

СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РАН
ИНСТИТУТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СО РАН
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
КРАСНОЯРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

V ВСЕРОССИЙСКИЙ СЕМИНАР
"МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ"
18-20 ОКТЯБРЯ 2002 ГОДА
КРАСНОЯРСК

Лекция
ГЕОМЕТРИЯ НЕОБРАТИМОСТИ:
НАТУРАЛЬНЫЙ ПРОЕКТОР
И ПЛЕНКА НЕРАВНОВЕСНЫХ СОСТОЯНИЙ

А.Н.Горбань^{1,3}, И.В.Карлин^{2,3}

¹Институт вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск, Россия
e-mail: gorban@icm.krasn.ru

²ETH Zurich, Department of Materials, Institute of Polymers, Zurich, Switzerland
e-mail: ikarlin@ifp.mat.ethz.ch

³Institute des Hautes Etudes Scientifiques, Bures-sur-Yvette, France,

Красноярск 2002

Геометрия необратимости: натуральный проектор и пленка неравновесных состояний. Горбань А.Н., Карлин И.В. // V Всероссийский семинар "Моделирование неравновесных систем". Лекция. Красноярск: ИПЦ КГТУ, 2002. 64 с.

Конспект лекции, прочитанной на V Всероссийском семинаре "Моделирование неравновесных систем", Красноярск, 18-20 октября 2002 г.

Дан новый систематический подход к проблеме необратимости. Построена конструктивная схема вывода уравнений кинетики из микроописания.

Систематически используются квазиравновесные ансамбли, реализующие условный максимум энтропии. Вводится понятие "макроскопически определяемых ансамблей". Они строятся в результате применения двух операций: (а) приведения системы в квазиравновесное состояние по всему набору макроскопических переменных M или по какой-то его части; (б) изменения ансамбля в силу микроскопической динамики (например, уравнения Лиувилля) в течение некоторого времени.

Подробно описан метод натурального проектора, использующий проектирование с помощью отрезков траекторий (или их тейлоровских приближений – струй) в фазовом пространстве. Он используется для построения диссипативной макрокинетики на основе консервативной микродинамики.

Показано, что неравновесное состояние системы, соответствующее квазиравновесным начальным условиям, всегда принадлежит некоторому инвариантному многообразию в фазовом пространстве – пленке неравновесных состояний. Получены дифференциальные уравнения, определяющие пленку. Даны методы их приближенного решения.

Выделены два принципиально различных случая перехода от микро- к макроописанию. В одном из них уравнения на макропеременные при движении по пленке стремятся к некоторой предельной системе уравнений. Этот случай соответствует, в частности, применимости метода статистического оператора Зубарева. Во втором случае предела нет, необходимо введение дополнительных переменных, которые могут быть выбраны в виде разности микроскопической и квазиравновесных энтропий.

Показано, что классическое представление о разделении времен релаксации не соответствует процессам, начинающимся с квазиравновесных начальных условий. Для них, наоборот, есть иерархия "рождения диссипации": сначала диссипация отсутствует, далее она возникает (первоначально без разделения на процессы – один кинетический коэффициент), потом происходит ветвление на процессы, которое либо обрывается (существует предел макроскопических уравнений), либо ветвится до бесконечности.

В приложении дан краткий обзор метода инвариантного многообразия для диссипативных систем.

Оглавление

1. ПРОБЛЕМА НЕОБРАТИМОСТИ	4
1.1. Феномен макроскопической необратимости	4
1.2. Фазовый объем и динамика ансамблей	6
1.3. Макроскопически определяемые ансамбли и квазиравновесие	9
1.4. Необратимость и начальные условия	12
1.5. Слабое начальное стремление к равновесию, встряхивание и ограниченная (короткая) память	12
1.6. Существо необратимости в двух словах	14
1.7. Эквивалентность траекторий и ансамблей в термодинамическом пределе	15
1.8. Субъективное время и необратимость	15
2. КВАЗИРАВНОВЕСИЕ	16
2.1. Квазиравновесное многообразие	16
2.2. Термодинамический проектор	18
2.3. Квазиравновесное приближение	19
3. НАТУРАЛЬНЫЙ ПРОЕКТОР И МОДЕЛИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ДВИЖЕНИЙ	22
3.1. Натуральный проектор	22
3.2. Одномерная модель неравновесных состояний	25
3.3. Устойчивость квазиравновесного многообразия	28
3.4. Геометрические разложения вместо темпоральных	30
4. ПЛЕНКА НЕРАВНОВЕСНЫХ СОСТОЯНИЙ	31
4.1. Уравнения пленки	31
4.2. Термодинамический проектор на пленку	32
4.3. Неподвижные точки и "правильные асимптотики" для уравнения пленки	35
4.4. Огрубляющий проектор	36
4.5. Выбор огрубляющего проектора и послойная линеаризация	38
4.6. Неудача с галеркинскими приближениями	41
4.7. Возможные выходы за пределы галеркинских приближений	42
4.8. Пленка: кеплеровские модели второго порядка	44
4.9. Минимальные модели второго порядка: энтропийная парабола и энтропийная окружность	45
4.10. Финитные модели: остановка в точках горизонта	46
4.11. Лемма о трансверсальном рестарте	48
4.12. Замена времени и инвариантность термодинамического проектора	49
4.13. Коррекция инфинитных моделей	50
4.14. Пленка и макроскопические уравнения	50
4.15. Новое в разделении времен релаксации	53
5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ	54
ПРИЛОЖЕНИЕ: Метод инвариантного многообразия	56
П 1. Построение инвариантных сечений	56
П 2. Энтропийные термодинамические проекторы	58
П 3. Метод инвариантных многообразий для положительно инвариантных многообразий с фиксированным краем	59
ЛИТЕРАТУРА	62

1. ПРОБЛЕМА НЕОБРАТИМОСТИ

1.1. Феномен макроскопической необратимости

Наилучшей демонстрацией проблемы необратимости представляется следующий мысленный эксперимент. Просмотрим документальный кинофильм: идет дождь, бегут люди, едут машины. Прокрутим этот фильм в обратном порядке – получим нелепую и забавную картину: капли дождя поднимаются к облакам, которые потом в виде пара концентрируются в лужах, на поверхности рек и т.д., люди бегут задом наперед, машины тоже ведут себя весьма странно... Так не бывает – и мы «знаем» это точно, мы ничего подобного никогда не видели. Допустим, однако, что мы смотрим тот же фильм с увеличением в 10^8 - 10^9 раз – так, чтобы видеть отдельные частицы. И неожиданно мы откроем для себя, что не можем найти никакой существенной разницы между прямым и обратным показом – всюду частицы движутся, сталкиваются, реагируют по законам физики – нигде ничего не нарушено¹. Мы не можем отличить прямой ход времени от обратного.

Итак, необратимость макроскопической картины при обратимости микроскопической.

