 1979.
Эккер Г. Теория полностью ионизованной плазмы.— М.: Мир, 1974.
Яблонский Г. С., Быков В. И., Горбань А. Н. Кинетические модели каталитических реакций.— Новосибирск: Наука, 1983.
Bethe H. The Electromagnetic Shift of Energy Levels // Phys. Rev. 1947. V. 72. P. 339.
Born M., Green H. S. A General Kinetic Theory of Liquids.— Cambridge: Cambridge University Press, 1949.
Callen H. B., Welton T. A. Irreversibility and Generalized Noise // Phys. Rev. 1951. V. 83. P. 34.
Casati G. (ed.). Chaotic Behavior in Quantum Systems.— N. Y.: Plenum Press, 1985; NATO Series: Physics. V. 120.
Chandrasekhar S. Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability.— Oxford: Clarendon, 1961.
Ebeling W., Engel A., Esser B. Diffusion and Reaction in Random Media and Models of Evolution Processes // J. Stat. Phys. 1984. V. 37. P. 369.
Ebeling W., Engel A. Models of Evolutionary Systems and their Application to Optimization Problems // Syst. Anal. Model. Simul. 1986. V. 3. P. 377.
Ebeling W., Klimontovich Yu. L. Selforganization and Turbulence in Liquids.— Leipzig: Teubner, 1984.
Crutchfeld J., Farmer J., Huberman B. Fluctuation and simple chaotic dynamics // Phys. Rev. 1982. V. 92. P. 45.
Eckmann J., Ruelle D. Ergodic Theory of Chaos and Strange Attractors // Rev. of Mod. Phys. 1985. V. 57. P. 617.
Engel-Herbert H., Ebeling W. The behavior of the entropy durung Transitions far from thermodynamic equilibrium. I. Sustained Oscillations; II. Hydradynamic flows // Physica. 1988. V. 149A. P. 182, 195.
Fox R., Ulenbeck G. Contribution in nonequilibrium thermodynamics. II. Fluctuation theory for the Boltzmann equation // Phys. Fluids. 1970. V. 13. P. 881.
Gantsevich S. V., Gurevich V. L., Katilus R. Theory of Fluctuations in Nonequilibrium Electron Gas // Rivista del Nuovo Cimento. 1979. V. 2. P. 1.
Gihman I. I., Skorohod A. V. Stochastic Differential Equations.— Berlin: Heidelberg; N. Y.: Springer, 1972.
Gihman I. I., Skorohod A. V. The Theory of Stochastic Processes.— Berlin; Heidelberg; N. Y.: Springer, 1974.
Gleick J. Chaos. Making of a New Science.— L.: Heinemann, 1988.
Grossmann S., Thomae S. Invariant Distribution and Stationary Correlation Function in One-Dimensional Discrete Processes // Z. Naturforschung. 1977. V. 32A. P. 1353.
Haken H. Light.— Amsterdam; N. Y.; Oxford: North-Holland, 1981.
Haken H. Information, Information Gain and Efficiency of Self-Organizing Systems Close to Instability Points // Z. Phys. B. 1985. Bd 61. S. 329.

