УДК 530+517

Ансамбли Гиббса, равнораспределенность энергии симпатических осцилляторов и статистические модели термостата

В. В. Козлов
Математический институт им. В. А. Стеклова РАН
119991, Москва, ул. Губкина, 8
E-mail: kozlov@pran.ru

Получено 13 июня 2007 г.

Развивается подход к обоснованию «нулевого» начала термодинамики, основанный на анализе слабых пределов решений уравнения Лиувилля при неограниченном возрастании времени. Указан класс линейных колебательных систем, для которых независимо от начальной плотности распределения вероятностей происходит равномерное распределение средней энергии по степеням свободы. Сюда относятся, в частности, классические симпатические маятники. Найдены условия, при которых нелинейные гамильтоновы системы с конечным числом степеней свободы стремятся (в слабом смысле) к выравниванию средних энергий взаимодействующих подсистем. Обсуждается круг вопросов, связанный со статистическими моделями термостата.

Ключевые слова: гамильтонова система, симпатические осцилляторы, слабая сходимость, термостат.

V. V. Kozlov

Gibbs Ensembles, Equidistribution of the Energy of Sympathetic Oscillators and Statistical Models of Thermostat

The paper develops an approach to the proof of the “zeroth” law of thermodynamics. The approach is based on the analysis of weak limits of solutions to the Liouville equation as time grows infinitely. A class of linear oscillating systems is indicated for which the average energy becomes eventually uniformly distributed among the degrees of freedom for any initial probability density functions. An example of such systems are sympathetic pendulums. Conditions are found for nonlinear Hamiltonian systems with finite number of degrees of freedom to converge in a weak sense to the state where the average energies of the interacting subsystems are the same. Some issues related to statistical models of the thermostat are discussed.

Keywords: Hamiltonian system, sympathetic oscillators, weak convergence, thermostat.
Mathematical Subject Classifications: 37A60, 60K35, 70H05, 82B30, 40A99.

1. Введение

Обоснование «нулевого» начала термодинамики (стремление изолированной системы к состоянию теплового равновесия) — одна из ключевых задач *неравновесной* статистической механики. Эта задача содержит, в частности, анализ свойства выравнивания температуры взаимодействующих подсистем одной изолированной системы. Сюда же примыкает задача о стремлении системы к равнораспределенности энергии по степеням свободы. В *равновесной* статистической механике это свойство сразу же выводится из канонического распределения Гиббса. К этому же кругу вопросов относятся и задача о термостате: показать, что в системе, связанной с термостатом, устанавливается статистическое равновесие, причем температура системы стремится к температуре самого́ термостата. При этом термостат следует понимать в статистическом смысле как систему с очень большим числом степеней свободы и связь между исследуемой системой и термостатом определяется наличием «слабого» взаимодействия.

Задача о равнораспределенности энергии по степеням свободы колебательной системы рассматривалась в классической работе Ферми, Паста и Улама [1]. Изучалась цепочка из N одинаковых частиц, причем соседние частицы были соединены нелинейными пружинами. Вопреки ожиданию, при $N = 64$ энергия системы не распределялась по различным модам колебаний, а сама система регулярно «почти» возвращалась к своему начальному состоянию. Впрочем, в таком поведении системы нет ничего удивительного: по теореме Пуанкаре о возвращении, энергии отдельных частиц как функции времени осциллируют и, конечно, не стремятся к определенным значениям при неограниченном возрастании времени. Однако после усреднения по времени эти величины *необратимо* стремятся к своим предельным значениям (как это видно на рис. 9 из статьи [1]).

Первый пример статистической модели термостата был предложен впервые, по-видимому, Н. Н. Боголюбовым ([2], гл. IV). Система S представляет собой обычный гармонический осциллятор с гамильтонианом

$$H_S = \frac{(p^2 + \omega^2 q^2)}{2},$$

а термостат Σ моделируется системой большого числа N независимых гармонических осцилляторов с гамильтонианом

$$H_\Sigma = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}(p_j^2 + \omega_j^2 q_j^2).$$

Гамильтониан взаимодействия выбирается в виде квадратичной формы

$$H_{S\Sigma} = \varepsilon \sum_{j=1}^{n} \alpha_j q_j q,$$

где $\alpha_j = \mathrm{const}$, ε — малый параметр. Если $\alpha_j < 0$, то при малых $\varepsilon > 0$ возмущение $H_{S\Sigma}$ можно представить в более привычном виде потенциальной энергии взаимодействующих осцилляторов

$$\frac{\varepsilon}{2}\sum |\alpha_j|(q_j - q)^2,$$

однако при этом частоты ω и ω_j изменятся на малую (вместе с ε) величину.

Предполагается, что в начальный момент времени состояние осциллятора с гамильтонианом H_S фиксировано, а осцилляторы из «большой» системы Σ распределены по закону Гиббса с одной и той же температурой T. В [2] показано, что при некоторых достаточно общих условиях при $N \to \infty$ и малых ε система S с течением времени неограниченно приближается к равновесному статистическому состоянию с той же температурой T.

Имеется значительное количество работ, в которых исследуются *динамические* модели термостата (гауссовские термостаты, термостат Нозé–Гувера и др.). Ссылки на оригинальные работы и обсуждение можно найти в обзорных работах из сборника [3]. В этих моделях в уравнения движения вводятся дополнительные негамильтоновы или диссипативные слагаемые, которые должны обеспечивать стремление плотности распределения (или же полной энергии системы) к каноническому распределению Гиббса (к фиксированному значению). Поскольку эти модели феноменологические, а не статистические, то они в этой работе не обсуждаются.

2. Нулевое начало термодинамики

Прежде чем обсуждать поставленные выше вопросы, необходимо дать *строгое* определение статистического (теплового) равновесия динамической системы. Исходный пункт нашего анализа — теория ансамблей Гиббса.