Дождь, люди, машины – все это слишком сложно. Простейший пример необратимости макроскопической картины (при очевидной обратимости микроскопической) приводит Р.Фейнман в своих лекциях о характере физических законов [1, с. 99-101]. "Рассмотрим один простой пример. Пусть у нас есть вода, подсиненная чернилами, и обычная вода, без чернил, и пусть они налиты в банку из двух половин, разделенных очень тонкой перегородкой. Осторожно вытащим перегородку. В самом начале вода разделена: синяя справа, чистая слева. Но погодите. Мало-помалу синяя вода начинает перемешиваться с обычной, и через некоторое время вся вода оказывается голубой, причем интенсивность синего цвета уменьшится вдвое. Это значит, что чернила равномерно распределились по всему объему. Теперь, сколько бы мы ни ждали, наблюдая воду, мы не дождемся, чтобы она разделилась на синюю и обычную. (Конечно, вы можете заставить ее разделиться. Можно, например, выпарить воду и сконденсировать пары где-то в другом месте, собрать синюю краску, растворить ее в половине собранной воды, закрыть заслонку и налить воду обратно в банку,

¹ Мы не касаемся здесь случаев нарушения Т-инвариантности в мире элементарных частиц для К-мезонов. В нашем примере такие процессы несущественны.

разделенную на две половины. Но когда вы будете делать все это, вы непременно вызовете другие необратимые процессы.) Сама по себе вода не вернется в начальное состояние.

Это дает нам определенный ключ к решению задачи. Давайте посмотрим на поведение молекул. Предположим, что мы сняли фильм о перемешивании чистой воды с синей. Теперь, если показать его в обратном направлении, это будет выглядеть очень странно. Сначала будет равномерно окрашенная вода, а потом постепенно начнется разделение – совершенно очевидно, что такое кино выглядит не слишком правдоподобно. Увеличим теперь наши снимки таким образом, чтобы физики могли наблюдать за каждым атомом и попытаться найти, что же там происходит необратимым образом, где нарушаются законы равновесия между движением в будущее и движением в прошлое. Включаем киноаппарат и смотрим на экран. Мы видим атомы двух различных сортов (конечно, это нелепо, но будем называть их синими и белыми), постоянно метущиеся из стороны в сторону из-за теплового движения. Если мы начнем наши наблюдения с самого начала, то окажется, что большинство атомов одного типа расположились по одну сторону, а большинство атомов другого типа – по другую. Но эти атомы непрерывно мечутся из стороны в сторону, и их миллиарды и миллиарды, и даже если вначале все синие атомы были с одной стороны, а все белые – с другой, мы увидим, что во время своих бесконечных хаотических метаний они начнут перемешиваться, и этим-то и объясняется, почему вода в конце концов оказывается более или менее равномерно голубой.

Давайте, пронаблюдаем за любым столкновением, происходящих в нашем кинофильме. Мы увидим, что атомы сначала сталкиваются, а затем разлетаются в обратном направлении. Покажем затем соответствующий отрывок кинофильма задом наперед. Мы увидим, как пара молекул сходится по траекториям, по которым они на самом деле разлетались, а затем, столкнувшись, разлетаются по траекториям, по которым они сходились. Физик, пристально наблюдавший за всем происходящим, заверит вас: "Здесь все правильно, все согласуется с законами физики. Если молекулы сходились по этим траекториям, то они должны разлетаться так, как они разлетались". Так что это явление обратимо. Законы молекулярных столкновений обратимы во времени.

Итак, если мы станем наблюдать слишком пристально, мы снова ничего не сможем понять. Ведь каждое из столкновений полностью обратимо, а все же наш кинофильм, прокрученный в обратном направлении, показывает нечто совершенно

абсурдное: как молекулы, первоначально смешанные (синие, белые, синие, белые) с течением времени после множества столкновений разделились на белые, сосредоточенные в одном месте, и синие, расположенные в другом. Но ведь этого не может быть, это неестественно, чтобы синее само по себе случайно отделялось от белого. И в то же время, если наблюдать нашу прокручиваемую задом наперед картину, каждое столкновение абсолютно законно.

... кажущаяся необратимость природы не следует из необратимости основных законов физики. Она связана с тем, что если вы начинаете с некоторой упорядоченной системы и подвергаете ее случайностям, происходящим в природе, столкновению молекул, например, то все происходит необратимым образом, только в одну сторону.

В связи с этим возникает следующий вопрос: а чем объясняется существование исходного порядка? Другими словами, почему удается начать с упорядоченной системы? Трудность здесь заключается в том, что мы начинаем всегда с упорядоченного состояния, но никогда не приходим к такому же состоянию."

Мы легко воспринимаем как очевидное, что шарики разных цветов смешиваются, и отнесемся как к чуду к обратной картине – самопроизвольному разделению их смеси. Однако впечатление обычности, обыденности одной картины и необычности, чудесности другой – это еще не физика. Желательно как-то измерить этот переход от порядка к беспорядку, количественно определить меру порядка (беспорядка), дать точное объяснение привычной фразе: «Обычно совершается переход от порядка к беспорядку», – пояснить в ней каждое слово, начиная со слова «обычно», объяснить отдельные словосочетания и фразу в целом. В каком-то смысле вся наша работа посвящена этому, и она – одна из тысяч работ, нацеленных на прояснение этих вопросов.

1.2. Фазовый объем и динамика ансамблей

Пусть в ящике находится n синих и n белых частиц, ящик разделен на две половинки – правую и левую. Расположение частиц в ящике описывается набором из $2n$ векторов положений частиц. Множество всех наборов этих векторов – «ящик» в $6n$ -мерном пространстве. Точка в этом $6n$ -мерном пространстве описывает конфигурацию. Движение этой точки описывается уравнениями механики.

«Порядок» – это конфигурация, в которой синие частицы находятся справа, а белые – слева. Множество всех таких конфигураций имеет весьма малый объем. Он

составляет $(1/2)^{2n}$ от всего объема $6n$ -мерного ящика. Если $n = 10$, то это порядка одной миллионной части общего объема. Случайно попасть в такую область практически невозможно. Также маловероятно, что, более менее произвольно (с большой долей случайности) формируя начальные условия, мы через некоторое доступное для нас время наблюдения обнаружим, что система сама стала упорядоченной: при естественном предположении, что скорости не слишком велики, т.е. время свободного движения шарика от стенки до стенки не является для нас исчезающе малым, время ожидания упорядочения становится практически бесконечным.

С этой точки зрения движение ведет от состояния «порядка» к состоянию «беспорядка», поскольку состояний «порядка» просто намного меньше. Такое определение порядка мы дали. Стандартный вопрос: «Где больше порядка – в изящном дворце или в куче камней?» – имеет ответ: «А это, смотря в какой куче». Если под «кучами» подразумевается все конфигурации камней, не являющиеся дворцами, тогда куч намного больше, и порядка в такой куче меньше. Если же «куча» – это специально, уникально расположенные камни (например, сад камней), то в этой уникальности порядка столько же, сколько в уникальном дворце. Важна не конкретная конфигурация, а совокупность конфигураций, охваченная одним понятием.

