Нелинейная динамика. 2011. Т. 7. № 1. С. 101–117.
Полнотекстовая версия в свободном доступе
http://nd.ics.org.ru

УДК: 531
MSC 2010: 37A60

Статистическая необратимость в обратимой круговой модели Каца

В. В. Козлов

Круговая модель Каца — дискретная динамическая система со свойствами обратимости и возвращаемости. В рамках этой модели М. Кацем указаны условия необратимого поведения на «коротких» промежутках времени и продемонстрированы основные идеи и подходы Больцмана (с их возможностями и ограничениями). Мы исследуем круговую модель в рамках теории ансамблей Гиббса и демонстрируем новый подход к строгому обоснованию «нулевого начала термодинамики» с точки зрения слабой сходимости вероятностных распределений.

Ключевые слова: обратимость, статистическое равновесие, слабая сходимость

Введение

Одна из ключевых проблем статистической механики — обоснование «нулевого начала термодинамики»: установить, что при неограниченном возрастании времени изолированная система необратимо стремится к состоянию теплового равновесия. При этом, конечно, надо уточнить само понятие теплового равновесия и дать строгое определение сходимости к этому состоянию.

Считается, что сходимость к равновесному состоянию имеет место при $t \to +\infty$; точнее, «стрела времени» определяется как раз направлением эволюции системы. Однако такая точка зрения противоречит исходному свойству обратимости уравнений движения механических систем. Поэтому классическая теория Больцмана и более поздние ее варианты не представляются убедительными. В основе этих подходов лежит явное или скрытое предположение о *марковости* процесса эволюции.

Собственно, марковские цепи использовались Т. и П. Эренфестами в их известных вероятностных моделях обоснования необратимости (см. [1, 2]). Стоит, наверное, упомянуть про более ранние работы самого А. Маркова, про урновые модели, которые, правда, не связывались с задачами статистической механики (см., например, [3]).

Получено 29 октября 2010 года
После доработки 4 декабря 2010 года

Козлов Валерий Васильевич
kozlov@pran.ru
Математический институт им. В. А. Стеклова РАН
119991, Россия, г. Москва, ул. Губкина, д. 8

Более продвинутым вариантом является круговая модель М. Каца, которая обладает свойствами обратимости и возвращаемости. Эти свойства дают, в частности, возможность исследовать с принципиальной точки зрения классические парадоксы Лошмидта и Цермело (см. [4, 5]). С другой стороны, круговая модель Каца позволяет продемонстрировать новые подходы к обоснованию необратимости, изложенные в книгах [6, 7] в развитие забытых идей А. Пуанкаре [8] и, в частности, прояснить вопрос о возрастании энтропии изолированной системы.

§ 1. Модель Каца

Рассмотрим окружность и вписанный в нее правильный n-угольник. Выделим множество S, состоящее из m $(m < n)$ фиксированных вершин. В каждой из n вершин имеется шарик или белого, или черного цвета. Динамика такой дискретной системы определяется следующим образом. За единицу времени окружность поворачивается на угол $2\pi/n$ против часовой стрелки и каждый шарик перемещается на соседнюю позицию с одним условием: шарик, вышедший из множества S, меняет свой цвет, а если же вершина не принадлежит S, то выходящий из нее шарик свой цвет не меняет. Это — круговая модель Каца.

Мы представим эту модель в терминах, более привычных с точки зрения статистической механики. Занумеруем вершины n-угольника целыми числами $p \bmod n$ и поставим каждой из них в соответствие число

$$x_p = \begin{cases} +1, & \text{если в точке } p \text{ шарик черный,} \\ -1, & \text{если в точке } p \text{ шарик белый.} \end{cases}$$

Наборы чисел $x = (x_1, \ldots, x_n)$ — это *состояния* системы. Далее их удобно представлять как векторы-столбцы. Легко сообразить, что число различных состояний равно $N = 2^n$. Множество всех состояний — это *фазовое пространство* системы; обозначим его Γ.

На Γ имеется много различных аддитивных мер. Выделим одну из них, считая меру каждого состояния равной 1. Обозначим эту меру μ и назовем ее *мерой Лиувилля*. Ясно, что $\mu(\Gamma) = N$.

Определим теперь *фазовый поток* системы Каца. Это — набор целочисленных степеней $\{T^t\}_{t=-\infty}^{+\infty}$, где преобразование $T\colon \Gamma \to \Gamma$ соответствует повороту окружности на угол $2\pi/n$. Преобразование

$$x \mapsto Tx \tag{1.1}$$

является линейным и задается матрицей

$$T = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & \varepsilon_n \\ \varepsilon_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \varepsilon_{n-1} & 0 \end{bmatrix}, \tag{1.2}$$

где

$$\varepsilon_p = \begin{cases} -1, \text{ если } p \in S, \\ +1, \text{ если } p \notin S. \end{cases}$$

Преобразование (1.1), очевидно, сохраняет меру Лиувилля. Это простое наблюдение является дискретным вариантом *теоремы Лиувилля* из статистической механики о сохранении фазового объема. Таким образом, мы имеем дискретную динамическую систему

$$(\Gamma,\, T,\, \mu) \tag{1.3}$$

с инвариантной мерой.

Преобразование (1.1), очевидно, периодическое с периодом $2n$:

$$T^{2n} = I,$$

где I — тождественная подстановка. Отсюда вытекает простое, но важное

Предложение 1. *При $n > 2$ динамическая система* (1.3) *не является эргодической.*

Более того, она даже не будет транзитивной: ни при каком $x \in \Gamma$ орбита

$$\{T^k x\}_{k=-\infty}^{+\infty}$$

не совпадает со всем Γ. Действительно, каждая орбита содержит не более $2n$ различных точек, а Γ состоит из 2^n элементов. Остается заметить, что $2^n > 2n$ при $n > 2$.

Обычные для статистической механики системы взаимодействующих частиц с потенциалом типа Леннарда-Джонса, по-видимому, также не эргодичны на поверхностях уровня интеграла энергии.

Все инвариантные меры на Γ строятся следующим образом. На каждой эргодической компоненте (орбите преобразования T) задается мера — такая, что мера каждой точки орбиты одна и та же.

Свойство периодичности отображения T можно уточнить. Имеет место алгебраическая

Лемма. $T^n = \varepsilon_1 \ldots \varepsilon_n I$.