Пусть Γ — фазовое пространство динамической системы

$$\dot{z} = v(z), \qquad z \in \Gamma, \tag{2.1}$$

фазовый поток которой $\{g^t\}$ (t — время) сохраняет некоторую меру $d\mu$ (фазовый объем). Для гамильтоновых систем $d\mu$ — это мера Лиувилля. Вводится вероятностная мера $d\nu_t = \rho_t d\mu$ на Γ, плотность которой ρ_t — функция из $L_1(\Gamma, d\mu)$ — удовлетворяет уравнению Лиувилля

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

Поскольку мера $d\mu$ инвариантна ($\operatorname{div} v = 0$), то ρ_t — первый интеграл динамической системы (2.1). Следовательно,

$$\rho_t(z) = \rho_0\left(g^{-t}(z)\right),$$

где ρ_0 — начальная плотность распределения вероятностей в Γ.

Еще Гиббс пытался показать, что при $t \to \infty$ плотность ρ_t сходится (в некотором смысле) к стационарной плотности $\overline{\rho}$, которая отвечала бы состоянию статистического равновесия. Однако в обычном смысле никакого предела не существует из-за того, что в общем случае ρ_t как функция t испытывает незатухающие осцилляции.

Тем не менее ситуация не является безнадежной; обычную сходимость можно заменить более сильной сходимостью, например, в смысле Чезаро:

$$\overline{\rho}(z) = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t}\int\limits_0^t \rho_u(z)du = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t}\int\limits_0^t \rho_0\left(g^{-u}(z)\right)du. \tag{2.2}$$

Согласно эргодической теореме Биркгофа–Хинчина, функция $\overline{\rho}$ определена почти всюду, инвариантна относительно $\{g^t\}$, принадлежит $L_1(\Gamma,\, d\mu)$ и (если $\mu(\Gamma) < \infty$) мера $d\overline{\nu} = \overline{\rho} d\mu$ также будет вероятностной:

$$\int\limits_\Gamma \overline{\rho} d\mu = \int\limits_\Gamma \rho_t d\mu = 1. \tag{2.3}$$

Для гамильтоновых систем, конечно, $\mu(\Gamma) = \infty$. Однако равенство (2.3) будет по-прежнему выполняться, если уровни интеграла энергии компактны.

Определение 1. Будем говорить, что статистическая динамическая система $(\Gamma, v, d\mu, \rho_t)$ *стремится* при $t \to \infty$ к равновесной системе $(\Gamma, v, d\mu, \overline{\rho})$, если плотность $\overline{\rho}$ определяется равенством (2.2).

Важно подчеркнуть, что пределы (2.2) при $t \to +\infty$ и $t \to -\infty$ совпадают почти всюду. Следовательно, при таком подходе состояния статистического равновесия в «прошлом» и «будущем» совпадают. Это простое обстоятельство вполне соответствует обратимости динамической системы (2.1) и отличает наш подход от традиционного понимания необратимости, основанного на свойствах кинетического уравнения Больцмана. Правда, как хорошо известно, уравнение Больцмана несовместимо с обратимостью исходных уравнений динамики.

Подчеркнем, что сходимость по Чезаро (2.2) можно заменить любым другим линейным и регулярным методом суммирования, который включает определение Чезаро (например, метод Абеля). Поэтому стремление системы к статистическому равновесию в соответствии с определением 1 не следует понимать буквально, что плотность ρ_t заменяется средним по интервалу $[0, t]$ и затем время t устремляется к бесконечности. Поясним этот ключевой момент.

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

$$\int\limits_{\Gamma} \rho_t \varphi d\mu \tag{2.4}$$

— ее среднее значение в момент времени t. Если $\varphi \in L_p$ (для этого достаточно предположить, что $\rho_0 \in L_p$), то для существования интеграла (2.4) следует считать, что $\varphi \in L_q \left(\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1\right)$. При $p = 1$ функцию φ надо выбирать из класса существенно ограниченных функций. Пусть, например, φ — характеристическая функция ограниченной измеримой области D конфигурационного пространства гамильтоновой системы. Ее можно поднять до измеримой функции, заданной во всем фазовом пространстве. Тогда интеграл (2.4) определяет долю гамильтоновых систем из ансамбля Гиббса, которые в момент времени t расположены в области D.

Определение 2. Мера $d\nu_t = \rho_t d\mu$, ($\rho_0 \in L_p$) *слабо* сходится к мере $d\overline{\nu} = \overline{\rho} d\mu$, если

$$\int\limits_{\Gamma} \rho_t \varphi d\mu \to \int\limits_{\Gamma} \overline{\rho} \varphi d\mu \tag{2.5}$$

для любой функции φ из L_q.

В этой ситуации мы также будем говорить, что плотность ρ_t слабо сходятся к $\overline{\rho}$ при $t \to \infty$. Имеет место следующая априорная теорема: если ρ_t слабо сходится к $\overline{\rho}$, то функция $\overline{\rho}$ определяется равенством (2.2). При $p = q = 2$ это утверждение установлено в [4], а в общем случае — в работе [5].

Определение статистического (теплового) равновесия с помощью слабой сходимости вероятностной меры $d\nu_t$ дано в [6]. Оно естественно с точки зрения перехода от микро- к макроописанию, когда мы интересуемся эволюцией не самих динамических величин, а их средних (наиболее вероятных) значений. Подчеркнем, что при таком подходе имеет смысл говорить лишь о сходимости к стационарным значениям средних значений динамических величин, а не плотности распределения вероятностей. Вообще, плотность вероятностей «существует» не сама по себе: она проявляется при вычислении средних значений.

