ЭВОЛЮЦИЯ МОМЕНТОВ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ В ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ МЕХАНИКЕ И ТЕОРЕМА О ВОЗВРАЩЕНИИ.

Михайлов А.И.

ВНИРО
НОЦ МИАН им. Стеклова

09 декабря 2011

Содержание

Введение. Проблема необратимости.

Уравнение Лиувилля и эволюция моментов функции распределения.

Обсуждение результатов.

Проблема оснований термодинамики

микроскопические уравнения - уравнения Гамильтона (Ньютона)$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \Rightarrow$ макроскопические уравнения (уравнения переноса)$\frac{\partial}{\partial t} c(\vec{r},\ t) = (\nabla,\ D\nabla c(\vec{r},\ t)) + f(\vec{r},\ t)$

Препятствия к редукционизму

- парадокс Лошмидта $H(H, q) = H(-p, q)$ - обратимость по времени при обращении импульсов
- парадокс Пуанкаре—Цермело $\mu(U_t(X)) = \mu(X) \Rightarrow \forall x \forall \varepsilon \exists T : \|U_T(x) - x\| < \varepsilon$ - почти периодичность, возвращение сколь угодно близко к начальной точке

Редукция статистической физики к механике невозможна $\Rightarrow$ требуется однозначная процедура вывода уравнений физической кинетики из уравнений механики, независимая от гамильтониана исходной системы

Подходы к решению проблемы необратимости

Подходы к решению проблемы необратимости

- Цепочка уравнений Боголюбова — Борна — Грина — Кирквуда — Ивона[1] - усреднения многочастичного уравнения Лиувилля $\frac{\partial f_s}{\partial t} + \sum_{i=1}^{s} \dot{q}_i \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{q}_i} + \sum_{i=1}^{s} \left(-\frac{\partial \Phi_i^{ext}}{\partial \mathbf{q}_i} - \sum_{j=1}^{s} \frac{\partial \Phi_{ij}}{\partial \mathbf{q}_i} \right) \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{p}_i} = \sum_{i=1}^{s} (N-s) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \int \frac{\partial \Phi_{is+1}}{\partial \mathbf{q}_i} f_{s+1}\, d\mathbf{q}_{s+1} d\mathbf{p}_{s+1}$
- Операторный формализм Пригожина [3] - макроскопические величины как операторы $\dot{\rho} = \{H\rho\} \Leftrightarrow \dot{\rho} = \hat{L}\rho;\ \dot{\hat{M}} = [\hat{L}\hat{M}]$
- функциональная механика [4] -функция распределения как микроскопической системы

Подходы к решению проблемы необратимости

Основной принцип

Свойства макроскопической динамики - атрибуты фазового потока механической как целого,«пучка» траекторий, а не одной изолированной траектории

Уравнение Лиувилля

Основное уравнение функциональной механики - уравнение Лиувилля

$$\partial_t \rho + \partial_i(\rho v^i) = 0 \tag{1}$$
$$\rho(0, x) = \rho_0(x) \tag{2}$$

Аналогии с квантовой механикой: функции распределения (вместо матрицы плотности) - состояния, линейные функционалы (с-функции канонических переменных, а не операторы) - наблюдаемые.

Решение уравнения Лиувилля

Задача Коши и фазовый поток

Решение задачи Коши для уравнения Лиувилля

$$\rho(t) = \rho_0(u(-t, x)) \tag{3}$$

Уравнения характеристик

Фазовый поток $u(t, x)$ -семейство решений задачи Коши для уравнений динамической системы (4) при при всех возможных начальных данных (5)

$$\dot{u}(t, x) = v(u) \tag{4}$$

$$u(0, x) = x \tag{5}$$

Решение уравнения Лиувилля

Сохранение фазового объема -условие применимости функциональной механики

$$\det \frac{\partial u}{\partial x} = 1 \tag{6}$$

$$\int f(x)\rho_0(u(-t,x))dx = \int f(u(t,x))\rho_0(x)dx \tag{7}$$

Решение уравнения Лиувилля

Формальное решение - экспонента векторного поля

$$u(t,x) = e^{t\mathbf{v}}x \tag{8}$$

$$e^{t\mathbf{v}} \equiv 1 + tv^i\partial_i + \frac{1}{2}t^2v^k\partial_k v^i\partial_i + \ldots = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}(v^i\partial_i)^n \tag{9}$$