Это свойство М. Кац не отмечал и не использовал. Доказательство сразу следует из вида последовательных степеней матрицы (1.2):

$$T^2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & \varepsilon_n\varepsilon_{n-1} & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \varepsilon_1\varepsilon_n \\ \varepsilon_2\varepsilon_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_3\varepsilon_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{bmatrix},$$

$$T^3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & \varepsilon_n\varepsilon_{n-1}\varepsilon_{n-2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \varepsilon_1\varepsilon_n\varepsilon_{n-1} & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \varepsilon_2\varepsilon_1\varepsilon_n \\ \varepsilon_3\varepsilon_2\varepsilon_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_4\varepsilon_3\varepsilon_2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{bmatrix}, \quad \ldots \tag{1.4}$$

Из леммы вытекает ряд важных следствий.

Следствие 1. *Если m четно, то $T^n = I$.*

Следствие 2. *Если m нечетно, то $T^n = -I$.*

Последнее означает, что при нечетном числе элементов выделенного множества S после n последовательных поворотов все шарики меняют свой цвет. Отсюда в свою очередь вытекает следующее утверждение, которым мы воспользуемся в § 3.

Предложение 2. *При нечетном m для каждой орбиты преобразования T количества черных и белых шариков совпадают.*

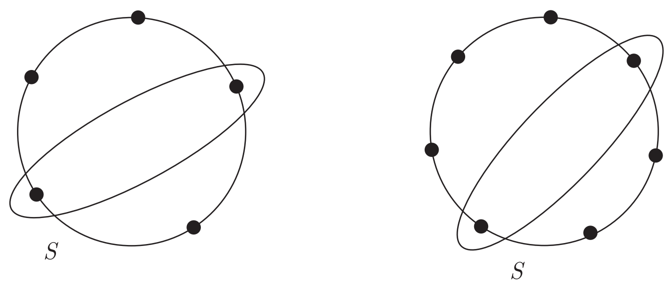
Действительно, при $n \leqslant t < 2n$ система эволюционирует точно так же, как и при $0 \leqslant \leqslant t < n$, но только все шарики меняют свой цвет на противоположный.

При четном m это свойство не выполняется, в чем можно убедиться, рассматривая конкретные примеры. Более того, справедливо

Предложение 3. *При четном m и нечетном n для каждой орбиты преобразования T общее число черных и белых шариков никогда не совпадает.*

Действительно, согласно следствию 1, при четном m каждая орбита периодична с периодом n. Всего на этой орбите n^2 шариков. При нечетном n это число нечетно.

В ряде случаев общие количества белых и черных шариков отличаются лишь на единицу. На рисунке указаны два примера для $n = 5$ и $n = 7$ и показано расположение множества S $(m = 2)$.



Система Каца обратима в том смысле, что существует обратное преобразование T^{-1} с матрицей

$$\begin{bmatrix} 0 & \varepsilon_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varepsilon_{n-1} \\ \varepsilon_n & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}.$$

Как видно из (1.4), такой диагональный вид имеет матрица T^{n-1}.

§ 2. Усреднение по пространству

Следуя М. Кацу, рассмотрим задачу о распределении числа черных и белых шаров в процессе эволюции системы. Зафиксируем начальное распределение $x(0)$; Кац рассматривал случай, когда в начальный момент времени $t = 0$ все шары черные:

$$x(0) = (1,\, 1,\, \ldots,\, 1).$$

Пусть $N_c(t)$, $(N_b(t))$ — число черных (белых) шариков в текущий момент времени t. Нас будет интересовать относительная разность

$$\lambda(t) = \frac{N_c(t) - N_b(t)}{n}. \tag{2.1}$$

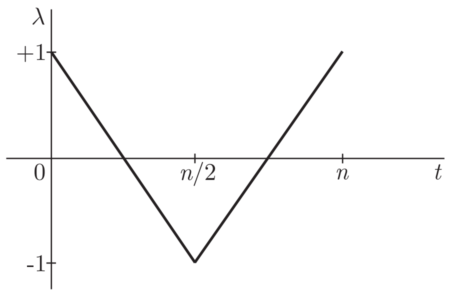
Эта функция времени существенно зависит от расположения множества S. Продемонстрируем это при $m = 2$ и четном n в двух случаях: когда S состоит из двух соседних точек и когда S составляют две диаметрально противоположные точки.

В первом из них, очевидно, имеем $N_c(0) = n$, $N_c(t) = n - 2$ при $1 \leqslant t \leqslant n - 1$. Следовательно, в этом интервале времени

$$\lambda(t) = \frac{n-4}{n} \approx 1,$$

если n велико.

Во втором случае имеем $N_c(t) = n - 2t$ в интервале $0 \leqslant t \leqslant n/2$. При $t = n/2$ все шарики становятся белыми. Затем количество черных шариков начинает линейно нарастать: $N_c(t) = 2(t - n/2)$ при $n/2 \leqslant t \leqslant n$. Ниже приведен график функции λ.



Чтобы избежать такой сильной зависимости от расположения точек множества S, М. Кац предложил усреднить относительную разность (2.1) по всем возможным положениям этого множества, считая их равноправными. Это усреднение следует рассматривать как вариант «усреднения по пространству»; обозначим результат усреднения угловыми скобками.

В результате Кац пришел к формуле

$$\langle \lambda(t) \rangle = \frac{\oint \frac{1}{z} \left(\frac{1-z^2}{1+z^2} \right)^t \frac{(1+z^2)^n}{z^{2m}}\, dz}{\oint \frac{1}{z} \frac{(1+z^2)^n}{z^{2m}}\, dz}. \tag{2.2}$$

Здесь интегрирование проводится по малой окружности в комплексной плоскости, охватывающей точку $z = 0$. В знаменателе на самом деле стоит биномиальный коэффициент $\binom{n}{m}$.

Формула (2.2) получена в предположении, что в начальный момент времени все шары черные. Кроме того, при выводе (2.2) предполагалось, что $t \leqslant n$. Все детали вывода содержатся в [5].

Кстати сказать, при $t = n$ среднее (2.2) равно $+1$ или -1 в зависимости от того, является ли m четным или нечетным. Это замечание вполне согласуется с выводами следствий 1 и 2 из алгебраической леммы.