Оказывается, слабая сходимость имеет место при некоторых дополнительных условиях, сформулированных в работе [4] в терминах спектральных свойств однопараметрической группы унитарных операторов, порождаемой фазовым потоком системы (2.1). Однако для некоторых классов динамических систем задача о слабой сходимости решается положительно. В частности, это верно для динамических систем с так называемыми *слоистыми потоками* [7]. Сюда относятся, в частности, гамильтоновы системы с однородными потенциалами степени $m \neq 2$. Доказательства слабой сходимости базируются на найденных новых формах эргодических теорем [7, 8]. В качестве примера укажем одну из них.

Пусть $\mu(M) < \infty$ и f_1, f_2 — функции из $L_2(\Gamma, d\mu)$. Тогда

$$\lim_{\sigma\to\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{\Gamma} \exp^{-\frac{t^2}{2\sigma^2}} f_1\left(g^t(z)\right) f_2(z) d\mu dt = \int\limits_{\Gamma} \overline{f_1} f_2 d\mu, \tag{2.6}$$

где $\overline{f}_1$ — биркгофовское среднее (2.2) функции f_1. В частности, если динамическая система (2.1) эргодическая (но не обязательно с перемешиванием), то правая часть равенства (1.6) факторизуется: она равна

$$\frac{1}{\mu(\Gamma)} \int\limits_{\Gamma} f_1 d\mu \int\limits_{\Gamma} f_2 d\mu.$$

Таким образом, при неограниченном возрастании дисперсии σ^2 функции $f_1\left(g^t(z)\right)$ и $f_2(z)$ становятся в среднем статистически независимыми: интеграл от произведения равен произведению интегралов. Отметим, что исторически эргодическая теория, по существу, выросла из статистической механики в связи с попытками обосновать физические идеи Больцмана о тепловом равновесии.

К сожалению, для линейных колебательных систем слабая сходимость вероятностных мер не имеет места (здесь потенциальная энергия — однородная квадратичная форма: $m = 2$): интегралы (2.4), как правило, осциллируют и не стремятся к определенным пределам при $t \to \infty$.

Чтобы исправить это положение, определение слабой сходимости (2.5) надо слегка усилить, введя дополнительное усреднение по времени:

$$\lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \int\limits_0^t \left[\int\limits_{\Gamma} \rho_s \varphi d\mu \right] ds = \int\limits_{\Gamma} \overline{\rho} \varphi d\mu. \tag{2.7}$$

Определение 3. Будем говорить, что ρ_t *слабо сходится* к $\overline{\rho}$ *по Чезаро*, если для любой пробной функции φ справедливо равенство (2.7).

Теорема 1. *Если $\rho_0 \in L_p (p \geqslant 1)$, то ρ_t всегда слабо сходится по Чезаро к функции $\overline{\rho} \in L_p$, определяемой равенством* (2.2).

Это утверждение — простое следствие известных эргодических теорем и некоторых новых идей из работы [5]. Теорема 1 показывает, что определения статистического равновесия (путем замены ρ_t стационарной функцией $\overline{\rho}$) в соответствии с формулами (2.2) и (2.7) совпадают. Теперь мы имеем общее определение статистического равновесия, которое применимо, в частности, и к вырожденным линейным гамильтоновым системам.

Конечно, для гамильтоновых систем предельная плотность $\overline{\rho}$, вообще говоря, не совпадает с плотностью канонического распределения Гиббса. Но в этом нет ничего неожиданного. Распределение Гиббса содержит абсолютную температуру, которая «разумным» образом может появиться лишь при рассмотрении динамики взаимодействующих подсистем: только тогда появляется возможность сравнивать температуры разных систем. Статистический вывод распределения Гиббса — это отдельная задача, тесно связанная с хаотизацией слабо взаимодействующих гамильтоновых систем. Существенную роль в таком рассмотрении играет идея *термодинамического предела*. В качестве примера укажем газ Больцмана–Гиббса. Это система из большого числа N маленьких одинаковых шариков, которые упруго сталкиваются между собой и со стенками прямоугольного ящика. Если предположить, что такая система эргодична (даже не обязательно с перемешиванием) на энергетических поверхностях, то слабый предел плотности вероятностей как функции времени (согласно определению 2) будет измеримой функцией, зависящей лишь от суммарной энергии такого газа. При некоторых предположениях (не физического, а лишь аналитического характера) можно доказать, что при больших N частицы асимптотически будут распределены по скоростям в соответствии с законом Максвелла [9].

Надо отметить, что формулу (2.2) для плотности стационарного распределения вероятностей обсуждал еще Н. Н. Боголюбов в известном докладе [10]. Он подчеркивал необходимость развития эргодической теории гамильтоновых систем с учетом термодинамического предела. Соглашаясь с этим замечанием, мы хотим показать, что системы с конечным (даже небольшим) числом степеней свободы могут обладать интересными статистическими свойствами.

3. Равнораспределенность энергии между симпатическими маятниками

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

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

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

Пусть $\rho_0(p_1, q_1, p_2, q_2)$ — начальная плотность распределения вероятностей в четырехмерном фазовом пространстве. Будем предполагать только, что ρ_0 — это неотрицательная суммируемая функция и существует среднее значение полной энергии

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

Если в этой формуле плотность ρ_0 заменить решением уравнения Лиувилля с этим начальным условием, то полная энергия, очевидно, не изменится.

Рассмотрим еще средние энергии отдельных осцилляторов:

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

Ввиду ограниченности интеграла (3.2), эти интегралы существуют для всех значений времени t. Однако, в отличие от полной энергии (3.2), они уже зависят от времени. Поскольку функции $p_j^2 + q_j^2$ не ограничены в $\mathbb{R}^4$, то формально теорема 1 не применима. Однако справедлива

Теорема 2. *Пределы*

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

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

Таким образом, независимо от начальной плотности распределения средние энергии осцилляторов асимптотически (при $t\to\infty$) совпадают. Удивляет тот момент, что при этом система связанных осцилляторов, конечно же, не является эргодической. Более того, она вполне интегрируема: имеется дополнительный квадратичный первый интеграл, независимый от полной энергии H. Совпадение предельных средних энергий осцилляторов можно трактовать как выравнивание температур подсистем при наличии сколь угодно слабой связи. Как будет видно из доказательства, скорость сходимости по Чезаро функций (3.3) убывает с убыванием ε. Подчеркнем, что выравнивание температур происходит без какого-либо перехода к термодинамическому пределу.