Haken H. Information and Information Gain Close to Nonequilibrium Phase Transitions. Numerical Results // Z. Phys. B. 1986. Bd 62. S. 255.
Haken H. Information and Self-Organization.— Berlin; Heidelberg; New York; London: Springer, 1988.
Keizer J. Statistical Thermodynamics of Nonequilibrium Processes.— Berlin; Heidelberg; New York; London: Springer, 1987.
Holden A. (ed.). Chaos.— Manchester: University Press, 1986.
Kirkwood J. G. The statistical mechanical theory of transport processes // J. Chem. Phys. 1946. V. 14. P. 180, 347; 1947. V. 15. P. 72.
Klimontovich Yu. L. Nonequilibrium Sources of Hydrodynamical Fluctuations. Mutual Influence of Hydradynamic Motion and Nonequilibrium Fluctuations in the Kinetic Coefficients // Ann. Phys. 1982. Bd 39. S. 417.
Klimontovich Yu. L. Fluctuation-Dissipation Relations for Equilibrium and Non-Equilibrium States. Kinetic Equations for Many-Particle Distribution Functions // Beitr. Plasmaphys. 1984. V. 24. P. 1.
Klimontovich Yu. L. Entropy in Time Averaging. In Selforganization by Nonlinear Irreversible Processes/Eds W. Ebeling, H. Ulbricht.— Berlin; Heidelberg: Springer, 1986.
Klimontovich Yu. L. Boltzmann — Gibbs Entropy as Measure of Order in Self-Organizing (Synergetic) Systems: In the series "Springer Proceedings in Physics", 1987.
Klimontovich Yu. L. S-Theorem // Z. Phys. B. 1987. Bd 66. S. 125.
Klimontovich Yu. L. Entropy Evolution in Self-Organization Processes. H-Theorem and S-Theorem // Physica. 1987. V. 142A. P. 390.
Klimontovich Yu. L. Irreversibility and Fluctuation-Dissipation Relations // Physica. 1987. V. 142A. P. 374.
Klimontovich Yu. L., Bonotz M. Evolution of the Entropy of Stationary States in Self-Organization Processes in the Control Parameter Space // Z. Phys. B. 1988. Bd 70. S. 241.
Klimontovich Yu. L., Boon J. P. Natural Flicker Noise (1/f Noise) in Music // Europhys. Lett. 1987. V. 3(4). P. 395.
Klimontovich Yu. L., Wimhelmsson H., Yakimenko I. P., Zagorodny A. G. Statistical Theory of Plasma-Molecular Systems.— Physycs Reports, 1989. V. 175, № 5, 6. P. 263—401.
Klimontovich Yu. L., Shevchenko A. Yu., Yakimenko I. P., Zagorodny A. G. Statistical Theory of Bremsstrahlung in Plasma Molecular Systems // Contribution to Plasma Physics. 1990. V. 29. P. 1.
Krinsky V. I. (ed.). Self-Organization. Autowaves and Structures Far from Equilibrium.— Berlin; Heidelberg: Springer, 1984.
Kubo R. Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes // J. Phys. Soc. Jap. 1957. V. 12. P. 570.
Kubo R., Toda M., Hashitsume N. Statistical Physics.— Berlin; Heidelberg: Springer, 1983.
Kuramoto Y. Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence.— Berlin; Heidelberg; New York; Tokyo: Springer, 1984.
Lamb W., Ratherford R. Fine Structure of the Hydrogene Atom by a Microwave Method // Phys. Rev. 1947. V. 72. P. 241.
Li Tien-Yien, York J. Period Three implies chaos // American Mathematical Monthly. 1975.— V. 82. P. 985.

Lorenz E. Deterministic Nonperiodic Flow // J. Atmospheric Sciences. 1963. V. 20. P. 167.
Mandel P., Smith S. D., Wherrett B. S. From Optical Bistability towards Optical Computing: North-Holland, 1987.
Mandelbrot B. The Fractal Geometry of Nature.— San Francisco: Freeman, 1982.
May R. Simple Mathematical Models with very Complicated Dynamics // Nature. 1976. V. 261. P. 459.
Mayer-Kress G., Haken H. The Influence of Noise on the Logistic Model // J. Stat. Phys. 1981. V. 26. P. 149.
Milonni P. W., Shin M. L., Ackerhalt J. R. Chaos in Laser-Matter Interactions.— World Scientific, 1987.
Nachtsheim P. R. An initial value method for the numerical treatment of the Orr — Sommerfeld eguation for the case of plane Poiseuelle flow // NASA Tech. Note, 1964. D-2414.
Nyquist H. Thermal agitation of electrical charge in conductors // Phys. Rev. 1928. V. 32. P. 110.
Orszag S. A. Numerical simulations of incompressible flows within simplebounderies // Stud. Appl. Maths. 1971. V. 50. P. 293.
Peitgen H. O., Richter P. H. The Beauty of Fractals.— Berlin; Heidelberg; N. Y.; Tokyo: Springer, 1986.
Prigogine I., Stengers I. Entre le Temps et l'eternite.— Paris: Fayard, 1988.
Reichardt H. Vollstandige Darstellung der turbulenten Geschwindingkeitverteilung in glatten Leitungen // SAMM. 1956. Bd 31. S. 208.
Risken H. The Fokker-Planck Equation.— Berlin; Heidelberg; N. Y.; Tokyo: Springer, 1984.
Rozhdestvensky B. L., Simakin I. N. Secondary flows in a plane channel: their relationship and comparison with turbulent flows // J. Fluid. Mech. 1984. V. 147. P. 261.
Ruelle D., Takens F. On the Nature of Turbulence // Commun. Math. Phys. 1971. V. 20. P. 167.
Shavlov A. L., Towns C. H. Infrared and Optical Masers // Phys. Rev. 1958. V. 112. P. 1940.
Thomas L. The stability of plane Poiseuille flow // Phys. Rev. 1953. V. 91. P. 780.
Turing A. M. The Chemical Basis if the Morphogenesis // Proc. Roy. Soc., B. 1952. V. 237. P. 37.
Velarde M. (ed.). Synergetics, Order and Chaos.— Singapore; New Jersey; London; Hong Kong: World Scientific, 1988.
Van Kampen N. G. Stochastic Processes in Physics and Chemistry.— Amsterdam; N. Y.; Oxford: North-Holland P. C., 1983.
Weissman M. B. 1/f noise and other slow nonexponential kinetics in condensed matter // Rev. Mod. Phys. 1988. V. 60. P. 537.
Welton Th. Some Observable Effects of the Quantum-Mechanical Fluctuations of the Electromagnetic Field // Phys. Rev. 1948.— V. 74.— P. 1157.
Zubarev D. N., Morozov V. G. Statistical Mechanics of Nonlinear Hydrodynamic Fluctuations // Physica. 1983. V. 120A. P. 411.