Далее М. Кац фиксирует время t, а m и n согласованным образом устремляет к бесконечности так, что $m/n \to \mu$ при $n \to \infty$. Сверх того предполагается, что

$$0 < 2\mu < 1. \tag{2.3}$$

В этих предположениях методом перевала из (2.2) выводится асимптотическая формула

$$\langle \lambda(t) \rangle \sim (1 - 2\mu)^t. \tag{2.4}$$

В предположении (2.3) при возрастании t это среднее экспоненциально быстро стремится к нулю. Конечно, здесь надо не забывать, что t должно оставаться много меньшим n. Этот результат означает выравнивание долей черных и белых шариков после усреднения по всем возможным положениям множества S. М. Кац интерпретирует этот факт как аналог так называемой H-теоремы Больцмана. Более обще, это является обоснованием необратимого стремления системы к равновесному состоянию в ограниченном конечном диапазоне времени (после подходящего дополнительного усреднения по пространству).

А как обстоит дело с поведением величины (2.2) на бóльших временах, сопоставимых с n? Мы дополним результат М. Каца одной новой формулой, показывающей, что и здесь происходит выравнивание в среднем числа белых и черных шариков, но с другой скоростью.

Пусть n четно. Положим $t = n/2 = k$. Тогда интеграл в числителе (2.2) равен

$$\oint \frac{1}{z} \frac{(1 - z^4)^k}{z^{2m}}\, dz. \tag{2.5}$$

Если m нечетно, то этот интеграл, очевидно, равен нулю. Тогда в этот момент времени в среднем число белых и черных шариков сравняется.

Пусть $m = 2l$, l — целое. Предположим, как и выше, что

$$\frac{m}{n} = \frac{l}{k} \to \mu$$

при $n \to \infty$. Легко сообразить, что интеграл (2.5) равен биномиальному коэффициенту

$$(-1)^k \binom{k}{l}.$$

Следовательно, в рассматриваемом случае среднее (2.2) равно

$$(-1)^k \binom{k}{l} \Big/ \binom{2k}{2l}.$$

Используя формулу Стирлинга, нетрудно получить асимптотику этого выражения при $k \to \infty$ $(n \to \infty)$:

$$(-1)^t \sqrt{2} [\mu^\mu (1 - \mu)^{1-\mu}]^t. \tag{2.6}$$

Поскольку $0 < \mu < 1$, то выражение в квадратных скобках меньше единицы. Следовательно, при $t \to \infty$ относительная разность числа черных и белых шаров осциллирует и так же экспоненциально быстро стремится к нулю.

Отметим, что при $\mu = 1/2$ асимптотическая формула Каца (2.4) вырождается, а в формуле (2.6) выражение в квадратных скобках, наоборот, становится максимальным.

В [4, 5] рассматривается также упрощенная круговая модель, когда в формуле (1.2) ε_j считаются случайными величинами, принимающими значения ± 1. Это — простой пример цепи Маркова. Для уточнения этой модели следует задать переходные вероятности. В результате так же с подавляющей вероятностью верна асимптотическая формула (2.4) (детали см. в [4, 5]). На самом деле именно эта упрощенная вероятностная модель может служить аналогом теории Больцмана. Однако здесь надо иметь в виду следующее принципиальное обстоятельство. Упрощенная вероятностная модель, в отличие от исходной детерминистской модели, необратима в принципе: состояние системы в предшествующие моменты времени можно указать лишь с определенной вероятностью. Поэтому как только мы вносим вероятность в определение динамики системы, так мы тем самым с самого начала навязываем направление эволюции, делая систему необратимой. Кстати сказать, вводя усреднение по всем возможным положениям множества S, мы тоже теряем информацию о предыдущих состояниях системы. Таким образом, введение такого усреднения также делает нашу систему необратимой.

§ 3. Теория Гиббса и усреднение по времени

Кроме подхода Больцмана к обоснованию термодинамики (основа которого — необратимое по времени классическое кинетическое уравнение Больцмана, противоречащее обратимости исходных уравнений динамики), имеется еще общий подход Гиббса, связанный с введением на фазовом пространстве динамической системы вероятностной меры, переносимой потоком (см. [6, 9]). Идея введения на фазовом пространстве Γ двух согласованных математических структур (фазовый поток и вероятностная мера), безусловно, очень красивая и полезная. Однако некоторые авторы считают ее слишком общей и настаивают на том, что вероятность в статистической механике должна проявляться многими разными способами (см. обсуждение в [4]). Наша цель — показать на примере круговой модели Каца, что в рамках теории Гиббса можно также решить проблему необратимого стремления обратимой системы к состоянию статистического равновесия.

Согласно Гиббсу, в начальный момент времени $t = 0$ на фазовом пространстве Γ задается *вероятностная мера* ν, характеризующая неточность задания (или знания) начального состояния. В нашем случае она задается последовательностью неотрицательных чисел

$$\rho(x), \quad x \in \Gamma, \tag{3.1}$$

в сумме дающих единицу:

$$\sum \rho(x) = 1. \tag{3.2}$$

Последнее означает, что пребывание системы в каком-то состоянии есть достоверное событие. Функцию $\rho\colon \Gamma \to \mathbb{R}_+$ можно считать *плотностью* меры ν относительно меры Лиувилля: $\nu = \rho\mu$.

Затем эта мера, переносимая потоком $\{T^t\}$, начинает эволюционировать со временем. Обозначим ее ν_t в момент времени t, и пусть $\rho_t(x)$ — ее «плотность» в смысле (3.1) и (3.2).

Согласно *уравнению Лиувилля*,

$$\rho_t(x) = \rho(T^{-t}x). \tag{3.3}$$

Точнее, это решение классического уравнения Лиувилля, которое составляет основу теории Гиббса. При $t = 0$ получаем исходную меру (3.1).

Выведем формулу (3.3). Пусть $\rho_t(x)$ — вероятность нахождения системы в состоянии x в момент времени t. Ясно, что

$$\rho_0(x) = \rho(x)$$

и

$$\rho_{t-1}(x) = \rho_t(Tx)$$

для всех $x \in \Gamma$. Последняя формула есть условие переноса меры фазовым потоком. Отсюда получаем последовательно

$$\rho_t(x) = \rho_{t-1}(T^{-1}x) = \rho_{t-2}(T^{-2}x) = \ldots = \rho_0(T^{-t}x).$$

Что и требовалось.