Доказательство теоремы 2 использует простое утверждение, справедливое для общих динамических систем с инвариантной мерой.

Предложение 1. *Справедлива формула*

$$\int\limits_\Gamma f\left(g^{-t}(z)\right)\varphi(z)d\mu = \int f(z)\varphi\left(g^t(z)\right)d\mu. \tag{3.4}$$

Это — следствие формулы замены переменных в кратных интегралах и свойства инвариантности меры $d\mu$ относительно преобразований g^t.

Доказательство теоремы 2.

Перейдем от канонических переменных p_j, q_j к «нормальным» координатам P_j, Q_j с помощью ортогонального преобразования

$$Q_1=\frac{q_1+q_2}{\sqrt{2}},\quad P_1=\frac{p_1+p_2}{\sqrt{2}},\quad Q_2=\frac{q_1-q_2}{\sqrt{2}},\quad P_2=\frac{p_1-p_2}{\sqrt{2}}. \tag{3.5}$$

Оно, очевидно, каноническое. В новых переменных гамильтониан принимает вид

$$H=\frac{1}{2}(P_1^2+Q_1^2)+\frac{1}{2}(P_2^2+\omega^2Q_2^2),\quad \omega^2=1+2\varepsilon>1, \tag{3.6}$$

а формулы (3.3) —

$$\begin{aligned} 4E_1 &= \int\limits_{\mathbb{R}^4}[(P_1+P_2)^2+(Q_1+Q_2)^2]\rho_t(P,Q)d^2Pd^2Q,\\ 4E_2 &= \int\limits_{\mathbb{R}^4}[(P_1-P_2)^2+(Q_1-Q_2)^2]\rho_t(P,Q)d^2Pd^2Q, \end{aligned} \tag{3.7}$$

где $\rho_t(P,Q)$ — плотность распределения вероятностей, представленная в новых переменных. В (3.7) учтено, что якобиан канонического преобразования равен единице.

Теперь воспользуемся формулой (3.4). Функция $\rho_t(P,Q)$ станет равной $\rho_0(P,Q)$, а в выражении в квадратных скобках (3.7) вместо P,Q надо подставить решения линейной гамильтоновой системы с гамильтонианом (3.6) и с начальными условиями P,Q:

$$P_1 \mapsto P_1\cos t - Q_1\sin t, \qquad Q_1 \mapsto P_1\sin t + Q_1\cos t,$$

$$P_2 \mapsto P_2\cos\omega t - \omega Q_2\sin\omega t, \qquad Q_2 \mapsto \frac{P_2}{\omega}\sin\omega t + Q_2\cos\omega t.$$

Так как функции $\sin^2 t, \sin^2\omega t, \ldots$ сходятся по Чезаро при $t \to \infty$ к $1/2$, а функции $\sin t\sin\omega t, \sin t\cos\omega t, \ldots$ — к нулю (поскольку $\omega > 1$), то

$$\lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\int\limits_0^t 4E_1(s)ds = \overline{P}_1^2 + \overline{Q}_1^2 + \frac{\overline{P}_2^2}{2}\left(1+\frac{1}{\omega^2}\right) + \frac{\overline{Q}_2^2}{2}\left(1+\omega^2\right), \tag{3.8}$$

где черта обозначает усреднение по мере $\rho_0 d^2P d^2Q$. Точно такая же формула получается и для функции E_2, что доказывает теорему. ■

В качестве иллюстративного примера рассмотрим случай, когда начальная плотность распределения вероятностей есть произведение плотностей двух нормальных распределений:

$$\rho_0 = \frac{1}{(\sqrt{2\pi}kT_1)^2}e^{-\frac{(p_1^2+q_1^2)}{2kT_1}}\frac{1}{(\sqrt{2\pi}kT_2)^2}e^{-\frac{(p_2^2+q_2^2)}{2kT_2}}.$$

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

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

$$kT_1 \qquad \text{и} \qquad kT_2 \tag{3.9}$$

соответственно, а средняя потенциальная энергия растянутой пружины равна

$$\varepsilon k\frac{T_1+T_2}{2}. \tag{3.10}$$

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

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

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

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

Сумма $\overline{E}_1 + \overline{E}_2 + \overline{\Pi}$, конечно, равна средней полной энергии системы в начальный момент времени (сумме трех чисел (3.9) и (3.10)). Ясно, что при $\varepsilon \to 0$

$$\overline{E}_j \to kT, \qquad T = \frac{T_1+T_2}{2}.$$

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

Отношение

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

монотонно возрастает от 0 до 2, когда ε изменяется в интервале $[0, \infty)$. В частности, при асимптотически больших значениях коэффициента упругости средняя энергия двух осцилляторов равна средней энергии упругой пружины. Согласно формуле (3.8) этот вывод справедлив для любой начальной плотности распределения вероятностей.

4. Многомерный аналог системы симпатических маятников

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

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \ldots \tag{4.1}$$

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

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

где A — предыдущая матрица из последовательности (4.1). Кстати сказать, все матрицы (4.1) симметричны.