Разложение в ряд Тейлора вблизи «классического» решения

$$u(t, x_0 + \xi) = \sum_{\alpha\in\mathbb{N}_0^D}\frac{1}{\alpha!}\xi^\alpha\partial_\alpha u(t, x_0) \equiv \sum_\alpha \xi^\alpha u_\alpha \tag{10}$$

Траектории средних значений координат

$$\langle u(t,x)\rangle = \sum_{\alpha} M^{\alpha} u_{\alpha} \qquad (11)$$

Задача — проследить эволюцию центрированных моментов всех порядков

$$M^{\alpha}(t) = \langle (u(t,x) - \langle u(t,x)\rangle)^{\alpha}\rangle = \sum_{\beta\leqslant\alpha}(-1)^{\beta}\langle u^{\alpha-\beta}(t,x)\rangle\langle u(t,x)\rangle^{\beta} \quad (12)$$

$$\langle u^{\alpha-\beta}(t,x)\rangle = \langle (\sum_{\gamma}\xi^{\gamma}u_{\gamma})^{\alpha-\beta}\rangle = \sum_{\gamma} M^{(\alpha-\beta)\gamma}u_{\gamma}^{\alpha-\beta} \quad (13)$$

$$\langle u(t,x)\rangle^{\beta} = \prod_{i=1}^{D}(\sum_{\delta} M^{\delta}u_{\delta}^{i})^{\beta_i} =$$

$$= \sum_{\substack{\delta_k;\\ \delta_k\leqslant\delta_{k+1}\forall k}} \Big(\Big(\sum_{\text{перестановки}} \prod_{\substack{k=1;\\ \delta_k\leqslant\delta_{k+1}\forall k}}^{|\beta|} u_{\delta_k}^{i_k}\Big) \prod_{\substack{k=1;\\ \delta_k\leqslant\delta_{k+1}\forall k}}^{|\beta|} M^{\delta_k}\Big) \quad (14)$$

Основной результат

Формула эволюции моментов распределения

$$M^{\alpha}(t) = \sum_{\substack{\delta_k;\\ \delta_k \leqslant \delta_{k+1} \forall k}} \sum_{\beta \leqslant \alpha} ((u_{\gamma}^{\alpha-\beta}(\sum_{\text{перестановки}} \prod_{\substack{k=1;\\ \delta_k \leqslant \delta_{k+1} \forall k}}^{|\beta|} u_{\delta_k}^{i_k}))\times$$

$$\times\,(M^{(\alpha-\beta)\gamma} \prod_{\substack{k=1;\\ \delta_k \leqslant \delta_{k+1} \forall k}}^{|\beta|} M^{\delta_k}) \quad (15)$$

Примеры

Матрица вторых моментов

$$B^{ij}(t) = \sum_{\alpha,\beta} u^i_\alpha u^j_\beta (M^{\alpha+\beta} - M^\alpha M^\beta) \quad (16)$$

$$\rho(x) = \frac{1}{\varepsilon^D}\phi(\frac{x}{\varepsilon}) \quad (17)$$

$$M^\alpha \sim \varepsilon^{|\alpha|} \quad (18)$$

В численных рассчетах можно удерживать лишь конечное число членов ряда.

Примеры

Первый неисчезающий член ряда

$$B^{ij}_{(0)}(t) = \sum_{\alpha,\beta\leqslant 1} u^i_\alpha u^j_\beta M^{\alpha+\beta} = \frac{\partial u^i}{\partial x^k}\frac{\partial u^j}{\partial x^l} B^{kl} \tag{19}$$

Следующая по ε поправка

$$B^{ij}_{(1)}(t) = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 u^i}{\partial x^k \partial x^m}\frac{\partial u^j}{\partial x^l} + \frac{\partial u^i}{\partial x^k}\frac{\partial^2 u^j}{\partial x^m \partial x^l}\right) B^{kml} + \\ + \frac{1}{4}\frac{\partial^2 u^i}{\partial x^k \partial x^m}\frac{\partial^2 u^j}{\partial x^l \partial x^n}\left(B^{kmln} + B^{km}B^{ln}\right) \tag{20}$$

Примеры

Асимптотика малых t

$$B_{(0)}^{ij}(t) \approx B^{ij} + t(\frac{\partial v^i}{\partial x^l} B^{lj} + \frac{\partial v^j}{\partial x^l} B^{il}) + \\ + \frac{t^2}{2}(\frac{\partial (v^k \partial_k v^i)}{\partial x^l} B^{kj} + \frac{\partial (v^k \partial_k v^j)}{\partial x^l} B^{il}) + t^2 \frac{\partial v^i}{\partial x^k} \frac{\partial v^j}{\partial x^l} B^{kl} \quad (21)$$

Условия применимости.