Гиббс надеялся показать, что в каком-то смысле мера ν_t *сходится* к стационарному распределению $\overline{\nu}$, инвариантному относительно фазового потока $\{T^t\}$. Хотелось бы еще, чтобы предельное распределение $\overline{\nu}$ было «микроканоническим». В нашем случае это означало бы равенство $\overline{\rho} = \mathrm{const} = 2^{-n}$ или, что то же самое, совпадение с мерой Лиувилля μ (с точностью до множителя 2^{-n}). Тогда в пределе все состояния были бы равноправными, а распределения черных (и белых) шариков биномиальными:

$$2^{-n}\binom{n}{k}, \quad 0 \leqslant k \leqslant n.$$

Однако этим надеждам не суждено сбыться (с аргументами Гиббса в непрерывном случае можно познакомиться по [9], гл. 12). Равенство $\overline{\nu} = 2^{-n}\mu$ означало бы эргодичность системы Каца, а это не так согласно предложению 1. С другой стороны, последовательность $\rho_t(x)$ $(t = 0, 1, 2, \ldots)$ периодическая (с периодом $2n$) и в общем случае непостоянная. Следовательно, она не может иметь обычного предела при $t \to \infty$.

Однако эти трудности можно преодолеть, если несколько по-другому приняться за дело. Во-первых, нам надо дать точное определение «стремления» системы к статистическому равновесию. Идея состоит в том, чтобы заменить обычную сходимость более сильным методом суммирования $\mathfrak{M}$. От этого метода потребуем, чтобы он был *линейным, регулярным и естественным.* Это означает следующее. Некоторым последовательностям

$$a_0, a_1, a_2, \ldots \tag{3.4}$$

мы ставим в соответствие числа a и называем их пределами этих последовательностей (записываем так:

$$a_n \to a\ (\mathfrak{M}) \quad \text{или} \quad \lim a_n = a\ (\mathfrak{M})),$$

причем выполняются следующие условия:

a) если $a_n \to a\ (\mathfrak{M})$ и $b_n \to b\ (\mathfrak{M})$, то

$$\alpha a_n + \beta b_n \to \alpha a + \beta b\ (\mathfrak{M})$$

для любых вещественных α и β;

b) если $a_n \to a$ в обычном смысле, то $a_n \to a$ $(\mathfrak{M})$;

c) если $a_n \to a$ $(\mathfrak{M})$, то последовательность $a_1 - a_0, a_2 - a_0, \ldots$ сходится к $a - a_0$ (в смысле определения $\mathfrak{M}$).

Наверное, самым простым (кроме обычной сходимости) примером линейного и регулярного метода суммирования является метод Чезаро (C): $a_n \to a$ (C), если

$$\frac{a_0 + a_1 + \ldots + a_n}{n+1} \to a$$

при $n \to \infty$.

Предложение 4. *Пусть последовательность* (3.4) *периодическая с периодом* p *и* $\mathfrak{M}$ — *линейный, регулярный и естественный метод суммирования. Если* $a_n \to a$ $(\mathfrak{M})$*, то*

$$a = \frac{a_0 + \ldots + a_{p-1}}{p}. \tag{3.5}$$

Это утверждение фактически принадлежит Д. Бернулли, который, правда, оперировал с периодическими расходящимися рядами, а не с последовательностями [10]. Конечно, любая периодическая последовательность сходится по Чезаро к (3.5).

Вернемся к модели Каца. В нашем случае

$$\rho_t(x) \to \overline{\rho}(x)\ (C) \tag{3.6}$$

при $t \to \infty$, причем предельная функция $\overline{\rho}$ получается усреднением по орбите каждой точки $x \in \Gamma$ отображения T. Эта функция, очевидно, обладает следующими свойствами:

1) $\overline{\rho}$ инварианта относительно действия фазового потока $\{T^t\}$,

2) $\overline{\rho} \geqslant 0$,

3) $\sum\limits_{x \in \Gamma} \overline{\rho}(x) = 1$.

Следовательно, предельная функция $\overline{\rho}$ есть стационарная плотность некоторого вероятностного распределения на Γ. Состояние системы с вероятностной мерой

$$\overline{\nu} = \overline{\rho}\mu$$

будет состоянием *статистического равновесия*, а сама система необратимо стремится к этому состоянию в смысле сходимости по Чезаро (3.6). Важно подчеркнуть, что предельное соотношение (3.6) имеет место как при $t \to +\infty$, так и при $t \to -\infty$. Тем самым состояние статистического равновесия в отдаленном прошлом и будущем совпадают. Этот факт вполне соответствует обратимой природе исходной системы Каца.

Сходимость (3.6) со свойствами 1)–3) есть, конечно, весьма частный случай эргодической теоремы Биркгофа–Хинчина для динамической системы (Γ, T, μ). Стоит напомнить, что эргодическая теория возникла, собственно, из попыток обоснования статистической механики.

Определение статистического равновесия (3.6) может показаться чересчур формальным. Однако к нему можно подойти и с более содержательной стороны.

Нас на самом деле интересует не эволюция вероятностного распределения самого по себе, а изменение со временем средних значений динамических величин — функций на фазовом пространстве. Пусть $\varphi\colon \Gamma \to \mathbb{R}$ — дискретная динамическая величина. Ее среднее значение в момент времени t относительно вероятностной меры ν_t равно

$$\int\limits_{\Gamma} \varphi\, d\nu_t = \int\limits_{\Gamma} \rho_t \varphi\, d\mu = \sum_{x\in\Gamma} \rho(T^{-t}x)\varphi(x). \tag{3.7}$$

Будем говорить, что мера ν_t *слабо сходится* к мере $\overline{\nu} = \overline{\rho}\mu$ при $t \to \infty$, если для любой «пробной» функции $\varphi\colon \Gamma \to \mathbb{R}$

$$\int\limits_{\Gamma} \rho_t \varphi\, d\mu \to \int\limits_{\Gamma} \overline{\rho}\varphi\, d\mu.$$

Функция времени слева будет снова периодической по t и поэтому обычной сходимости здесь на самом деле нет. Дело можно поправить, вводя дополнительное *усреднение по времени*, заменяя тем самым обычную сходимость сходимостью по Чезаро:

$$\lim_{\tau\to\infty} \frac{1}{\tau} \sum_{t=0}^{\tau-1} \int\limits_{\Gamma} \rho_t \varphi\, d\mu = \int\limits_{\Gamma} \overline{\rho}\varphi\, d\mu. \tag{3.8}$$

Несложно показать, что слабая сходимость по Чезаро в модели Каца всегда имеет место, причем предельная функция $\overline{\rho}$ снова определяется предельным переходом (3.6). Соотношение (3.8) — это дискретный вариант эргодической теоремы фон Неймана, которая исторически предшествовала теореме Биркгофа–Хинчина. В нашем случае соотношения (3.6) и (3.8), конечно, эквивалентны.