Пусть $\|a_{ij}\|$ — ортогональная $n \times n$-матрица из списка (4.1). Поставим ей в соответствие гамильтонову систему с n степенями свободы и функцией Гамильтона

$$H = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}(p_j^2 + q_j^2) + \frac{\varepsilon_1}{2}\left(\sum_{k=1}^{n} a_{1k}q_k\right)^2 + \ldots + \frac{\varepsilon_n}{2}\left(\sum_{k=1}^{n} a_{nk}q_k\right)^2, \tag{4.2}$$

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

Каков физический смысл этого гамильтониана? Положим $\varepsilon_1 = 0$, а $\varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_n$ будем считать малыми, но близкими по величине числами. Тогда гамильтониан (4.2) можно представить в виде

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

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

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

$$\int\limits_{\mathbb{R}^{2n}} H\rho_0 d^n p d^n q < \infty. \tag{4.3}$$

Положим

$$E_j(t) = \frac{1}{2}\int\limits_{\mathbb{R}^{2n}} (p_j^2 + q_j^2)\rho_t d^n p d^n q \quad (1 \leqslant j \leqslant n) \tag{4.4}$$

где ρ_t — решение уравнения Лиувилля с начальным условием ρ_0. Ввиду предположения (4.3) средние энергии E_j корректно определены при всех значениях времени.

Теорема 3. *Если среди чисел* $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ *нет равных и выполнено условие* (4.3), *то*

$$\lim_{t\to\infty} \frac{1}{t}\int\limits_0^t E_j(s)ds$$

существуют и равны между собой.

Доказательство этого утверждения в идейном плане повторяет доказательство теоремы 2 (которая в свою очередь является прямым следствием теоремы 3). Перейдем к новым каноническим координатам P, Q с помощью линейного канонического преобразования

$$P_j = \sum a_{jk}p_k, \qquad Q_j = \sum a_{jk}q_k; \qquad j = 1, \ldots, n.$$

В новых переменных гамильтониан (4.2) принимает вид

$$H = \frac{1}{2}\sum(P_j^2 + \omega_j^2 Q_j^2), \qquad \omega_j^2 = 1 + \varepsilon_j > 0. \tag{4.5}$$

Ввиду предположения, среди частот $\omega_1, \ldots, \omega_n$ нет равных.

Сделаем в (4.4) замену переменных $p, q \mapsto P, Q$ и воспользуемся формулой (3.4):

$$E_j(t) = \frac{1}{2}\int\limits_{\mathbb{R}^{2n}} \left[\left(\sum a_{kj}P_k\right)^2 + \left(\sum a_{kj}Q_k\right)^2\right]_t \rho_0(P, Q)d^n P d^n Q,$$

где в выражения внутри квадратичной скобки переменные P, Q надо заменить на решения гамильтоновой системы с гамильтонианом (4.5) с теми же начальными условиями. Учитывая, что частоты $\omega_1, \ldots, \omega_n$ все различны, получаем:

$$\lim_{t\to\infty} \frac{1}{t}\int\limits_0^t E_j(s)ds = \frac{1}{4}\left[\sum a_{kj}^2\overline{P_k^2} + \sum a_{kj}^2\overline{Q_k^2}\right].$$

Поскольку $a_{kj}^2 = \mathrm{const}$ (не зависят от k и j), то эти чезаровские средние от j не зависят.

Допускают ли линейные гамильтоновы системы с гамильтонианом (4.2) частные решения типа биений? Чтобы ответить на этот вопрос, рассмотрим решения с начальными условиями

$$q_j(0) = 0 \quad (j \geqslant 1); \quad \dot{q}_1(0) = v \neq 0, \quad \dot{q}_j(0) = 0 \quad (j \geqslant 2).$$

В новых переменных им отвечают начальные данные

$$Q_j(0) = 0, \qquad \dot{Q}_j(0) = \frac{v}{\sqrt{n}} \qquad (j \geqslant 1).$$

Следовательно,

$$Q_j(t) = \frac{v}{\sqrt{n}\omega_j} \sin \omega_j t \qquad (j \geqslant 1).$$

Наконец,

$$q_i(t) = \frac{v}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^{n} \frac{a_{ki}}{\omega_k} \sin \omega_k t,$$

$$\dot{q}_i(t) = \frac{v}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^{n} a_{ki} \cos \omega_k t, \tag{4.6}$$

причем $a_{ki} = \pm \frac{1}{\sqrt{n}}$.

Рассмотрим типичный случай, когда $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ выбраны таким образом, что частоты $\omega_1, \ldots, \omega_n$ рационально несоизмеримы. Тогда траектория движения

$$t \mapsto \varphi_k(t) = \omega_k t, \qquad 1 \leqslant k \leqslant n,$$

на n-мерном торе $\mathbb{T}^n = \{\varphi_1, \ldots, \varphi_n \mathrm{mod} 2\pi\}$ всюду плотна (даже равномерно распределена). Следовательно, она проходит сколь угодно близко к любой точке этого тора. В частности, при достаточно больших подходящих значениях t сколь угодно точно фазы φ_k будут таковы, что $\cos \varphi_k \approx \sqrt{n} a_{ki} (= \pm 1)$. В эти моменты времени, согласно (4.6), $\dot{q}_i \approx v$. Учитывая структуру ортогональных матриц (4.1), легко понять, что скорости остальных частиц очень малы: $\dot{q}_j \approx 0 (j \neq i)$. Если при этом числа $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ малы, то в течение достаточно длительного времени будет колебаться только i-й маятник, а остальные остаются практически неподвижными. Такое явление будет наблюдаться через определенные промежутки времени, когда слабо связанные маятники меняются ролями. В отличие от случая $n = 2$, при большем числе степеней свободы перекачка энергии происходит не периодически, а квазипериодически по времени.

5. Механизмы равнораспределенности средней энергии

В этом разделе мы рассмотрим некоторые геометрические и топологические идеи, которые позволят прояснить и обобщить аналитические вычисления из пп. 3–4.

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

Справедливо простое

Предложение 2 (*принцип симметрии*). *Пусть начальная плотность ρ_0 распределения вероятностей S-инвариантна. Тогда средние значения*

$$\int_\Gamma f \rho_t d\mu \qquad \text{и} \qquad \int_\Gamma f_S \rho_t d\mu \tag{5.1}$$

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

Доказательство.