ДОПОЛНЕНИЕ К ОСНОВНОМУ СПИСКУ ЛИТЕРАТУРЫ

Гладышев Г. П. Термодинамика и макрокинетика природных иерархических процессов.— М.: Наука, 1988.
Кернер Б. С., Осипов В. В. Автосолитоны // УФН. 1989. Т. 157. С. 201.

Кравцов Ю. А. Случайность, детерминированность, предсказуемость // УФН. 1989. Т. 158. С. 93.
Кравцов Ю. А. Фактические границы гипотезы замкнутости и классические парадоксы кинетической теории // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. С. 1661.
Ротт Л. А. Статистическая теория молекулярных систем.— М.: Наука, 1979.
Ротт Л. А. К теории турбулентности; Характеристики турбулентного пуазейлевого течения // Инженерно-физический журнал. 1989. Т. 56. С. 894; 1989. Т. 57. С. 382.
Татарский В. И. Пример описания диссипативных процессов на основе обратимых динамических уравнений и некоторые замечания относительно флуктуационно-диссипационной теоремы // УФН. 1987. Т. 151. С. 273.
Татарский В. И. О критериях степени хаотичности // УФН. 1989. Т. 158. С. 123.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ К ДОПОЛНЕНИЮ

Андреев А. Ф. Поправки к гидродинамике жидкости // ЖЭТФ. 1978. Т. 75. С. 1132.
Валандер С. В. Уравнения динамики вязкого газа // ДАН СССР. 1951. Т. 78. С. 25.
Вашман А. А., Пронин И. С. Ядерная магнитная релаксационная спектроскопия.— М.: Энергоиздат, 1986.
Климонтович Ю. Л. Естественный фликкер-шум («шум 1/*f*») // Письма в ЖЭТФ. 1990. № 1. Т. 51. С. 43.
Климонтович Ю. Л. Кинетическое описание гидродинамического движения. Баланс энтропии // Письма в ЖЭТФ. 1990. № 11. С.
Климонтович Ю. Л. Влияние самодиффузии на спектры гидродинамических флуктуаций // Письма в ЖТФ. 1990. Т. 16. С. 1516.
Сивухин Д. В. Общий курс физики: В 5 т. Т. II: Термодинамика и молекулярная физика.— М.: Наука, 1990.
Скрипов В. П. Метастабильная жидкость.— М.: Наука, 1972.
Слезкин Н. А. О дифференциальных уравнениях вязкого газа // ДАН СССР. 1951. Т. 77. С. 205.
Шапошников И. Г. К вопросу об учете диффузионных явлений в уравнениях гидродинамики // ЖЭТФ, 1951. Т. 21. С. 1309.
Morozov V. G. Nonlocal hydrodynamics and dispersion of transport coefficients in simpl fluid // Physica A. 1983. V. 117. P. 511.