Правда, при таком подходе нет возможности говорить о скорости сходимости вероятностного распределения к состоянию статистического равновесия. Но зато можно говорить о скорости сходимости по Чезаро средних значений различных динамических величин.

Положим теперь

$$\varphi = \frac{x_1 + \ldots + x_n}{n}. \tag{3.9}$$

Тогда интеграл (3.7) есть математическое ожидание относительной разности числа черных и белых шаров (2.1) в момент времени t.

Теорема 1. *Если m нечетно, то независимо от начального распределения среднее значение величины* (3.9) *в состоянии статистического равновесия равно нулю.*

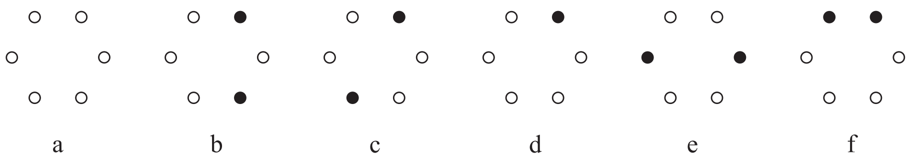
Таким образом, в среднем количества черных и белых шариков необратимым образом выравниваются. При четном значении m теорема 1, вообще говоря, неверна, как показывает пример с $m = 2$ из § 3.

Теорема доказывается просто. На каждой орбите фазового потока $\{T^t\}$ функция $\overline{\rho}$ принимает постоянные значения. Далее, при нечетном m точки орбиты разбиваются на пары x' и x'', такие, что

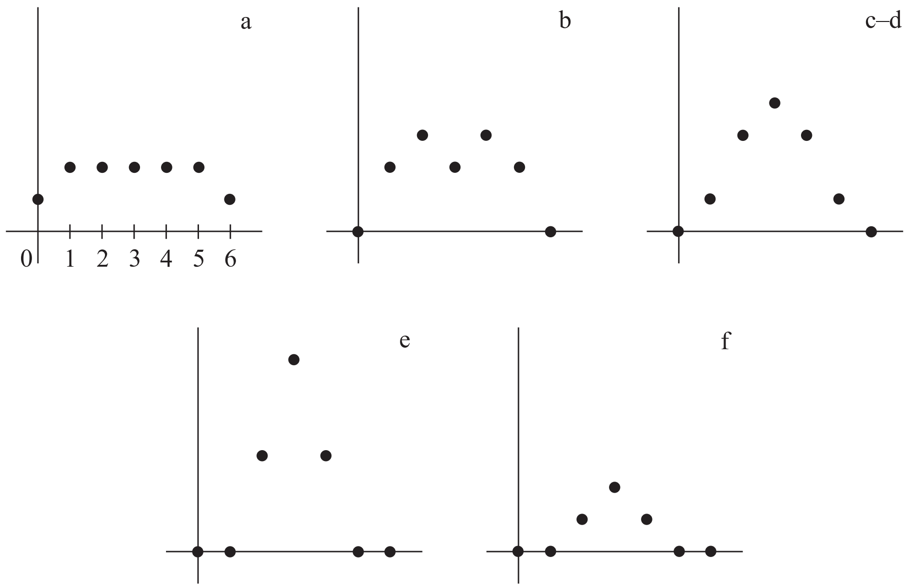
$$\varphi(x') + \varphi(x'') = 0$$

(предложение 2). Но тогда интеграл справа в (3.8) вдоль этой орбиты равен нулю. Суммируя по всем орбитам, получаем требуемое.

Продемонстрируем сказанное на простом примере, когда $n = 6$, а множество S состоит всего из одной вершины ($m = 1$). В этом случае фазовое пространство Γ (из $2^6 = 64$ элементов) разбивается на шесть непересекающихся орбит фазового потока $\{T^t\}$; обозначим их a, b, c, d, e, f. Число точек Γ в орбитах a–e равно 12, а орбита f состоит из четырех точек ($5\cdot 12 + 4 = 64$). Напомним, что $12 = 6\cdot 2$ — это период отображения T. Представители орбит указаны на этом рисунке.



Отображение $T\colon \Gamma \to \Gamma$ не эргодическое и поэтому изучение динамики сводится к изучению отдельных замкнутых орбит. Предельные распределения числа белых шариков на каждой из орбит указаны на следующем рисунке.



Все они отличаются от биномиального. Предельное распределение белых шариков в целом получается «смешением» этих частных распределений. Легко видеть, что независимо от начального распределения математическое ожидание числа белых (и черных) шариков в состоянии статистического равновесия равно $3 = 6/2$.

§ 4. Возрастание энтропии

Сначала сделаем несколько замечаний общего характера. Пусть $f\colon \Gamma \to \mathbb{R}$ — функция на фазовом пространстве.

Предложение 5. *Интеграл*

$$\int\limits_{\Gamma} f(T^t x)\, d\mu = \sum_{x\in\Gamma} f(T^t x) \tag{4.1}$$

не меняется со временем.

Это утверждение почти очевидно. Оно имеет место и для гладких динамических систем при дополнительном предположении о суммируемости функций f. В самом общем случае предложение 5 вытекает из двух свойств преобразования T: оно обратимо и сохраняет меру Лиувилля μ. В (4.1), конечно, можно заменить t на $-t$.

Обычно предложение 5 формулируется в ином виде: если f — функция от плотности ρ, то интеграл (4.1) — константа как функция времени (см. [8, 9]). В частности, энтропия

$$s(t) = -\int\limits_{\Gamma} \rho(T^t x) \ln \rho(T^t x)\, d\mu \tag{4.2}$$

не меняется со временем. Интеграл (4.2) называют иногда информационной энтропией или же еще энтропией Гиббса. Как показал Гиббс, для так называемого *канонического распределения* интеграл (4.2) совпадает с энтропией из термодинамики.