В первом интеграле (5.1) сделаем замену переменных $z \mapsto Sz$. При этом f перейдет в f_S, а мера $d\mu$ и функция ρ_t останутся неизменными. Последнее вытекает из цепочки равенств

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

■

В качестве простого примера рассмотрим систему с гамильтонианом

$$H = \sum h(p_j, q_j) + \varepsilon \sum_{i<j} V(q_i - q_j). \tag{5.2}$$

Здесь h — функция двух переменных, а потенциал V — четная функция одного переменного. Гамильтониан (5.2) описывает динамику идентичных одномерных подсистем, которые слабо взаимодействуют друг с другом. Функция (5.2) инвариантна относительно преобразований $\mathbb{R}^{2n}$, порождаемых перестановками пар канонических переменных. Эти преобразования, очевидно, сохраняют меру Лиувилля и коммутируют с фазовым потоком гамильтоновой системы.

В теории цепочек Боголюбова обычно предполагается, что начальная плотность ρ_0 не меняется при всех перестановках координат и импульсов отдельных частиц. Иногда это представляют как следствие *принципа неразличимости* частиц в классической статистической механике. Однако формально — это дополнительное предположение. В этом случае, согласно предположению 2, средние значения полных энергий отдельных подсистем будут совпадать.

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

Теорема 4. *Пусть динамическая система* (2.1) *имеет* $k < n$ *независимых первых интегралов*

$$f_1, \ldots, f_k$$

таких, что

1. *Все они S-инвариантны.*
2. *Интегральные многообразия $M_c = \{z \in \Gamma\colon\ f_1(z) = c_1, \ldots, f_k(z) = c_k\}$ связны для почти всех $c = (c_1, \ldots, c_k) \in \mathbb{R}^k$.*
3. *При почти всех $c \in \mathbb{R}^k$ динамическая система* (2.1) *эргодична на M_c.*

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

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

$$\int\limits_\Gamma f\overline{\rho}d\mu = \int\limits_\Gamma f_S\overline{\rho}d\mu. \tag{5.3}$$

Здесь используется предположение об S-инвариантности меры Лиувилля, свойство S-инвариантности плотности $\overline{\rho}$ (теорема 4) и формула замены переменных в кратных интегралах.

Теорема 4 доказывается совсем просто. Так как первые интегралы f_j инвариантны относительно преобразования S, то тем же свойством обладают и поверхности M_c: если $z \in M_c$, то $Sz \in M_c$ и обратно. Далее, так как система (2.1) эргодична на почти всех M_c, то $\overline{\rho}$ принимает одно и то же значение почти всюду на каждой связной компоненте M_c. Согласно топологическому предположению 2), многообразия M_c связны. Следовательно, для почти всех $z \in \Gamma$ имеем $\overline{\rho}(Sz) = \overline{\rho}(z)$.

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

Если $k = 1$, то предположения теоремы 4 сводятся к двум условиям: связность энергетических $(2n-1)$-мерных уровней и эргодичность гамильтоновой системы на этих уровнях. Этот случай имеет существенное значение для статистической модели термостата (п. 6).

Покажем теперь, как из теоремы 4 можно вывести теорему 2 в типичном случае, когда частота $\omega = \sqrt{1+2\varepsilon}$ иррациональна. Линейная система с гамильтонианом (3.1) имеет два независимых первых интеграла

$$H \qquad \text{и} \qquad F = (p_1+p_2)^2 + (q_1+q_2)^2.$$

Эти функции не меняются при подстановке

$$p_1, q_1 \leftrightarrow p_2, q_2.$$

Далее, двумерные поверхности

$$\{H = c_1, F = c_2\} \tag{5.4}$$

всегда связны. Чтобы убедиться в этом, надо перейти к нормальным координатам P, Q, в которых поверхности (5.4) задаются уравнениями

$$P_1^2 + Q_1^2 = c_1, \qquad P_2^2 + \omega^2 Q_2^2 = c_2; \qquad c_1, c_2 = \text{const}.$$

Если c_1 и c_2 отличны от нуля, то эти уравнения, очевидно, высекают в $\mathbb{R}^4$ двумерный тор.

Поскольку ω иррационально, то рассматриваемая линейная гамильтонова система на торах (5.4) будет эргодической. Таким образом, все условия теоремы 4 выполнены, и поэтому средние

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

совпадают.

Аналогичное рассуждение позволяет вывести теорему 3 из теоремы 4 при дополнительном предположении о рациональной несоизмеримости частот $\omega_j = \sqrt{1+\varepsilon_j}$ $(j = 1, \ldots, n)$. Однако теорема 3 справедлива при более слабом предположении, что среди частот нет равных.

В заключение сделаем одно замечание. Не следует думать, что все интегралы гамильтоновой системы с S-симметричным гамильтонианом S-симметричны. Например, при $\varepsilon = 0$ система с гамильтонианом (3.1) допускает интеграл момента $p_1q_2 - p_2q_1$, который меняет знак при перестановке частиц.

6. Ансамбли Гиббса и статистические модели термостата

В заключительном разделе мы обсудим статистические модели термостата с точки зрения общей теории ансамблей Гиббса. Наши соображения носят предварительный характер и требуют более детального изучения.

Начнем с простых замечаний, раскрывающих общую идею модели термостата. Предположим, что гамильтониан имеет привычный «натуральный» вид $H = T + \varepsilon V$, где

$$T = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n} \frac{p_j^2}{2m_j}$$

— кинетическая энергия, $V(q)$ — потенциальная энергия, ε — малый параметр. Существенное предположение состоит в том, что эта гамильтонова система *эргодична* на энергетических поверхностях $\{H = \text{const}\}$. Тогда любая плотность распределения вероятностей ρ_t стремится по Чезаро к плотности $\overline{\rho}$, которая будет функцией от энергии.

