ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2000, том 370, № 3, с. 325–327

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 531.19

ТЕРМОДИНАМИКА ГАМИЛЬТОНОВЫХ СИСТЕМ И РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ГИББСА

© 2000 г. Член-корреспондент РАН В. В. Козлов

Поступило 08.10.99 г.

1. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ГИББСА И ПЕРЕХОД К ТЕРМОДИНАМИКЕ

Пусть $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ – обобщенные координаты, $y = (y_1, y_2, \ldots, y_n)$ – сопряженные канонические импульсы гамильтоновой системы с n степенями свободы и стационарным гамильтонианом $H(x, y, \lambda)$, где $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_m)$ – некоторые параметры. Согласно Гиббсу [1], при статистическом рассмотрении гамильтоновых систем ключевую роль играет распределение вероятностей с плотностью

$$\rho = c\exp(-\beta H), \tag{1}$$

где $c = \mathrm{const} > 0$, $\beta = \dfrac{1}{kT}$ (T – абсолютная температура, k – постоянная Больцмана). Постоянная c выбирается из условия нормировки плотности ρ.

Имея инвариантную меру с плотностью (1), можно ввести среднюю энергию

$$E(\beta, \lambda) = \int H\rho\, d^n x\, d^n y, \tag{2}$$

а также усреднить обобщенные силы (реакции связей $\lambda = \mathrm{const}$), отвечающие параметрам λ:

$$\Lambda_i = \int \frac{\partial H}{\partial \lambda_i} \rho\, d^n x\, d^n y, \quad 1 \le i \le m. \tag{3}$$

Соотношения $\Lambda_i = f_i(\beta, \lambda)$ рассматриваются как уравнения состояния.

Как показал Гиббс, 1-форма притока тепла

$$\omega = dE + \sum_1^m \Lambda_i d\lambda_i \tag{4}$$

удовлетворяет аксиомам термодинамики: ω замкнута при фиксированном значении β (I начало) и 1-форма $\beta\omega$ также замкнута (II начало). Таким образом, по Гиббсу, каждой гамильтоновой системе (конечно, при условии, что интегралы (2) и (3) существуют и гладко зависят от λ и β) можно сопоставить термодинамическую систему с внутренней энергией (2) и уравнениями состояния (3).

Эта идея Гиббса оказалась очень плодотворной и была развита во многих направлениях (см., например, [2, 3]). Сам Гиббс специально не занимался обоснованием канонического распределения (1), отметив лишь его естественность и полезность для целей термодинамики. Однако впоследствии этот вопрос стал одной из центральных проблем статистической механики. Считается, что распределение Гиббса асимптотически (при $n \to \infty$) может быть выведено из общих принципов механики в предположении эргодичности системы (см. [4]). Однако строгого вывода, кроме случая исчезающего взаимодействия, до сих пор нет [5]. Кроме того, доказательство эргодичности конкретных динамических систем, интересных с точки зрения статистической механики, – задача очень трудная и почти безнадежная (пока ее не удалось решить в полном объеме даже для простых систем, например для газа Лоренца в кубе [6]). Более того, для многих важных систем свойство эргодичности отсутствует ввиду результатов КАМ-теории. В [7] распределение (1) получено без привлечения эргодической гипотезы и при фиксированном $n \ge 2$. Вместо этого использовалась гипотеза Гиббса о тепловом равновесии системы при исчезающем взаимодействии.

В силу сказанного многие авторы предпочитают попросту постулировать каноническое распределение Гиббса. Цель настоящего сообщения – предложить рациональный подход к выводу канонического распределения для систем общего вида в русле идей самого Гиббса.

2. РАСПРЕДЕЛЕНИЯ, ЗАВИСЯЩИЕ ОТ ЭНЕРГИИ

Как показал Гиббс [1], плотность распределения вероятностей $\rho(x, y)$ – первый интеграл системы с гамильтонианом H. В физической литературе (см., например, [8]) распространена точка зрения, что этого свойства явно недостаточно для изучения распределения вероятностей ввиду массивности пространства первых интегралов: плотность ρ – произвольная функция от $2n - 1$ независимых

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

интегралов гамильтоновой системы с n степенями свободы. Однако этот результат носит сугубо локальный характер ($2n - 1$ независимых интегралов существуют лишь в малой окрестности неособой точки) и не имеет прямого отношения к рассматриваемой задаче. Дело в том, что, как отметил еще Гиббс, плотность $\rho \geq 0$ является однозначной функцией, определенной во всем фазовом пространстве [1, с. 375]. Оказывается, это обстоятельство сильно сужает класс первых интегралов. Согласно современной точке зрения, идущей от Пуанкаре [9], типичная гамильтонова система вообще не допускает глобальных интегралов, независимых от интеграла энергии H. Обзор строгих результатов в этом направлении содержится в [10]. Наиболее полно изучены условия существования дополнительных аналитических интегралов (особенно при $n = 2$).

Согласно КАМ-теории, гамильтоновы системы с двумя степенями свободы, мало отличающиеся от вполне интегрируемых, имеют дополнительный непостоянный непрерывный интеграл, хотя в общем случае не допускают новых аналитических интегралов. Считается, что, напротив, в многомерных системах (когда $n \geq 3$), наиболее интересных с точки зрения статистической механики, нет даже дополнительных непрерывных интегралов [11]. Это одна из точных формулировок гипотезы о диффузии в многомерных гамильтоновых системах.

Задача о несуществовании дополнительного интеграла системы уравнений Гамильтона, конечно, много проще задачи об ее эргодичности на многообразиях уровня интеграла энергии.

3. ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ГИББСА

Предположим, что гамильтонова система с гамильтонианом H не допускает дополнительных интегралов. Тогда плотность распределения вероятностей ρ есть функция от H. Спрашивается, каким образом распределение Гиббса (1) выделяется из всех распределений этого вида?

Пусть $z \to f(z)$ – неотрицательная вещественная функция одной переменной, f' – ее производная. Следуя Гиббсу, рассмотрим плотность вероятности

$$\rho = \frac{f(\beta H)}{\int f(\beta H)\,dx\,dy} \tag{5}$$

в предположении сходимости интеграла по всему фазовому пространству. Здесь снова $\beta^{-1} = kT$. При $f = e^{-z}$ получаем распределение Гиббса.

Вычисляем среднюю энергию E и обобщенные силы Λ_i по формулам (2) и (3), где плотность ρ определяется (5). После этого можно составить 1-форму притока тепла ω согласно (4).

Наш основной результат составляет

Т е о р е м а 1. *Форма* ω *удовлетворяет* I *началу термодинамики тогда и только тогда, когда*

$$\int \frac{\partial H}{\partial \lambda_i} f\,dx\,dy \int \frac{\partial H}{\partial \lambda_j} f'\,dx\,dy = \\ = \int \frac{\partial H}{\partial \lambda_j} f\,dx\,dy \int \frac{\partial H}{\partial \lambda_i} f'\,dx\,dy \tag{6}$$

для всех $1 \leq i, j \leq m$, *а* II *началу, когда дополнительно*

$$\int Hf\,dx\,dy \int \frac{\partial H}{\partial \lambda_i} f'\,dx\,dy = \\ = \int \frac{\partial H}{\partial \lambda_i} f\,dx\,dy \int Hf'\,dx\,dy \tag{7}$$

для всех $1 \leq i \leq m$.

Д о к а з а т е л ь с т в о основано на прямых вычислениях. Если термодинамическая система имеет одну степень свободы ($m = 1$), то надо проверять только одно условие (7). Для функции $f(z) = e^{-z}$ условия (6) и (7), очевидно, выполнены. Последнее замечание допускает обращение. Справедлива

Т е о р е м а 2. *Пусть функция f фиксирована, а равенства* (6) *и* (7) *справедливы для всех гладких гамильтонианов* $H(x, y, \lambda)$ (*в предположении сходимости интегралов из* (6) *и* (7)). *Тогда* $f(z) = e^{-cz}$, $c = \text{const}$.

Таким образом, каноническое распределение Гиббса является единственным “универсальным” распределением, плотность которого зависит от энергии и которое совместимо с аксиомами термодинамики. Постоянную c можно положить равной единице, заменив постоянную Больцмана k на k/c. Теорема 2 доказывается с использованием основной леммы вариационного исчисления.

Имеется важный класс гамильтонианов, для которых равенства (6) и (7) заведомо выполнены: $H = \Phi(x, y)\Psi(\lambda)$. В этом случае усреднение по мере (5) с любой функцией f приводит к 1-форме притока тепла, удовлетворяющей аксиомам термодинамики. Правда, уравнения состояния будут зависеть от выбора функции f.

Приведем простой п р и м е р – движение по инерции точки единичной массы, подвешенной на нити длины λ. Ее динамика определяется гамильтонианом $H = \dfrac{y^2}{2\lambda}$. Средняя энергия и среднее значение натяжения нити (назовем это давлением и обозначим p) задаются формулами

$$E = \frac{b}{2a\beta}, \quad p = \frac{b}{a\lambda\beta}, \tag{8}$$

где

$$a = \int_{-\infty}^{\infty} f\left(\frac{z^2}{2}\right)dz, \quad b = \int_{-\infty}^{\infty} z^2 f\left(\frac{z^2}{2}\right)dz.$$

Уравнения состояния (8) по форме совпадают с уравнением состояния идеального газа: $p\lambda = \kappa T$ $\left(\kappa = \dfrac{b}{ka} = \text{const}\right)$. Для распределения Гиббса ($f = e^{-z}$) $a = b$. Справедливость этого интегрального тождества легко проверяется интегрированием по частям.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 99–01–01096) и INTAS (грант 96–0793).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Гиббс Дж.В.* Термодинамика. Статистическая механика. М.: Наука, 1982. 384 с.
2. *Боголюбов Н.Н.* Избранные труды: В 3 т. Киев: Наук. думка, 1970. Т. 2. 522 с.
3. *Рюэль Д.* Статистическая механика. Строгие результаты. М.: Мир, 1971. 367 с.
4. *Хинчин А.Я.* Математические основания статистической механики. М.; Л.: Гостехиздат, 1943. 128 с.
5. *Березин Ф.А.* Лекции по статистической физике. М.: Изд-во МГУ, 1972. 141 с.
6. *Szász D.* // Sci. Math. Hung. 1996. V. 31. № 1/3. P. 299–322.
7. *Kozlov V.V.* // Regular and Chaotic Dynamics. 1999. V. 4. № 2. P. 44–54.
8. *Квасников И.А.* Термодинамика и статистическая физика. Теория равновесных систем. М.: Изд-во МГУ, 1991. 800 с.
9. *Пуанкаре А.* Избранные труды. М.: Наука, 1971. Т. 1. 771 с.
10. *Козлов В.В.* Симметрии, топология и резонансы в гамильтоновой механике. Ижевск, 1995. 432 с.
11. *Арнольд В.И., Козлов В.В., Нейштадт А.И.* Математические аспекты классической и небесной механики. М.: ВИНИТИ, 1985. 304 с.