Постоянство энтропии (4.2), на первый взгляд, несовместимо с законом ее возрастания в изолированной системе. По этой причине ряд авторов (например, И. Пригожин [11]) считают вообще некорректным отождествление интеграла (4.2) с энтропией. Однако все эти вопросы естественным путем решаются в теории слабых пределов вероятностных распределений.

Пусть f — функция от плотности $f = F(\rho)$. Положим

$$\gamma(t) = \int\limits_{\Gamma} F(\rho(T^{-t} x))\, d\mu. \tag{4.3}$$

Как уже было сказано, этот интеграл на самом деле от t не зависит. Заменим теперь плотность

$$\rho_t(x) = \rho(T^{-t} x)$$

ее слабым пределом

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

Пусть

$$\overline{\gamma} = \int\limits_{\Gamma} F(\overline{\rho}(x))\, d\mu.$$

Теорема 2. *Если функция одного переменного F выпукла (вогнута), то*

$$\overline{\gamma} \leqslant \gamma \quad (\overline{\gamma} \geqslant \gamma). \tag{4.4}$$

Для интеграла (4.2)

$$F(z) = -z \ln z, \quad z > 0.$$

Эта функция вогнута, и поэтому энтропия в равновесном состоянии

$$\overline{s} = -\int\limits_{\Gamma} \overline{\rho} \ln \overline{\rho}\, d\mu$$

не меньше энтропии в начальный момент времени. Таким образом, энтропия постоянна со временем, а в точках $t = \pm\infty$ она допускает неотрицательный скачок $\overline{s} - s(0)$. Этот результат справедлив, конечно, и для гладких динамических систем, причем величина скачка вполне согласуется с предсказаниями феноменологической термодинамики (см. [6]). Стоит еще подчеркнуть, что энтропия совершает упомянутый скачок как в будущем, так и в прошлом. Это замечание соответствует обратимой природе круговой модели Каца.

С учетом того, что $\overline{\rho}$ получается из ρ_t простой операцией взятия среднего арифметического по орбитам действия отображения T, неравенства (4.4) — это просто следствия классического неравенства Йенсена для выпуклых функций. Причем если $F'' > 0$ ($F'' < 0$) и ρ_t как функция времени непостоянна, то эти неравенства будут строгими.

Есть еще один путь к обоснованию закона возрастания энтропии изолированной системы, восходящий к Гиббсу и обоснованный в работе [12] для гладких динамических систем. Речь идет о замене (4.2) так называемой *грубой энтропией*. Фазовое пространство разбивается на конечное или счетное множество измеримых кусков, на каждом из которых в каждый момент времени происходит усреднение плотности ρ_t. Пусть $\widehat{\rho}_t$ — результат такого усреднения, зависящий, конечно, от разбиения Г. Грубой энтропией называется интеграл

$$-\int\limits_{\Gamma} \widehat{\rho}_t \ln \widehat{\rho}_t \, d\mu, \tag{4.5}$$

который, вообще говоря, меняется со временем. Условия возрастания интеграла (4.5) при $t \to \to \pm\infty$ указаны в [12]. Существенную роль играет предположение о малости диаметра разбиения, которое трудно сформулировать для дискретных динамических систем.

§ 5. Анализ Фурье–Радемахера и предельные распределения

Следуя М. Кацу, рассмотрим следующие функции на фазовом пространстве Г:

$$\begin{gathered} 1;\ x_p;\ x_p x_q;\ x_p x_q x_r;\ \ldots;\ x_1 x_2 \ldots x_n \\ (p < q < r < \ldots < n). \end{gathered} \tag{5.1}$$

Легко понять, что таких функций ровно 2^n, сколько и различных точек в Г. Действительно, линейных функций x_p ровно n, квадратичных $x_p x_q$ ($p < q$) ровно $\binom{n}{2}$ и т. д. Далее следует воспользоваться классическим биномиальным тождеством. Таким образом, функции (5.1) образуют базис в линейном пространстве всех функций на Г.

Ключевым свойством набора функций (5.1) является их ортогональность: интеграл по всему Г от произведения любых двух из них по мере Лиувилля равен нулю. Их конструкция напоминает построение функций Радемахера на единичном отрезке.

Свойства полноты и ортогональности позволяют просто разложить любую функцию ρ на Г в «ряд Фурье» по (5.1):

$$\rho(x) = c_0 + \sum c_p x_p + \sum_{p<q} c_{pq} x_p x_q + \ldots + c_{12\ldots n} x_1 x_2 \ldots x_n. \tag{5.2}$$

Коэффициенты в этой формуле легко вычисляются по значениям самой функции. Например,

$$c_{pq} = \frac{1}{2^n} \int\limits_{\Gamma} \rho(x) x_p x_q \, d\mu = \frac{1}{2^n} \sum \rho(x) x_p x_q.$$

По этой формуле коэффициент c_0 в (5.1) равен, очевидно, 2^{-n}.

Если (5.2) взять за начальную плотность распределения, то можно найти ее «ряд Фурье–Радемахера» в каждый момент времени. Соответствующая формула получена Кацем:

$$\rho_t(x) = \frac{1}{2^n} + \sum_p c_p x_{p+t} \varepsilon_p \varepsilon_{p+1} \ldots \varepsilon_{p+t-1} + \\ + \sum_{p<q} c_{pq} x_{p+t} x_{q+t} (\varepsilon_p \ldots \varepsilon_{p+t-1})(\varepsilon_q \ldots \varepsilon_{q+t-1}) + \ldots . \tag{5.3}$$

Чтобы найти состояние статистического равновесия, надо вычислить среднее по Чезаро каждого слагаемого. Это — отдельная содержательная комбинаторная задача.

Мы подойдем к этому вопросу с другой стороны. Выясним структуру функций вида (5.2), инвариантных относительно преобразования T. Согласно § 3 такие и только такие функции являются слабыми пределами по Чезаро функций (5.3) при $t \to \pm\infty$.