Этот переход от отдельной конфигурации к их совокупностям - ансамблям играет важнейшую роль в понимании необратимости: необратимый переход от упорядоченной конфигурации (синие – справа, белые - слева) к неупорядоченной происходит просто потому, что неупорядоченных намного больше по объему. Тут, строго говоря, надо добавить еще теорему Лиувилля: объем, занимаемый ансамблем в фазовом пространстве, не меняется при эволюции механической системы. Именно поэтому объем V – это хорошая мера для сравнения совокупностей конфигураций. Впрочем, чаще используется $\ln V$ – энтропия.

В примере Фейнмана точка, изображающая конфигурацию, быстро покидает малую область, соответствующую разделенной системе, и очень долго (практически никогда) в нее не возвращается.

В этой, казалось бы, идиллической картине есть два облачка.

Первое замечание: стрелы времени как не было, так и нет. Если от упорядоченного (разделенного) начального состояния двигаться по времени обратно, то все будет так же, как и при движении вперед – порядок будет сменяться беспорядком.

Второе замечание: прокрутим пленку «назад» – снимем смешение разноцветных частиц, а потом посмотрим в обратном ходе их разделение. Этот процесс разделения начинается с, казалось бы, неупорядоченного состояния, а движение по законам механики приводит к порядку. Причем имеется простое правило получения такого неупорядоченного состояния: взять упорядоченное, дать системе некоторое время на эволюцию согласно законам механики, а потом изменить скорости всех частиц на противоположные.

Однако начальные конфигурации для обратного хода только кажутся неупорядоченными. Их «упорядоченность» состоит в том, что они получены из разделенной смеси временным сдвигом за время t . Таких конфигураций тоже очень мало – столько же, сколько и упорядоченных (разделенных). Если начинать с них и двигаться назад по времени, то через время t получим разделенную систему. Так почему же очевидное следствие законов механики выглядит (на экране) неправдоподобным?

Следует, вероятно, признать, что состояния, полученные из разделенной системы сдвигом на t и последующим обращением скоростей (для обратного движения по времени), не могут быть приготовлены макроскопическими средствами. Для их создания требуется армия демонов Максвелла, индивидуально с достаточной точностью обращающих скорости частиц. Тут очень много содержится в словосочетании «с достаточной точностью». Начальный порядок определялся простым условием: белые – налево, синие – направо. Несмотря на то, что эта область ("капля") в фазовом пространстве имеет очень малый объем, для ее формирования не требуется особой точности в управлении координатами: при ошибке, скажем, в $1/10$ от ширины ящика, белые так и останутся в основном слева, а синие – справа. На скорости же условий не было вовсе. Но пусть эта капля эволюционировала время t по законам механики (все удары – упругие). Она сохранит свой объем, но примет очень сложную форму, возникнут связи между скоростями и положениями частиц, уже малое изменение координат или скоростей будут выводить точку из этой капли. Естественная оценка для допустимой ошибки в обращении скоростей (чтобы через время t после обращения получился все же порядок) имеет вид $\exp(-\lambda t)$, где λ растет с ростом числа частиц. Достаточно быстро необходимая точность становится недостижимой.

Выделенные начальные условия, для которых смесь самопроизвольно разделяется (вспомним «кучи» специального вида – сады камней) объединяются нами с

другими кучами в «макроскопически определимые ансамбли». А вот в этих ансамблях самопроизвольное разделение смесей практически невероятно.

Мы приходим к новому представлению: 1) мы можем готовить не индивидуальные системы, а только представителей ансамблей – случайно выбранные системы из специальных ансамблей; 2) мы можем готовить не всякие ансамбли, а только особые «*макроскопически определимые ансамбли*».

Что такое «макроскопически определимые ансамбли»? Тут, вероятно, как с тезисом Черча – придется дать некоторые конструкции, универсальность которых будет проверяться временем.

1.3. Макроскопически определимые ансамбли и квазиравновесие

Основным инструментом в изучении макроскопической определимости ансамблей являются понятия *макроскопических переменных и квазиравновесия*.

В динамике ансамблей макроскопические переменные определяются как некоторые линейные функционалы (моменты) плотности распределения. Сюда обычно относятся гидродинамические переменные – плотности частиц, энергии, импульса, могут также включаться тензор напряжений, скорости реакций и другие величины. К макроскопическим переменным относят в некоторых задачах также одночастичную функцию распределения (и шире – k -частичные функции, $k = 1, 2, 3$, реже 4, при этом микроскопическое описание дается N -частичной функцией распределения для полного числа частиц N). Задается линейный оператор пространства микроскопических описаний в пространство макроописаний. Любой линейный функционал на пространстве макроописаний тоже определяет макроскопическую величину.

В данном случае важно просто то, что перечень макроскопических переменных для каждой рассматриваемой системы задан, то есть определено пространство макроописаний и отображение пространства микроописаний на него.

Отдельной системе соответствует точка в фазовом пространстве x . Ансамбль систем задается (обобщенной) функцией плотности вероятности F в фазовом пространстве. Распределение F должно удовлетворять ряду ограничений. Важнейшие из них – неотрицательность $F(x) \geq 0$, условие нормировки

$$\int_X F(x) dV(x) = 1 \quad (1)$$

и определенность энтропии – существует интеграл

$$S(f) = -\int_X F(x) \ln F(x) dV(x) \quad (2)$$

(функция $F \ln F$ продолжается по непрерывности на нулевые значения F : $0 \ln 0 = 0$).
Здесь $dV(x)$ – мера, инвариантная относительно сдвига по времени (фазовый объем).

Квазиравновесный ансамбль описывает «равновесие при ограничениях»: предполагается, что как-то внешними силами удерживаются заданные значения M макроскопических переменных, при этом «все остальное» приходит к соответствующему каноническому ансамблю F – решению задачи:

$$\begin{aligned} S(F) &\rightarrow \max, \\ m(F) &= M, \end{aligned} \quad (3)$$

где $S(F)$ – энтропия, $m(F)$ – набор макроскопических переменных, соответствующих микроописанию F .

Гипотеза о макроскопически определяемых ансамблях.

Макроскопически определяемые ансамбли получаются в результате применения двух операций:

1) *приведение системы в квазиравновесное состояние по всему набору макроскопических переменных M или по какой-то его части;*

2) *изменение ансамбля в силу динамики (уравнения Лиувилля) в течение некоторого времени t .*

Эти операции могут применяться по очереди много раз и для любых промежутков времени t . Предел последовательности макроскопически определяемых ансамблей также будем называть макроскопически определяемым. Начинаем всегда с первой операции.

Для более детальной проработки понятия «*макроскопическая определяемость*» следует более внимательно отнестись еще к одной операции - разделению системы на подсистемы. Оно состоит в разбиении фазового пространства X с мерой dV на прямое произведение пространств $X = X_1 \times X_2$ с мерой $dV_1 dV_2$. Каждому допустимому («макроскопическому») разбиению на подсистемы соответствует операция взятия «частичного квазиравновесия», применяемая к некоторой плотности $F_0(x_1, x_2)$:

$$\begin{aligned} S(F) &\rightarrow \max, \\ m(F) &= M, \\ \int_{X_2} F(x_1, x_2) dV_2(x_2) &= \int_{X_2} F_0(x_1, x_2) dV_2(x_2), \end{aligned} \quad (4)$$

где M – некоторый набор макропеременных (не обязательно все)².