ОГЛАВЛЕНИЕ

От редакции 3

Последний процент (*Г.Г.Малинецкий*) 6

Предисловие 9

Введение. **Основные проблемы** 13

В.1. Критерии относительной степени упорядоченности различных неравновесных состояний в открытых системах 14
В.2. Связь статистического и динамического описаний движения в открытых системах. Конструктивная роль динамической неустойчивости движения . . 17
В.3. Переход от обратимых уравнений к необратимым. Ансамбль Гиббса в статистической теории неравновесных процессов 1
В.4. Роль флуктуаций на различных уровнях описания. Флуктуационно-диссипационные соотношения . . 19
В.5. Броуновское движение в открытых системах. Молекулярные и турбулентные источники флуктуаций 20
В.6. Ламинарное и турбулентное движение 21

Глава 1

Эволюция энтропии и производство энтропии в открытых системах 23

1.1. Хаос и порядок. Управляющие параметры. Физический хаос. Эволюция и самоорганизация в открытых системах 23
1.2. Энтропия Больцмана — Гиббса — Шеннона . . . 27
1.3. Функция распределения значений энтропии . . 30
1.4. Ансамбль Гиббса. Сглаживание по физически бесконечно малому объему. Энтропия с учетом флуктуаций. Пространственные (временные) и фазовые средние. Локальное условие эргодичности . . . 33
1.5. Кинетическое уравнение Больцмана для статистического и сглаженного распределений. Физически бесконечно малые масштабы для газа Больцмана.

Конструктивная роль динамической неустойчивости движения атомов газа 40

1.5.1. Характерные параметры взаимодействия (40). 1.5.2. Кинетическое уравнение Больцмана для статистического распределения (42). 1.5.3. Кинетическое уравнение Больцмана для сглаженного распределения (48).

1.6. Роль неравновесных флуктуаций в газе Больцмана. Молекулярные и турбулентные источники флуктуаций 52

1.7. Кинетические уравнения для N-частичных функций распределения. Уравнение Леонтовича 57

1.8. Н-теорема Больцмана для сглаженных (пульсирующих) и детерминированных распределений . . 61

1.9. Энтропия и производство энтропии для сглаженных и детерминированных распределений 64

1.9.1. Энтропия и производство энтропии без учета крупномасштабных флуктуаций (64). 1.9.2. Производство энтропии с учетом крупномасштабных — кинетических флуктуаций (66).

1.10. Теорема Гиббса 69

1.11. Н-теорема для открытых систем. Энтропия Кульбака 72

1.12. Эволюция в пространстве управляющих параметров. S-теорема 76

1.13. S-теорема. Локальная формулировка 78

1.14. Сравнение относительной степени упорядоченности состояний открытых систем по S-теореме на основе экспериментальных данных 81

1.15. Динамическое и статистическое описание сложных движений. К-энтропия, показатели Ляпунова. Нелинейные характеристики расходимости траекторий 84

1.16. Критерии динамической неустойчивости движения в статистической теории 88

1.16.1. Функция распределения расстояний между траекториями (88). 1.16.2. К-энтропия и производство энтропии в статистической теории (92).

1.17. Энтропия — мера разнообразия в процессах биологической эволюции 94

1.18. Принцип минимума производства энтропии в процессах самоорганизации 97

Глава 2

Переход от обратимых уравнений механики к необратимым уравнениям статистической теории 100

2.1. Два вида обратимых процессов. Свойства симметрии функций распределения 101

2.2. Уравнения Лиувилля и Власова. Приближение первых моментов и «бесстолкновительное» приближение 103

2.2.1. Уравнение Лиувилля при разных определениях ансамбля Гиббса (103). 2.2.2. Недиссипативные и диссипативные цепочки уравнений для последовательности функций распределения (105). 2.2.3. Уравнения Власова и Больцмана — Власова — приближения первых моментов (108).

2.3. Обратимые уравнения в квантовой статистической теории 111

2.3.1. Чистый ансамбль. Микроскопическая матрица плотности (111). 2.3.2. Смешанный ансамбль. Уравнение для матрицы плотности (111). 2.3.3. Различные представления матрицы плотности (111).

2.4. Два типа диссипативных кинетических уравнений для N-частичных распределений 113

2.5. Мера неполноты статистического описания . . . 116

2.6. Иерархия уравнений механики сплошной среды . 119

2.6.1. Кинетические уравнения (119). 2.6.2. Уравнения гидродинамики (120). 2.6.3. Н-теорема в гидродинамике (123). 2.6.4. Диффузия. Н-теорема (123). 2.6.5. Диффузия частиц в ограниченной системе. Фликкер-шум (124).