Ввиду однозначности разложения функций на Г в ряды Фурье–Радемахера, достаточно найти условия инвариантности однородных форм относительно переменных $x_1, \ldots, x_n$. Начнем с линейных слагаемых. Форма $\sum c_p x_p$ инвариантна относительно T тогда и только тогда, когда коэффициенты удовлетворяют соотношениям

$$c_1 = c_2\varepsilon_1, \quad c_2 = c_3\varepsilon_2, \quad \ldots, \quad c_{n-1} = c_n\varepsilon_{n-1}, \quad c_n = c_1\varepsilon_n. \tag{5.4}$$

Условие ее разрешимости сводится к равенству

$$\varepsilon_1\varepsilon_2 \ldots \varepsilon_n = 1. \tag{5.5}$$

Оно выполнено, только если m — число элементов в множестве S — четно. В этом случае система (5.4) имеет однопараметрическое семейство решений

$$c_1 = \alpha, \quad c_2 = \varepsilon_1\alpha, \quad c_3 = \varepsilon_1\varepsilon_2\alpha, \quad \ldots,$$

где α — произвольное вещественное число. Если же m нечетно, то все c_j равны нулю.

В отличие от линейного случая, инвариантные квадратичные формы всегда существуют независимо от четности m. Их коэффициенты определяются равенствами вида (5.4), которые мы выписывать не будем.

Нетривиальные инвариантные формы третьей степени снова существуют лишь при условии (5.5). И так далее. В частности, справедлива

Теорема 3. *Если m нечетно, то $\overline{\rho}$ — четная функция.*

Следовательно, в этом случае среднее от нечетной функции по стационарной вероятностной мере $\overline{\rho}\mu$ равно нулю. Применяя это замечание к линейной функции (3.9), снова получаем заключение теоремы 1.

§ 6. Модель Каца и цепочка уравнений Боголюбова

Все эти наблюдения позволяют обсудить некоторые принципиальные вопросы, возникающие в теории цепочек уравнений Боголюбова [13, 14]. Эта теория играет фундаментальную роль в статистической механике систем взаимодействующих частиц.

Исходный пункт теории Н. Н. Боголюбова — классическое уравнение Лиувилля для системы, состоящей из n одинаковых взаимодействующих частиц. Начальное распределение $\rho_0(x_1, \ldots, x_n)$ предполагается *симметричным* относительно состояний отдельных частиц $x_1, \ldots, x_n$. Это — отражение «принципа тождественности» частиц.

В модели Каца тоже можно стартовать с симметричных распределений. Однако в процессе эволюции симметрия, как правило, разрушается. Поэтому М. Кац предложил кроме усреднения по всем положениям множества S производить в каждый момент времени еще и симметризацию распределения. Но это дополнительное усреднение также не дает возможности строго обосновать стремление системы к равномерному распределению. Обсуждение см. в [5].

Далее Н. Н. Боголюбов выводит цепочку зацепляющихся уравнений для так называемых s-частичных функций распределения

$$\rho_t^{(s)}(x_1, \ldots, x_s),$$

производя усреднение «полной» функции распределения по состояниям $n - s$ частиц $x_{s+1}, \ldots, x_n$. Особый интерес представляет одночастичная функция (когда $s = 1$), которая описывает эволюцию распределения частиц по координатам и скоростям (как у Больцмана). Цепочка уравнений Боголюбова, конечно, эквивалентна исходному уравнению Лиувилля и ее строгий анализ нисколько не проще изучения исходного уравнения Лиувилля.

Чтобы упростить этот анализ, Н. Н. Боголюбов делает два дополнительных существенных предположения, не вытекающих непосредственно из принципов динамики.

1) Через относительно короткий промежуток времени (порядка «времени взаимодействия» частиц) временна́я эволюция всех s-частичных функций распределения определяется *полностью* зависимостью от времени первой функции распределения:

$$\rho_t^{(s)} = f_s(x_1, \ldots, x_s \mid \rho_t^{(1)}). \tag{6.1}$$

Черта означает, что зависимость от $\rho_t^{(1)}$ носит функциональный характер.

2) В отдаленном прошлом (когда $t \to -\infty$) состояния отдельных частиц статистически независимы.

В итоге для первой функции распределения выводится уравнение больцмановского типа (так называемое кинетическое уравнение), которое необратимо по времени.

Мы не будем точно формулировать и обсуждать второе предположение. Отметим только, что если заменить условие о статистической независимости в прошлом на независимость в будущем (когда $t \to +\infty$), то направление эволюции по Боголюбову сменит направление.

Первое предположение на самом деле является ключевым в теории Боголюбова. Однако, сколько известно автору, никаких серьезных попыток его обоснования не предпринималось. Оно, конечно, не может быть универсальным. Например, это предположение заведомо не выполняется для системы невзаимодействующих частиц: уравнения для $\rho^{(s)}$ полностью разделяются. Сам Н. Н. Боголюбов предполагал, что имеются только силы отталкивания между частицами. Если такую систему отталкивающихся частиц заключить в сосуд ограниченного объема, то можно было бы ожидать перемешивания на уровнях постоянной полной энергии. Но этот вывод также не очевиден и требует обоснования. Здесь многое зависит от формы сосуда. Перемешивания скорее всего нет в областях с почти сферической границей.

Обсудим вопрос о возможности представления (6.1) в системе Каца. Сначала рассмотрим упрощенную вероятностную модель, уже упоминавшуюся в § 3: при повороте за единицу времени шарик меняет (сохраняет) свой цвет с вероятностью μ (соответственно, $1 - \mu$). Считая изменения цвета в различных положениях независимыми, систему Каца превращаем в простую цепь Маркова. Используя представление Фурье–Радемахера, М. Кац получил явную формулу для плотности распределения в текущий момент времени [5]:

$$\begin{aligned}\rho_t(x) &= \frac{1}{2^n} + (1-2\mu)^t \sum c_k x_{k+t} + (1-2\mu)^{2t} \sum_{k<l} c_{kl} x_{k+t} x_{l+t} + \ldots + \\ &\quad + (1-2\mu)^{nt} c_{1\ldots n} x_{1+t} x_{2+t} \ldots x_{n+t} = \\ &= \frac{1}{2^n} + (1-2\mu)^t \sum c_{k-t} x_k + (1-2\mu)^{2t} \sum_{k\leqslant l} c_{k-t,\,l-t} x_k x_l + \ldots + \\ &\quad + (1-2\mu)^{nt} c_{1\ldots n} x_1 x_2 \ldots x_n.\end{aligned} \tag{6.2}$$

В записи этих формул (как и в (5.3)) использовалось естественное соглашение: $x_p = x_q$, если $p \equiv q \pmod n$. Коэффициенты Фурье–Радемахера — произведения показательной функции на периодические функции времени периода n.