В (4) состояние первой подсистемы не изменяется, а вторая подсистема приводится к квазиравновесию. Необходимо подчеркнуть, что для условия $m(F) = M$ в (4) значение M может отличаться от $m(F_0)$. Операция с системой, описываемая переходом от F_0 к решению задачи (4), содержательно означает, что мы можем устанавливать для отдельных подсистем по существу произвольные квазиравновесные состояния, не меняя состояний остальных подсистем.

Набор допустимых разбиений на макроскопические подсистемы имеет тот же статус, что и исходный набор макропеременных; а вместе они определяют отличие «микро-» от «макро-» для данного круга задач. Фактически, задача (4) является вариантом (3) с дополнительными «макропеременными»

$$\int_{x_2} F(x_1, x_2) dV_2(x_2). \quad (5)$$

Расширенная гипотеза о макроскопически определимых ансамблях допускает использование и операций (4) с одним только ограничением – начальное состояние должно быть «истинным квазиравновесным», т.е. макропеременные, связанные со всеми допустимыми разбиениями на подсистемы, должны появляться после того, как цепочка операций началась с решения задачи (3) для некоторого начального M_0 . Это не исключает возможности включать некоторые операторы (5) в список основных макроскопических величин M . Стандартный пример такого включения – использование частичных функций распределения в качестве макропеременных при переходе от уравнения Лиувилля к кинетическим уравнениям.

Необратимость связана с ограничениями на выбор начальных состояний. Само множество макроскопически определимых ансамблей определяется тремя объектами:

- 1) набором макропеременных M – линейным (и в подходящей топологии непрерывным) отображением фазового пространства на пространство значений макропеременных;
- 2) макроскопически допустимыми разбиениями системы на подсистемы;
- 3) уравнениями микродинамики (Лиувилля).

Выбор макропеременных и макроскопически допустимых разбиений – особая тема. Здесь они выступают как формальные элементы конструкции, а произвол в выборе устраняется только при решении конкретных задач.

² Естественно, любая линейная функция от макропеременных является макропеременной.

1.4. Необратимость и начальные условия

В гипотезе о макроскопически определимых ансамблях важнейшую роль играет выбор начального состояния ансамбля. Им всегда является квазиравновесное распределение, реализующее максимум энтропии при заданных значениях макроскопических величин. Выбор начального состояния разделяет временную ось на два луча – и в движении вперед по времени и в движении назад видимая неупорядоченность возрастает (простейший пример – смешивание шариков разного цвета).

В ряде работ для достижения «истинной неравновесности» – необратимого движения вдоль всей оси времени – квазиравновесное начальное состояние отодвигают в $-\infty$ по времени. Этот прием вызывает ряд сомнений. Главное из них: почти для всех известных макроскопических уравнений, описывающих необратимые процессы, решения могут быть продолжены назад только на конечное время (или вовсе не могут): уравнение Больцмана, уравнение диффузии, уравнения химической кинетики и др. не допускают неограниченного продолжения назад произвольных решений. Движения имеют «точку начала», за которой теряется какое-либо физическое свойство (часто – положительность), хотя формально решение может и существовать (как для уравнений химической кинетики).

1.5. Слабое начальное стремление к равновесию, встряхивание и ограниченная (короткая) память

Один аспект необратимости – специальный выбор начальных условий. Стрела времени, грубо говоря, определяется тем, что квазиравновесное начальное условие было в прошлом.

Этим обескураживающе простым замечанием проблема перехода от обратимых уравнений микроописания к необратимым макроскопическим уравнениям не исчерпывается. Еще один аспект заслуживает серьезного обсуждения. Функции распределения в макроскопических уравнениях стремятся к равновесным в сильном смысле: отклонение их от равновесия стремится к нулю в большинстве осмысленных норм (например, в L_1 или даже равномерно). Напротив, для уравнения Лиувилля стремление к равновесию происходит (если происходит) только в слабом смысле –

средние значения достаточно хороших функций на фазовом пространстве стремятся к своим равновесным значениям, но сама плотность распределения не стремится к равновесной ни по норме, ни даже поточечно.

Это обстоятельство особенно легко представить себе в тех случаях, когда начальное распределение было равномерным по какому-то ограниченному подмножеству фазового пространства («фазовая капля»). Эта фазовая капля может размещаться по фазовому пространству, но все время будет оставаться «маслом в воде»: плотность будет принимать только два фиксированных значения, 0 и $p > 0$; объем множества, на котором плотность больше нуля, естественно, не меняется.

Как перейти от слабого (в смысле сходимости средних) к сильному (например, L_1 или равномерному) стремлению к равновесию? Здесь есть две базовых конструкции: огрубление (встряхивание) по Эренфестам и приближение ограниченной (короткой) памяти.

Идея огрубления была высказана П. и Т. Эренфестами в их знаменитой статье 1911 года. Они рассматривали разбиение фазового пространства на мелкие ячейки, предлагали чередовать периоды движения фазового ансамбля в соответствии с уравнениями Лиувилля и «встряхивания» – усреднения плотности ансамбля по ячейкам фазового пространства. В результате этого процесса стремление к равновесию из слабого становится сильным.

Нетрудно заметить, что ансамбли с плотностями, постоянными внутри ячеек, являются квазиравновесными: соответствующие макропеременные – интегралы от плотности по ячейкам («числа частиц» в ячейках). Отсюда приходим к такому обобщению встряхиваний - чередуются два типа движений:

- 1) движения ансамбля в соответствии с микроскопическими уравнениями в течение некоторого времени;
- 2) мгновенное возвращение на квазиравновесное многообразие (с сохранением значений макропеременных).

Именно эта конструкция послужит отправной точкой многих дальнейших построений.

Другая конструкция – приближение ограниченной (затухающей, короткой...) памяти. Суть ее в следующем: если исключить микропеременные и предположить начальные условия квазиравновесными, то можно получить для макропеременных интегро-дифференциальные уравнения с запаздыванием (причем существенно неединственным образом). Примерный вид таких уравнений

$$M(t) = \int_0^t K(t, t') [M(t')] dt',$$

где $K(t, t')$ – некоторый (вообще говоря, нелинейный) оператор, действующий на $M(t')$. После этого предполагается, что ядра этих интегро-дифференциальных уравнений достаточно быстро (например, экспоненциально) затухают в прошлое, например $\|K(t, t')[M(t')]\| \leq \exp\{-\lambda(t - t')/\tau\} \|M(t')\|$.

Это можно трактовать и в духе Эренфестов: Всякое движение достаточно недавно («время памяти τ тому назад») может считаться стартовавшим от квазиравновесного состояния. Тем самым можно после прохождения каждого времени памяти τ встряхивать систему по Эренфестам – результат существенно не должен меняться.