Глава 3

Флуктуационно-диссипационные соотношения 126

3.1. Примеры флуктуационно-диссипационных соотношений 127

3.1.1. Простейшие примеры ФДС. Формулы Эйнштейна и Найквиста (127). 3.1.2. Два квантовых обобщения классической формулы Найквиста (129).

3.2. ФДС для N-частичных функций распределения . 133

3.2.1. Двухвременной коррелятор флуктуаций матрицы плотности (133). 3.2.2. Спектральная плотность флуктуаций. ФДС. «Бесстолкновительное» приближение (135).

3.3. Термодинамическая форма ФДС. Формула Каллена — Вельтона 137

3.3.1. Формула Каллена — Вельтона (137). 3.3.2. Флуктуационная трактовка формулы Каллена — Вельтона (140). 3.3.3. Связь формулы Каллена — Вельтона с ФДС для N-частичной функции распределения (141). 3.3.4. Условия справедливости «бесстолкновительного» приближения (142). 3.3.5. Каково же происхождение диссипации в формуле Каллена — Вельтона? (144). 3.3.6. Следует ли квантовая формула Найквиста из формулы Каллена — Вельтона? (146).

3.4. ФДС для газа Больцмана. Флуктуационное представление интеграла столкновений Больцмана . . 146

3.4.1. ФДС для флуктуаций одночастичной матрицы плотности (146). 3.4.2. ФДС для газа Больцмана (147). 3.4.3. Флуктуационное представление интеграла столкновений Больцмана (149).

3.5. ФДС для крупномасштабных — кинетических флуктуаций 150

3.6. Примеры ФДС для крупномасштабных флуктуаций 153

3.6.1. ФДС для газа Больцмана (153). 3.6.2. Система атомов, взаимодействующих через флуктуационное электромагнитное поле (154). 3.6.3. Равновесное электромагнитное излучение в полости. Формула Планка (156). 3.6.4. Электрон в тепловом электромагнитном поле (159). 3.6.5. Квантовая формула Найквиста для плазменного электрического контура (162). 3.6.6. Равновесное электромагнитное излучение в полости, заполненной средой. Формула Планка (164).

3.7. Система квантовых атомов-осцилляторов . . . 166

3.7.1. Линейное трение. Коэффициент диффузии и интенсивность шума (166). 3.7.2. Коэффициент диффузии для системы атомов-осцилляторов с нелинейным трением (168). 3.7.3. Зависимость ширины спектральной линии

квантовых генераторов от энергии (169). 3.7.4. Лэмбовский сдвиг и квантовая формула Найквиста (171).

3.8. Флуктуационно-диссипационные соотношения в гидродинамике 175

3.8.1. Два способа описания гидродинамических флуктуаций (175). 3.8.2. Источники Ланжевена в уравнениях гидродинамики. ФДС (176).

3.9. Два способа определения кинетических коэффициентов 178

3.10. Молекулярный источник Ланжевена в уравнении диффузии 181

3.11. Связь интенсивностей источников Ланжевена с коррелятором флуктуаций фазовой плотности . . 182

3.12. Фликкер-шум. ФДС для шума «1/f» 183

Глава 4

Броуновское движение 185

4.1. Уравнения Фоккера — Планка и Ланжевена . . 186

4.2. Три определения уравнений Ланжевена и Фоккера — Планка 188

4.3. Уравнения Фоккера — Планка в статистической теории неравновесных процессов 192

4.3.1. Краткие итоги и ближайшие задачи (192). 4.3.2. Два типа уравнений для системы атомы — поле. Роль нулевых колебаний поля (192). 4.3.3. Уравнение Фоккера — Планка для плазмы (197). 4.3.4. Уравнение Фоккера — Планка для газа Больцмана (199).

4.4. Связь уравнения Фоккера — Планка с уравнениями Смолуховского и Чепмена — Колмогорова . . . 202

4.5. Источники Ланжевена в кинетических уравнениях 205

4.5.1. Уравнение Ланжевена для одночастичной функции распределения (205). 4.5.2. Связь метода функций распределения (метода моментов) с методом Ланжевена (207). 4.5.3. Связь интенсивности источника Ланжевена и производства энтропии (208). 4.5.4. Флуктуации N-частичного распределения в газе Больцмана (209). 4.5.5. Иерархия условий неполноты статистического описания (211).