Поэтому естественно предположить, что

$$\overline{\rho} = \frac{f(\beta H)}{\int\limits_{\Gamma} f(\beta H) d\mu}, \tag{6.1}$$

где f — измеримая функция, β — постоянный множитель, размерность которого обратна размерности энергии. Функция f может еще сама зависеть от параметра β.

Совсем легко показать, что средние значения отдельных частей кинетической энергии

$$E_j = \int\limits_{\Gamma} \frac{p_j^2}{2m_j} \overline{\rho} d^n p d^n q \qquad (1 \leqslant j \leqslant n) \tag{6.2}$$

совпадают, если плотность $\overline{\rho}$ задается формулой (6.1). Доказательство заключается в следующем: после подстановки $p_j \mapsto \sqrt{m_j}\widetilde{p}_j$ значения интеграла (6.2) уже не зависят от масс $m_1, \ldots, m_n$. Подчеркнем, что этот факт справедлив и при $\varepsilon \neq 0$.

Предположим теперь, что среднее значение потенциальной энергии εV стремится к нулю при $\varepsilon \to 0$. Это заведомо так, если конфигурационное пространство компактно, а функция V ограничена. Но тогда при малых ε среднее значение полной энергии

$$\int\limits_{\Gamma} H \rho_0 d\mu = \int\limits_{\Gamma} H \overline{\rho} d\mu$$

будет приближенно равно nE, где E — это интеграл (6.2), значение которого не зависит от j.

Вернемся теперь к статистической модели термостата. Пусть при указанных выше условиях «большую» систему с $n \gg 1$ степенями свободы (термостат) мы расширили присоединением к ней еще k одномерных подсистем так, что полученная система с $n + k$ степенями свободы снова будет эргодической на изоэнергетических многообразиях.

Итак, пусть

$$H_{n+k} = H_n + H_k + \varepsilon W_{n,k}$$

— гамильтониан расширенной системы; здесь $H_n(H_k)$ — гамильтониан системы с $n(k)$ степенями свободы вида (5.2), а $\varepsilon W_{n,k}$ — ограниченная измеримая функция — потенциальная энергия взаимодействия этих систем. Предположим, что в начальный момент времени системы с гамильтонианами H_n и H_k были статистически независимыми и находились в состоянии теплового равновесия. Это означает, что начальная плотность распределения вероятностей есть произведение

$$\rho^{(n+k)} = \rho^{(n)}\rho^{(k)},$$

где $\rho^{(n)}$ $\left(\rho^{(k)}\right)$ — суммируемая функция только H_n (соответственно H_k). Имеем

$$\begin{aligned} &\int H_{n+k}\rho^{(n+k)} d^{n+k}p d^{n+k}q = \\ &= \int H_n \rho^{(n)} d^n p d^n q + \int H_k \rho^{(k)} d^k p d^k q + O(\varepsilon) = \\ &= nE_n^- + kE_k^- + O(\varepsilon). \end{aligned} \tag{6.3}$$

Смысл обозначений в последней строке очевиден.

В состоянии статистического равновесия всей системы биркгофовское среднее $\overline{\rho}^{(n+k)}$ будет функцией от H_{n+k} (по нашему предположению), причем интеграл (6.3) равен

$$(n+k)E_{n+k}^+ + O(\varepsilon),$$

где E_{n+k}^+ — средняя кинетическая энергия, приходящаяся на одну степень свободы расширенной системы.

Поскольку полная энергия сохраняется, то при малых ε

$$nE_n^- + kE_k^- \approx (n+k)E_{n+k}^+. \tag{6.4}$$

Предположим теперь, что $nE_n^- \gg kE_k^-$: энергия термостата («теплоемкость») много больше энергии присоединяемой системы. Фиксируем k и устремляем n к ∞. Тогда из (6.4) получаем:

$$\frac{n}{n+k}E_n^- \to E_n^- \approx E_{n+k}^+.$$

Следовательно, в состоянии статистического равновесия средняя кинетическая энергия, приходящаяся на одну степень свободы присоединенной системы, станет равной средней кинетической энергии одномерных подсистем, составляющих термостат. Другими словами, температура присоединенной системы станет равной температуре термостата.

Нам осталось обсудить ключевой вопрос: при каких условиях можно утверждать, что стационарная плотность $\overline{\rho}$ распределения вероятностей есть функция только от энергии гамильтоновой системы вида (5.2)? Не следует думать, что здесь дело сводится только к условию эргодичности системы на многообразии $\{H = \mathrm{const}\}$. Этот вопрос глубже и интереснее: существенное значение имеет гладкость функции $\overline{\rho}$.

Дело в том, что $\overline{\rho}$ — первый интеграл гамильтоновой системы. С другой стороны, хорошо известно, что аналитические гамильтоновы системы в типичном случае не допускают первых интегралов, аналитических во всем фазовом пространстве и функционально независимых от интеграла энергии (см. [11]).

Однако трудность состоит в том, что даже для аналитической системы дифференциальных уравнений и для аналитической начальной плотности ρ_0 биркгофовское среднее $\overline{\rho}$ может быть разрывной функцией на всюду плотном множестве нулевой меры. Простым примером служит невырожденная вполне интегрируемая гамильтонова система с компактными энергетическими многообразиями: функция $\overline{\rho}$, как правило, разрывна в точках на резонансных инвариантных торах (как классическая функция Римана, непрерывная в иррациональных точках и разрывная в рациональных). Однако поведение функции $\overline{\rho}$ на множестве нулевой меры не играет никакого значения. В этом примере, очевидно, значения функции $\overline{\rho}$ можно так изменить в точках резонансных торов, что она станет аналитической на всем фазовом пространстве.

Итак, предположим, что гамильтониан вида (5.2) есть аналитическая функция. Пусть плотность $\overline{\rho}$ аналитически зависит от $2n$ переменных p, q и параметра ε. Вспомним, что плотность канонического распределения Гиббса обладает этим свойством. Тогда в типичной ситуации $\overline{\rho}$ оказывается функцией от полной энергии. Точные условия указаны в [11], а доказательство использует механизм разрушения резонансных инвариантных торов невозмущенной системы, открытый Пуанкаре. Следовательно, в этом случае применим изложенный выше анализ модели термостата.