1.6. Существо необратимости в двух словах

1. Направление стрелы времени определяется тем, что в качестве начальных условий могут выбираться только «макроскопически определимые» ансамбли – квазиравновесные ансамбли и то, что можно получить из них с помощью естественного хода динамики и взятия частичных квазиравновесий на положительных временах. Это *мы* устроены так, что конструируем и (частично) контролируем настоящее и наблюдаем, что произойдет в результате в будущем. (В каком-то смысле это и есть определение субъективного времени).

2. Микроскопическая динамика может приводить только к слабому стремлению к равновесию – стремлению средних значений. Макроскопические функции распределения стремятся к равновесию в сильном смысле. Переход от микро- к макро- здесь совершается с помощью процедуры встряхивания по Эренфестам или ее аналогов.

В отличие от первого пункта здесь остается неудовлетворенность, связанная с произволом при введении этой процедуры. Единственная надежда на устранение этого произвола состоит в том, что, возможно, в пределе очень большого числа частиц возмущающее действие встряхиваний может быть сделано сколь угодно малым, например, за счет увеличения интервалов между ними (при сохранении усредненной микроскопической картины).

1.7. Эквивалентность траекторий и ансамблей в термодинамическом пределе

В предыдущих (и последующих) разделах речь идет о динамике ансамблей. Это находится в видимом противоречии с тем, что динамика классической системы – это одна траектория. Два аргумента позволяют перейти от траекторий к ансамблям:

- 1) высокая чувствительность траекторий к внешним возмущениям при большом числе частиц: сколь угодно малый шум приводит к стохастизации движения;
- 2) возможность разбиения системы на сколь угодно большое (в термодинамическом пределе) число одинаковых и все еще макроскопических подсистем. Начальные условия в подсистемах независимы и не могут быть назначены произвольно, но только выбираются из какого-либо распределения с фиксированной суммой средних значений (аналог макроскопической определенности ансамблей). Значения макроскопических величин в таких системах не отличаются от средних по ансамблю (эквивалентность траекторий и ансамблей в термодинамическом пределе). Для пространственно неоднородных систем такие малые, но макроскопические и сколь угодно делимые подсистемы выделяются в малых «почти однородных» объемах. При этом подсистемы все еще достаточно велики, чтобы пренебречь микроскопическими корреляциями между ними.

1.8. Субъективное время и необратимость

В приведенном рассмотрении источником однонаправленности времени служит, в конечном итоге, несимметричность субъективного времени экспериментатора. Мы *готовим* начальные условия и смотрим, что *будет потом*, а не было прежде. Уравнения кинетики мы, тем самым, получаем для специально приготовленных систем. Какое отношение это имеет к динамике мира? Эти уравнения применимы к реальным системам ровно настолько, насколько реальность можно моделировать с помощью систем со специально подготовленными квазиравновесными начальными условиями. Это все равно менее обременительно, чем условие квазистатичности процессов в классической термодинамике. Поэтому варианты неравновесной термодинамики и кинетики, основанные на таком понимании необратимости, позволяют расширить класс моделируемых ситуаций. Кроме того, на этом пути могут быть получены все классические уравнения неравновесной термодинамики и кинетики.

2. КВАЗИРАВНОВЕСИЕ

2.1. Квазиравновесное многообразие

Пусть задано линейное пространство E , в нем выпуклое множество U с непустой внутренностью $\text{int } U$, а на U – дважды дифференцируемый в $\text{int } U$, непрерывный в U выпуклый вверх (т.е. вогнутый) функционал S . Обычная интерпретация: S – энтропия, E – подходящее пространство распределений, U – конус неотрицательных распределений из E . E выбирается таким, чтобы на U была определена энтропия.

Пусть в E задано замкнутое, линейное подпространство L и $m: E \rightarrow E/L$ – естественная проекция на фактор-пространство. Пространство E/L будет играть роль пространства макроскопических переменных (моментов распределения).

Для каждого $M \in \text{int } U/L$ определяем $f_M^* \in \text{int } U$ как решение задачи

$$S(f) \rightarrow \max, \quad m(f) = M. \quad (6)$$

Предполагается, что для любого $M \in \text{int } U/L$ существует (единственное) решение (6) $f_M^* \in \text{int } U$. Оно называется *квазиравновесным*, соответствующим значению макроскопических переменных M . Множество квазиравновесий f_M^* образует многообразие в $\text{int } U$, параметризованное значениями макропеременных $M \in \text{int } U/L$.

Уточним некоторые обозначения:

E^T – сопряженное к E пространство (сопряженные пространства и операторы будем обозначать символом T , зарезервировав * для равновесий и квазиравновесий).

$[l, x]$ – результат действия функционала $l \in E^T$ на вектор $x \in E$.

$D_f S(f) \in E^T$ – дифференциал $S(f)$.

$D_f^2 S(f)$ – второй дифференциал $S(f)$, квадратичный функционал $D_f^2 S(f)(x, x)$ на E , определяемый по формуле Тейлора:

$$S(f+x) = S(f) + [D_f S(f), x] + \frac{1}{2} D_f^2 S(f)(x, x) + o(\|x\|^2). \quad (7)$$

Соответствующую симметричную билинейную форму будем также обозначать $D_f^2 S(f)(x, y)$; то же обозначение сохраним для линейного оператора $D_f^2 S(f): E \rightarrow E^T$, определяемого по формуле $[D_f^2 S(f) x, y] = D_f^2 S(f)(x, y)$ (справа – оператор, слева – билинейная форма). Оператор $D_f^2 S(f)$ симметричен: на E $D_f^2 S(f)^T = D_f^2 S(f)$.

Напомним, что для оператора $A: E_1 \rightarrow E_2$ сопряженный оператор $A^T: E_2^T \rightarrow E_1^T$ определяется соотношением: $[l, Ax] = [A^T l, x]$ для всех $l \in E_2^T, x \in E_1$.

Вогнутость S означает, что для любого $x \in E$ выполняется неравенство $D_f^2 S(f)(x, x) \leq 0$; в ограничении на аффинные пространства, параллельные L , обычно дополнительно предполагается строгая вогнутость: $D_f^2 S(f)(x, x) < 0$ при $x \in L, x \neq 0$.

Оговорим здесь степень строгости: высказываемые утверждения в конкретных ситуациях становятся теоремами или правдоподобными гипотезами. Более того, конкретизация всегда проводится с оглядкой на эти утверждения – так, чтобы их было проще доказывать.

Найдем $D_M f_M^*$. Воспользуемся методом множителей Лагранжа: существует такой линейный функционал $\Lambda(M) \in (E/L)^T$, что

$$D_f S(f)|_{f_M^*} = \Lambda(M) m, \quad m(f_M^*) = M \quad (8)$$

или

$$D_f S(f)|_{f_M^*} = m^T \Lambda(M), \quad m(f_M^*) = M. \quad (9)$$

Из второго уравнения получаем

$$m(D_M f_M^*) = 1_{(E/L)} \quad (10)$$

(индексом при 1 обозначено пространство, в котором действует единичный оператор). Используя это соотношение, преобразуем продифференцированное первое уравнение. Получаем:

$$D_M \Lambda = (m(D_f^2 S)_{f_M^*}^{-1} m^T)^{-1}, \quad (11)$$

и, соответственно,

$$D_M f_M^* = (D_f^2 S)_{f_M^*}^{-1} m^T (m(D_f^2 S)_{f_M^*}^{-1} m^T)^{-1}. \quad (12)$$

Заметим, что всюду в (12) оператор $(D_f^2 S)_{f_M^*}^{-1}$ действует на линейные функционалы из $\text{Im } m^T = \text{Ann } L$. Это в точности те функционалы, которые обращаются в 0 на L (т.е. на $\ker m$), или, что то же самое, могут быть представлены как функционалы от макроскопических переменных.