4.6. Источники Ланжевена в уравнениях Фоккера — Планка и Эйнштейна — Смолуховского 212

4.7. Турбулентные источники Ланжевена и флуктуационно-диссипационные соотношения в гидродинамике 217

4.8. Броуновское движение в системах с переменным числом частиц 220

Глава 5

Энтропия Больцмана — Гиббса — Шеннона — критерий относительной степени упорядоченности в открытых системах 224

5.1. Генератор Ван дер Поля 224

5.1.1. Математическая модель (224). 5.1.2. H-теорема для генератора Ван дер Поля (226). 5.1.3. S-теорема. Самоорганизация в генераторе Ван дер Поля (227). 5.1.4. Локальная форма S-теоремы для генератора Ван дер Поля (228). 5.1.5. Энтропии Шеннона — «S-информация» (229).

5.2. Генератор с инерционной нелинейностью . . . 230
5.3. Инвариантные меры. Примеры распределений Гиббса для открытых систем 233
5.3.1. Инвариантные меры — стационарные распределения (233). 5.3.2. Распределения Гиббса для генератора Ван дер Поля (237). 5.3.3. Распределение для состояния динамического хаоса (239).
5.4. Обобщенные генераторы Ван-дер Поля. Бифуркации энергии предельного цикла и периода колебаний . 240
5.4.1. Генераторы с ветвлениями значений энергии предельного цикла (240). 5.4.2. Генераторы в дискретном времени. Бифуркации энергии предельного цикла и периода колебаний. (242). 5.4.3. Функция распределения энергии для состояния «динамического хаоса» (243).
5.5. Динамические и статистические распределения . . 245
5.5.1. Генераторы с ветвлениями значений энергии предельного цикла (245). 5.5.2. Скачок энтропии в критической точке (246). 5.5.3. Динамические распределения (247). 5.5.4. Уравнение Фоккера — Планка для генераторов в дискретном времени. Устойчивость стационарных решений по H-теореме (248).
5.6. Сравнение степени упорядоченности в точках бифуркаций и в состоянии «динамического хаоса» 253
5.6.1. Энтропия при каноническом и микроканоническом распределениях Гиббса — иллюстрация к S-теореме (253). 5.6.2. Обобщенный генератор. Сравнение степени упорядоченности трех состояний: порог генерации, точка ветвления, динамический хаос (254).
5.7. Эволюция энтропии в системах с двумя управляющими параметрами 256
5.7.1. Генератор Ван дер Поля с мягким и жестким возбуждением (256). 5.7.2. Генератор Ван дер Поля при внешнем резонансном воздействии (257).
5.8. Среда из связанных генераторов 259
5.8.1. Базовые математические модели теории самоорганизации — синергетики (259). 5.8.2. Система взаимодействующих генераторов. Когерентная генерация (261).
5.9. Кинетический подход в теории химически реагирующих сред, фазовых переходов и в гидродинамике 264

Глава 6

Турбулентное движение. Структура хаоса 266

6.1. Характерные особенности турбулентного движения. Основные проблемы 267
6.2. Несжимаемая жидкость. Уравнение Рейнольдса. Напряжения Рейнольдса 269
6.3. Развитая турбулентность. Турбулентная вязкость 270
6.4. Полуэмпирическая теория турбулентности Прандтля — Кармана 274
6.5. Возникновение турбулентности при стационарных течениях Куэтта и Пуазейля 276
6.5.1. Квазилинейное приближение (276). 6.5.2. Устойчивость стационарного ламинарного течения Куэтта (278). 6.5.3. Возникновение турбулентности при течении Пуазейля (278). 6.5.4. Уравнение для профиля скорости в критической области (280). 6.5.5. Обобщение условия замыкания Кармана — Прандтля на область перехода (283).
6.6. Производство энтропии при ламинарном и турбулентном течениях . . . . . .

6.7. Принцип наименьшей диссипации и принцип минимума производства энтропии в процессах самоорганизации 288
6.8. Эволюция энтропии при переходе от ламинарного течения к турбулентному 289

Дополнение 295

Д.1. Естественный фликкер-шум и сверхпроводимость 295
Д.2. Кинетическое описание гидродинамического движения 296
Д.3. Уравнения гидродинамики с учетом самодиффузии 298

Заключение 301
Список литературы 305
Дополнение к основному списку литературы 316
Список литературы к дополнению 317