Конечно, плотность $\overline{\rho}$ может оказаться лишь непрерывной или вообще существенно разрывной (но суммируемой) функцией. Можно ли что-то содержательное сказать в этой ситуации? К сожалению, эта задача на сегодняшний день недостаточно изучена и приходится ограничиться только некоторыми гипотезами.

Во-первых, кажется правдоподобным, что при больших n и малых ε возмущенная гамильтонова система с функцией Гамильтона (5.2) должна быть *транзитивной* при фиксированном значении полной энергии: существует хотя бы одна всюду плотная траектория. Это — одна из точных формулировок гипотезы о диффузии Арнольда в многомерных системах. Если это так, то *непрерывная* плотность $\overline{\rho}$ также будет функцией от полной энергии системы.

Наконец, есть правдоподобное предположение, что при малых фиксированных ε и достаточно больших n типичная гамильтонова система вида (5.2) будет эргодической на энергетических многообразиях. К сожалению, в этом направлении пока получено мало надежной информации.

В заключение напомним, что, согласно Н. Н. Боголюбову [10], нас на самом деле интересуют не фиксированные (пусть и большие) значения n, а поведение системы на макроуровне в термодинамическом пределе, когда число степеней свободы n и «объем», в котором заключена система, согласованным образом устремляются к бесконечности.

7. Добавление. Статистический вариант теоремы Клаузиуса

Рассмотрим гамильтонову систему с кинетической энергией

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

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

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

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

$$\overline{T} = \frac{mh}{m+2}, \quad \overline{V} = \frac{2h}{m+2}. \tag{7.1}$$

В этом заключается классическая *теорема Клаузиуса*, установленная еще в 1870 г. Случай $m = -2$ является исключением: траектории могут быть ограниченными лишь при $h = 0$. Теорема Клаузиуса — простое следствие тождества Лагранжа

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

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

Укажем статистический вариант этой теоремы в рамках теории ансамблей Гиббса. Пусть ρ_0 — начальная плотность распределения вероятностей, причем

$$E = \int\limits_{\Gamma} (T + V)\rho_0\, d\mu < \infty. \tag{7.2}$$

Следовательно, средняя полная энергия (*внутренняя* энергия системы) ограничена при всех значениях времени. Положим

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

Теорема 5. *Если энергетические многообразия компактны и выполнено условие* (7.2)*, то*

$$\lim_{t\to\pm\infty} K_t = \frac{mE}{m+2} \quad \text{и} \quad \lim_{t\to\pm\infty} V_t = \frac{2E}{m+2}. \tag{7.3}$$

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

Доказательство.

Так как система с гамильтонианом $H = T + V$ квазиоднородна, то существование конечных пределов (7.3) вытекает из результатов работы [7] с учетом условия (7.2). Согласно формуле (4.4),

$$K_t = \int\limits_{\Gamma} T\rho_0\left(g^{-t}(z)\right)\, d\mu = \int\limits_{\Gamma} T\left(g^{t}(z)\right)\rho_0\, d\mu.$$

Поскольку метод Чезаро регулярен, то

$$\lim_{t\to\infty} K_t = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t}\int\limits_0^t K_s\, ds = \int\limits_{\Gamma} \overline{T}\rho_0\, d\mu.$$

Согласно (7.1), интеграл справа равен

$$\frac{m}{m+2}\int\limits_{\Gamma} H\rho\, d\mu = \frac{mE}{m+2}.$$

Вторая формула (7.3) доказывается аналогично.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 05–01–01058).

Список литературы

[1] Ферми, Э., Паста, Дж., Улам, С., Исследование нелинейных задач, в кн.: Ферми, Э., *Научные труды*, Т. II, М.: Наука, 1972, сс. 647–656

[2] Боголюбов, Н.Н., *О некоторых статистических методах в математической физике*, Киев: Изд-во АН УССР, 1945.

[3] Szász, D., Ed., *Hard Ball Systems and the Lorentz Gas*, Encycl. of Math. Sciencies, vol. 101, Berlin: Springer–Verlag, 2000.

[4] Козлов, В.В., Тепловое равновесие по Гиббсу и Пуанкаре, *Докл. акад. наук.*, 2002, т. 382, № 5, сс. 602–605.

[5] Козлов, В.В., Трещев, Д.В., Эволюция мер в фазовом пространстве нелинейных гамильтоновых систем, *Теорет. и матем. физика*, 2003, т. 136, № 3, сс. 496–506.

[6] Kozlov, V.V., Kinetics of Collisionless Continuous Medium, *Reg. and Chaotic Dynamics*, 2001, vol. 6, № 3, pp. 235–251.

[7] Козлов, В.В., Трещев, Д.В., Слабая сходимость решений уравнения Лиувилля для нелинейных гамильтоновых систем, *Теорет. и матем. физика*, 2003, т. 134, № 3, сс. 388–400.

[8] Kozlov, V.V., Treschev D.V., On new forms of the ergodic theorem, *J. Dynamic. Control Syst.*, 2003, vol. 9, № 3, pp. 449–453.

[9] Kozlov, V.V., Billiards, invariant measures, and equilibrium thermodynamics. II, *Reg. and Chaotic Dynamics*, 2004, vol. 9, № 2, pp. 91–100.

[10] Боголюбов, Н.Н., О некоторых проблемах, связанных с обоснованием статистической механики, в кн.: Боголюбов, Н.Н., *Собрание научных трудов*, т. VI, М.: Наука, 2006, сс. 432–440.

[11] Козлов, В.В., *Симметрии, топология и резонансы в гамильтоновой механике*, Ижевск: Изд. дом «Удмуртский университет», 1995.