$\text{Ann } L$ обозначает множество линейных функционалов, обращающихся в 0 на L .

Касательное пространство к квазиравновесному многообразию в точке f_M^* – это образ оператора $D_M f_M^*|_M$:

$$\text{Im}(D_M f_M^*) = (D_f^2 S|_{f_M^*})^{-1} \text{Im } m^T = (D_f^2 S|_{f_M^*})^{-1} \text{Ann} L. \quad (13)$$

Другой вариант записи (2.7):

$$x \in \text{Im}(D_M f_M^*) \Leftrightarrow D_f^2 S|_{f_M^*}(x, y) = 0 \text{ при } y \in L \quad (14)$$

Это означает, что $\text{Im}(D_M f_M^*)$ является ортогональным дополнением в E к L в скалярном произведении

$$\langle x | y \rangle_{f_M^*} = -D_f^2 S|_{f_M^*}(x, y). \quad (15)$$

Энтропийное скалярное произведение (15) будет часто встречаться в дальнейших построениях. (Как правило, оно действительно является скалярным произведением после исключения некоторых законов сохранения.)

Будем обозначать касательное пространство $T_{f_M^*} = \text{Im}(D_M f_M^*)$. Важную роль в построении квазиравновесной динамики и ее обобщений играет квазиравновесный проектор, проектирующий E на $T_{f_M^*}$ параллельно L . Это ортогональный проектор в энтропийном скалярном произведении: $\pi_{f_M^*} : E \rightarrow T_{f_M^*}$

$$\pi_{f_M^*} = (D_M f_M^* |_M) m = (D_f^2 S|_{f_M^*})^{-1} m^T (m (D_f^2 S|_{f_M^*})^{-1} m^T)^{-1} m. \quad (16)$$

Равенство $\pi_{f_M^*}^2 = \pi_{f_M^*}$ и самосопряженность в энтропийном скалярном произведении (15) легко проверяются непосредственно.

Итак, мы ввели основные конструкции: квазиравновесное многообразие, энтропийное скалярное произведение и квазиравновесный проектор.

2.2. Термодинамический проектор

Конструкция квазиравновесного многообразия допускает обобщения: почти любое многообразие можно представить как множество точек условного максимума энтропии при линейных ограничениях, только сами эти ограничения уже будут зависеть от точки.

Пусть задано многообразие $\{f_M\} \subset U$, параметризованное значениями макропеременных M . Подчеркнем, что теперь M – не функционалы на всем R (или U), а только параметры, задающие точку на многообразии. Задача состоит в том, чтобы правильно доопределить M в окрестности f_M так, чтобы f_M было решением задачи

$$S(f) \rightarrow \max, \quad m(f) = M. \quad (17)$$

Для каждой точки f_M определим касательное подпространство $T_M \subset E$ к многообразию $\{f_M\}$ и подпространство $L_M \subset E$, гладко зависящее от M и обладающее тем свойством, что $L_M \oplus T_M = E$. Определим $M(f)$ в окрестности f_M таким образом:

$$M(f) = M, \text{ если } f - f_M \in L_M. \quad (18)$$

Точка f_M будет решением задачи о квазиравновесии (17) тогда и только тогда, когда

$$D_f S(f)|_{f_M} \in \text{Ann } L_M. \quad (19)$$

То есть $L_M \subset \ker D_f S(f)|_{f_M}$.

Построить такое поле подпространств L_M возможно (по крайней мере, локально), если функционал $D_f S(f)|_{f_M}$ не обращается тождественно в 0 на T_M ни при каком M .

Описанная конструкция, позволяющая рассматривать практически любое многообразие как квазиравновесное, необходима при определении индуцированной динамики на заданном многообразии: векторные поля проецируются на T_M параллельно L_M . При этом сохраняются основные свойства квазиравновесных приближений.

2.3. Квазиравновесное приближение

Пусть в U задано кинетическое уравнение

$$\frac{df}{dt} = J(f). \quad (20)$$

(Это могут быть уравнения Лиувилля, Больцмана и т.д. – в зависимости от детальности исходного микроскопического описания.)

Нужно определить динамику макроскопических переменных $M(f)$. Если принять гипотезу о том, что интересующие нас решения (20) начинаются на квазиравновесном многообразии и все время остаются вблизи него, то в качестве нулевого приближения можно выбрать квазиравновесное: считая f квазиравновесным, запишем

$$\frac{dM}{dt} = m(J(f_M^*)). \quad (21)$$

При этом соответствующая M точка на квазиравновесном многообразии движется согласно уравнению

$$\frac{df_{M(t)}^*}{dt} = (D_M f_M^*) m(J(f_M^*)) = \pi_{f_M^*} J(f_M^*) \quad (22)$$

где $\pi_{f_M^*}$ – квазиравновесный проектор (16).

Полезно представить решение уравнений квазиравновесного приближения (22) следующим образом. Пусть $T_\tau(f)$ – преобразование фазового потока (20) ($T_\tau(f)$ – решение (20) в момент $t = \tau$ с начальными условиями f в момент $t = 0$).

Возьмем начальную точку $f_0 = f_{M_0}^*$; положим $f_{1/2} = T_\tau(f_0)$, $M_1 = m(f_{1/2})$, $f_1 = f_{M_1}^*$, ..., $f_{n+1/2} = T_\tau(f_n)$, $M_{n+1} = m(f_{n+1/2})$, ... Последовательность f_n назовем *цепью Эренфестов*. Положим

$$f_\tau(n\tau) = f_n.$$

Тогда $f_\tau(t) \rightarrow f(t)$, где $f(t)$ – решение (22), $\tau \rightarrow 0$, $n \rightarrow \infty$, $n\tau = t$.