Слабый предел вероятностной меры

$$\int f(x)\bar{\rho}(x)dx = \int f(x) \lim_{T\to+\infty} \frac{1}{T}\int_0^T \rho(u(-t,x))dtdx =$$
$$= \lim_{T\to+\infty} \frac{1}{T}\int_0^T \int f(x)\rho(u(-t,x))dxdt =$$
$$= \lim_{T\to+\infty} \frac{1}{T}\int_0^T \int f(u(t,x))\rho(x)dxdt =$$
$$= \int \lim_{T\to+\infty} \frac{1}{T}\int_0^T f(u(t,x))dt\rho(x)dx = \int \bar{f}(x)\rho(x)dx \qquad (22)$$

Усреднение координат по предельному распределению - терминальная точка любой траектории.

Отклонение от начальной точки

$$\langle \sum_{i=1}^{D} (u^i(t,x) - u^i(0,x))^2 \rangle = \sum_{\substack{\alpha,\beta \\ 1 \leqslant |\alpha|,|\beta|}} M^{\alpha+\beta} \sum_{i=1}^{D} (u^i_\alpha u^i_\beta) \qquad (23)$$

Разрушение периодичности

$$u(T(x),x) = u(0,x) \qquad (24)$$

$$\partial^\alpha u(0,x) = \partial^\alpha u(T(x),x) = \prod_{i=1}^{D} (\partial_i + \partial_i T(x))^{\alpha_i} u(t,x) \qquad (25)$$

$$u_\alpha(T(x),x) \neq u_\alpha(0,x) \qquad (26)$$

Декремент затухания для интеграла движения

$$I(\langle u(t,x)\rangle) - I(u(t,x)) = \sum I_\beta (\sum_{|\alpha|} u_\alpha M^\alpha)^\beta =$$

$$= \sum_\beta \sum_{\substack{\delta_k; \\ \delta_k \leqslant \delta_{k+1} \forall k}} \left(\left(\sum_{\text{перестановки}} \prod_{\substack{k=1; \\ \delta_k \leqslant \delta_{k+1} \forall k}}^{|\beta|} u_{\delta_k}^{i_k} \right) \prod_{\substack{k=1; \\ \delta_k \leqslant \delta_{k+1} \forall k}}^{|\beta|} M^{\delta_k} I_\beta \right) \quad (27)$$

Парадокс - средняя энергия сохраняется, но гамильтониан средних координат убывает $I(\langle u(t,x)\rangle) \neq \langle I(u(t,x))\rangle$
Измерение инвариантов позволяет гораздо точнее предсказать состояние системы в последующий моменты времени

Открытые проблемы

- вычисление среднего отклонения в рамках теоремы Пуанкаре, т.е. при сколь угодно близком, но не точном возвращении
- доказательство того, что не существует также иного периода для траектории средних значений, пусть и отличного от периода точной траектории
- вычисление эволюции моментов в специальном случае полиномиальных векторных полей - ряды должны упроститься
- вычисление эволюции моментов в одномерной гамильтоновой механике где траектории известны и совпадают с уровнями энергии.

- Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. — М.— Л.: ОГИЗ. Гостехиздат, 1946.
- Мартынов Г. А. Неравновесная статистическая механика, уравнения переноса и второе начало термодинамики УФН 166 1105 (1996)
- Пригожин И. От существующего к возникающему: время и сложность в физических науках. Пер. с англ. /Под ред., с предисл. и послесл. Ю. Климонтовича. —Изд. 2-е, доп. — М.: Едиториал УРСС, 2002 288 стр.
- I. V. Volovich. Time Irreversibility Problem and Functional Formulation of Classical Mechanics. arXiv:0907.2445v1 [cond-mat.stat-mech]

- Козлов В. В. Тепловое равновесие по Гиббсу и Пуанкаре. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002, 320 стр.
- Trushechkin A. S., Volovich I. V. Functional classical mechanics and rational numbers // P-Adic Numbers, Ultrametric Analysis and Applications. 2009. V. 1, N 4. P. 365—371.