Рассмотрим важный частный случай, когда начальное распределение (5.2) симметрично (инвариантно относительно перестановок переменных $x_1, \ldots, x_n$). Тогда все c_k равны между собой, все c_{kl} тоже равны и т. д. В этом случае периодические сомножители постоянны и все коэффициенты в (6.2) просто выражаются через *одну и ту же* функцию $(1-2\mu)^t$. После усреднения (6.2) по переменным $x_{s+1}, \ldots, x_n$ получим функцию с той же структурой коэффициентов, что делает возможным представление (6.1). Если же изначальной симметрии нет, то в типичной ситуации гипотеза Боголюбова не справедлива.

Как видно из (6.2), вероятностное упрощение исходной модели Каца сопряжено с потерей ее ключевых свойств обратимости и возвращаемости.

Без упрощающих предположений функциональное представление (6.1) невозможно. Чтобы показать это, рассмотрим частное начальное распределение

$$\rho_0(x) = \frac{1}{2^n} + \alpha x_1 x_2 \ldots x_n. \tag{6.3}$$

Оно симметрично, и при малых значениях α эта функция принимает всюду положительные значения. Легко понять, что

$$\rho_t(x) = \frac{1}{2^n} + \alpha(\varepsilon_1\varepsilon_2\ldots\varepsilon_n)^t x_1 x_2 \ldots x_n. \tag{6.4}$$

Если m — число элементов выделенного множества S — нечетно, то $\varepsilon_1\varepsilon_2\ldots\varepsilon_n = -1$. В этом случае ρ_t — непостоянная функция времени.

Усреднение по переменным $x_2, \ldots, x_n$ даст «одночастичную» функцию распределения, которая принимает в точках $x_1 = \pm 1$ одинаковое значение $1/2$. Поэтому при нечетном m формула (6.1) заведомо не имеет места для $s = n$.

Обобщая эти наблюдения, можно сделать вывод, что первая гипотеза Н. Н. Боголюбова, по-видимому, справедлива при дополнительных упрощающих предположениях, связанных с заменой исходной динамической системы соответствующим марковским процессом. Что же касается детерминированных динамических систем, то условия справедливости этой гипотезы требуют выяснения.

Список литературы

[1] Эренфест П., Эренфест Т. Замечание о теории возрастания энтропии в «Статистической механике» У. Гиббса // Работы по статистической механике: А. Пуанкаре, Т. и П. Эренфесты, Дж. фон Нейман / С дополнениями и под ред. В. В. Козлова и О. Г. Смолянова. М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2010 (в печати) [Ehrenfest P., Ehrenfest T.

Bemerkung zur Theorie der Entropiezunahme in der «Statistischen Mechanik» von W. Gibbs // Sitzungsberichte Akad. Wiss. Wien., 1906, Bd. 115, Abt. IIa, S. 89–98].

[2] Эренфест П., Эренфест Т. О двух известных возражениях против H-теоремы Больцмана // В кн.: Пуанкаре А., Эренфесты Т. и П., фон Нейман Дж., Работы по статистической механике / С дополнениями и под ред. В. В. Козлова и О. Г. Смолянова. М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2010 (в печати) [Ehrenfest P., Ehrenfest T. Über zwei bekannte Eniwände gegen das Boltzmannsche H-Theorem // Phys. Zschr., Bd. 8, Jg. 9, S. 311–314].

[3] Марков А. А. Обобщение задачи о последовательном обмене шаров // Изв. Акад. наук, С.-Пб., VI сер., 1918, т. 12, № 5, с. 261–266.

[4] Kac M. Probability and related topics in physical sciences. New York–London: Intersci. Publ., 1958. 266 p.

[5] Кац М. Несколько вероятностных задач физики и математики. М.: Наука, 1967. 176 с.

[6] Козлов В. В. Тепловое равновесие по Гиббсу и Пуанкаре. М.–Ижевск: Инст. компьютерн. исслед., 2002. 320 с.

[7] Козлов В. В. Ансамбли Гиббса и неравновесная статистическая механика. М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2008. 208 с.

[8] Poincaré H. Réfflexions sur la théorie cinétique des gaz // J. Phys. théoret. et appl., 4-e sér., 1906, vol. 5, pp. 369–403.

[9] Gibbs W. Elementary principles in statistical mechanics, developed with especial reference to the rational foundation of thermodynamics. New York: Schribner, 1902. 159 p.

[10] Hardy G. H. Divergent series. Oxford: Oxford Univ. Press, 1949. 396 p.

[11] Пригожин И., Стенгерс И. Порядок из хаоса: Новый диалог человека с природой. М.: Прогресс, 1986. 432 с.

[12] Козлов В. В., Трещев Д. В. Тонкая и грубая энтропия в задачах статистической механики // Теорет. и матем. физика, 2007, т. 151, № 1, с. 120–137.

[13] Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.–Л.: Гостехиздат. 1946. 136 с.

[14] Uhlenbeck G. E., Ford G. W. Lectures in statistical mechanics. Providence, RI: AMS, 1963. 181 p.

Statistical irreversibility of the Kac reversible circular model

Valery V. Kozlov

Steklov Mathematical Institute, Russian Academy of Sciences
Gubkina st. 8, Moscow, 119991 Russia
kozlov@pran.ru

The Kac circular model is a discrete dynamical system which has the property of recurrence and reversibility. Within the framework of this model M. Kac formulated necessary conditions for irreversibility over “short” time intervals to take place and demonstrated Boltzmann’s most important exploration methods and ideas, outlining their advantages and limitations. We study the circular model within the realm of the theory of Gibbs ensembles and offer a new approach to a rigorous proof of the “zeroth” law of thermodynamics basing on the analysis of weak convergence of probability distributions.

MSC 2010: 37A60
Keywords: reversibility, stochastic equilibrium, weak convergence

Received October 29, 2010, accepted December 4, 2010
Citation: *Rus. J. Nonlin. Dyn.*, 2011, vol. 7, no. 1, pp. 101–117 (Russian)