Заметим, что изменение энтропии в цепи Эренфестов определяется в пределе $\tau \rightarrow 0$ только ее изменением вдоль траекторий исходного кинетического уравнения (20). Действительно, f_M^* – точка максимума энтропии на подпространстве, задаваемом уравнением $m(f) = M$. Поэтому, для

$$S(f_{n+1/2}) - S(f_{n+1}) = o(\|f_{n+1/2} - f_{n+1}\|) = o(\tau);$$

$$\sum_n |S(f_{n+1/2}) - S(f_{n+1})| = o(n\tau) \rightarrow 0 \text{ при } \tau \rightarrow 0, n \rightarrow \infty, n\tau = \text{const.}$$

Из этого простого наблюдения следует важное тождество: определим $dS(f)/dt$ – производную энтропии в силу исходного уравнения (20) и $(dS(f_M^*)/dt)_1$ – ее производную в силу квазиравновесной системы (22). Тогда

$$(dS(f_M^*)/dt)_1 = dS(f)/dt \Big|_{f=f_M^*}. \quad (23)$$

Дадим еще одну формулировку этого тождества. *Квазиравновесной энтропией* $S(M)$ назовем $S(f_M^*)$. Обозначим $dS(M)/dt$ производную квазиравновесной энтропии в силу квазиравновесного приближения (21). Тогда

$$\frac{dS(M)}{dt} = \frac{dS(f)}{dt} \Big|_{f=f_M^*}. \quad (24)$$

Из тождества (23) следует *теорема о сохранении типа динамики*:

1. Если для исходного кинетического уравнения (20) $dS(f)/dt = 0$ при $f = f_M^*$, то для квазиравновесной системы (22) энтропия сохраняется.
2. Если для исходного кинетического уравнения (20) $dS(f)/dt \geq 0$ при $f = f_M^*$, то в тех же точках, f_M^* , $dS(f)/dt \geq 0$ в силу (22).

Теорема о сохранении типа динамики показывает, что если диссипации нет в исходной системе (20) (энтропия сохраняется), то ее нет и для квазиравновесного приближения. Переход к квазиравновесию не вносит необратимости (бывает даже наоборот – в квазиравновесном приближении для гидродинамических переменных, полученном из уравнения Больцмана, диссипации нет, хотя в исходном уравнении она есть – в других точках, но на квазиравновесном многообразии локально максвелловских распределений производство энтропии обращается в 0).

Такое же утверждение о сохранении типа динамики верно и для термодинамических проекторов, описанных в разделе 2.2.

Истинная динамика (20), как правило, не сохраняет квазиравновесное многообразие – векторное поле $J(f)$ не является касательным к квазиравновесному многообразию в точках f_M^* : не выполняется *условие инвариантности*

$$(1 - \pi_{f_M^*}) J(f_M^*) = 0. \quad (25).$$

Правая часть (2.19) настолько важна, что заслуживает отдельного имени. Назовем ее *дефектом инвариантности* и обозначим $\Delta_{f_M^*}$. Можно рассматривать (25) как уравнение и вычислять поправки к f_M^* с тем, чтобы делать его «более инвариантным». В тех случаях, когда исходное уравнение (20) уже диссипативно, этот путь с использованием конструкций раздела 2.2 приводит к приемлемой макрокинетике.

Однако в данной работе нас интересует путь «с самого начала» – от консервативных систем к диссипативным. И здесь решение уравнений инвариантности (25) не поможет – оно приведет к более инвариантной, но все еще консервативной динамике.

Во всех подходах к решению этой проблемы (перехода от консервативных систем к диссипативным) диссипация вводится более или менее явно с помощью различных предположений о «короткой памяти».

Отправной точкой для наших построений будет абсолютно ясный и явный подход Эренфестов.

3. НАТУРАЛЬНЫЙ ПРОЕКТОР И МОДЕЛИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ДВИЖЕНИЙ

3.1. Натуральный проектор

Итак, пусть исходная система (20) консервативна $dS(f)/dt = 0$. Исходная идея: рассматривать систему (20) со «встряхиваниями». Встряхивания – это внешние возмущения, повторяющиеся через фиксированный интервал времени и приводящие к «забыванию» мелкомасштабных (неравновесных) деталей динамики. Для нас встряхивание – это замена f на соответствующее квазиравновесное распределение $f_{m(f)}^*$. В том частном случае, который рассматривался в работе Эренфестов, макропеременные $m(f)$ представляли собой средние значения f по ячейкам в фазовом пространстве, а $f_{m(f)}^*$ соответствовало равномерному распределению внутри ячеек при сохранении средних по ячейкам. Как уже отмечалось, в пределе $\tau \rightarrow 0$ получается квазиравновесное приближение (проекция на квазиравновесное многообразие) – и тип динамики сохраняется. В этом пределе получаем обычную проекцию векторного поля (20) на касательное пространство к квазиравновесному многообразию. Возникает естественный вопрос: а что, если не стремиться τ к нулю, а рассматривать конечные или даже большие τ ? При таком подходе будут проектироваться не векторные поля, а отрезки траекторий. Будем называть такое проектирование *натуральным*. Поставим задачу о натуральном проекторе формально. Пусть – $T_t(f)$ фазовый поток исходной системы (20). Необходимо определить макроскопический фазовый поток $\Theta_t(M)$ (поток искомой макроскопической системы $dM/dt = F(M)$) таким образом, чтобы для любого M

$$m(T_\tau(f_M^*)) = \Theta_\tau(M). \quad (26)$$

То есть, двигаясь время τ по макроскопической траектории, мы придем к тому же макроскопическому результату, как если бы двигались в течение времени τ по истинной траектории, начиная с квазиравновесных начальных условий.

Интересно, что при конечных τ рост энтропии следует сразу из (26), так как $S(f) < S(f_{m(f)}^*)$. Разность имеет порядок $\|f - f_{m(f)}^*\|^2$ за время τ , то есть первый не исчезающий диссипативный член в производстве энтропии будет иметь порядок τ^2 . Найдем его.

Будем искать F в виде ряда по τ . Разложим F и обе части (26) по τ до второго порядка включительно, и найдем коэффициенты разложения F .³

$$\begin{aligned} T_\tau(f_0^*) &= f_0 + df/dt|_{f_0} \tau + d^2f/dt^2|_{f_0} (\tau^2/2) + o(\tau^2), \\ \Theta_\tau(M_0) &= M_0 + dM/dt|_{M_0} \tau + d^2M/dt^2|_{M_0} (\tau^2/2) + o(\tau^2), \\ df/dt|_{f_0} &= J(f_0); \quad d^2f/dt^2|_{f_0} = D_f J(f)|_{f_0} J(f_0); \\ dM/dt|_{M_0} &= F(M_0); \quad d^2M/dt^2|_{M_0} = D_M F(M)|_{M_0} F(M_0); \\ F(M) &= F_0(M) + \tau F_1(M) + o(\tau). \end{aligned}$$

Уравнение натурального проектирования (26) принимает вид:

$$\begin{aligned} f_0 &= f_{M_0}^*; \\ m(f_0) + \tau m(J(f_0)) + (\tau^2/2) D_f J(f)|_{f_0} J(f_0) + o(\tau^2) &= \\ &= M_0 + \tau F_0(M_0) + \tau^2 F_1(M_0) + (\tau^2/2) D_M F_0(M)|_{M_0} F_0(M_0). \end{aligned}$$

Отсюда:

$$\begin{aligned} F_0(M) &= m(J(f_M^*)); \\ F_1(M) &= (1/2) \{m(D_f J(f)|_{f_M^*} J(f_M^*)) - D_M F_0(M)|_M F_0(M)\}. \end{aligned}$$

Подставляя в выражение для F_1 найденное (квазиравновесное) F_0 , получаем:

$$\begin{aligned} F_1(M) &= (1/2) \{m(D_f J(f)|_{f_M^*} J(f_M^*)) - m(D_f J(f)|_{f_M^*} D_M f_M^*) m(J(f_M^*))\} = \\ &= (1/2) m(D_f J(f)|_{f_M^*} \{J(f_M^*) - D_M f_M^* m(J(f_M^*))\}) = \\ &= (1/2) m(D_f J(f)|_{f_M^*} [1 - \pi_{f_M^*}] J(f_M^*)) = \\ &= (1/2) m(D_f J(f)|_{f_M^*} \Delta_{f_M^*}). \end{aligned}$$

Окончательно получаем уравнение для M :

$$dM/dt = F(M) = m(J(f_M^*)) + (\tau/2) m(D_f J(f)|_{f_M^*} \Delta_{f_M^*}) + o(\tau^2). \quad (27)$$

Примечательно появление дефекта инвариантности в втором члене (27): если квазиравновесное многообразие инвариантно, то $F(M)$ – квазиравновесно.

Найдем производство квазиравновесной энтропии $S(M) = S(f_M^*)$ для уравнений $dM/dt = F(M)$ с правой частью (27):

³ В известной работе Льюиса [2], к сожалению, содержится неточность – он раскладывал только правую часть до второго порядка и получил в результате

$$dS(f_M^*)/dt = (\tau/2) D_f S(f)|_{f_M^*} \pi_{f_M^*} D_f J(f)|_{f_M^*} \Delta_{f_M^*}.$$

Заметим, что

$$D_f S(f)|_{f_M^*} \pi_{f_M^*} = D_f S(f)|_{f_M^*},$$

так как $\pi_{f_M^*}$ – проектор и $\ker \pi_{f_M^*} \subset \ker D_f S(f)|_{f_M^*}$.

В силу консервативности исходной системы для уравнения (20) энтропия сохраняется:

$$dS(f)/dt = D_f S(f)|_f J(f) \equiv 0.$$

Продифференцируем это тождество по f :

$$D_f^2 S(f)|_f J(f) + D_f S(f)|_f D_f J(f)|_f = 0. \quad (28)$$

Таким образом, в силу уравнений $dM/dt = F(M)$ с правой частью (27)

$$\begin{aligned} \frac{dS(f_M^*)}{dt} &= (\tau/2) D_f S(f)|_{f_M^*} D_f J(f)|_{f_M^*} \Delta_{f_M^*} = \\ &= -(\tau/2) (D_f^2 S(f)|_{f_M^*} J(f_M^*)) \Delta_{f_M^*} = \\ &= (\tau/2) \langle J(f_M^*) | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*}, \end{aligned}$$

где использовано энтропийное скалярное произведение (15). Наконец,

$$\Delta_{f_M^*} = (1 - \pi_{f_M^*}) J(f_M^*) = (1 - \pi_{f_M^*})^2 J(f_M^*),$$

а проектор $\pi_{f_M^*}$ самосопряжен в энтропийном скалярном произведении $\langle | \rangle_{f_M^*}$.

Поэтому $\langle J(f_M^*) | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*} = \langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*}$ и

$$\frac{dS(f_M^*)}{dt} = (\tau/2) \langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*} \geq 0. \quad (29)$$

Таким образом, квазиравновесная энтропия растет в тех точках, где дефект инвариантности квазиравновесного приближения не равен нулю.

Мы видим, как представление о натуральном проекторе (проектируются не векторные поля, а отрезки траекторий) приводит к диссипативным уравнениям. В конкретных примерах второе слагаемое в (27) дает и вязкость для уравнений Навье-Стокса, и диффузию, и многие другие диссипативные слагаемые. Однако остается неопределенный коэффициент – τ . Формула (29) дает производство энтропии

абсурдный ответ.

пропорционально промежутку времени между встряхиваниями. Естественно, это может быть верно только при малых τ , а нас, в конечном итоге, более всего интересует предел $\tau \rightarrow \infty$ – только в этом пределе можно избавиться от произвола в (27, 29). Для этого потребуется более подробно изучить структуру траекторий, начинающихся на квазиравновесном многообразии.

3.2. Одномерная модель неравновесных состояний

При обсуждении вывода уравнений неравновесной кинетики часто присутствует («витает в воздухе») такая картина: Над каждой точкой квазиравновесного многообразия расположено огромное пространство неравновесных распределений с теми же значениями макропеременных M . Движение как бы распадается на две проекции: над точкой квазиравновесного многообразия и в проекции на него – и в каждом слое, что над точкой, все быстро «устанавливается».

Однако, при внимательном рассмотрении движений, имеющих квазиравновесные начальные условия, мы обнаружим, что над каждой точкой квазиравновесного многообразия расположена всего-навсего кривая – одномерное многообразие, и все возникающие неравновесные состояния расположены на этой кривой. Именно построением этой кривой мы и займемся в данном разделе.

Для каждого значения макропеременных M и каждого момента времени $\tau > 0$ определим $M_{-\tau}$ следующим равенством:

$$m(T_{\tau}(f_{M_{-\tau}}^*)) = M. \quad (30)$$

$M_{-\tau}$ – это такое значение макропеременных, что для натурального проектора (26) $\Theta_{\tau}(M_{-\tau}) = M$. Естественно, возможно, что такое $M_{-\tau}$ существует не для всех пар (M, τ) , однако, мы будем предполагать, что для каждого M найдется такое $\tau_M > 0$, что при $0 < \tau < \tau_M$ существует $M_{-\tau}$.

Множество $q_{M,\tau} = T_{\tau}(f_{M_{-\tau}}^*)$ для данного M и образует искомую кривую неравновесных состояний с данными значениями M . Заметим, что для всех τ $m(q_{M,\tau}) = M$.

Множество $\{q_{M,\tau}\}$ (для всех возможных $M, \tau > 0$) положительно инвариантно – движения системы (20), начавшись на нем при некотором t_0 , остаются там и при $t > t_0$. Уравнения движения в координатах M, τ выглядят весьма просто (если известна зависимость $q_{M,\tau}$):

$$\frac{d\tau}{dt} = 1, \quad (30)$$

$$\frac{dM}{dt} = m(J(q_{M,\tau})).$$

Простейший путь изучения зависимости $q_{M,\tau}$ – это построение последовательности ее производных по τ при данном M . Первая производная выписывается сразу:

$$\left. \frac{dq_{M,\tau}}{d\tau} \right|_{\tau=0} = J(f_M^*) - \pi_{f_M^*} J(f_M^*) = \Delta_{f_M^*}. \quad (32)$$

По построению квазиравновесного многообразия для любого $x \in L$ (напомним $L = \ker m$)

$$S(f_M^* + \tau x) = S(f_M^*) - \tau^2 \langle x | x \rangle_{f_M^*} + o(\tau^2).$$

Поэтому,

$$S(q_{M,\tau}) = S(f_M^*) - \tau^2 \langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*} + o(\tau^2).$$

Итак, в первом порядке по τ имеем: $q_{M,\tau} = f_M^* + \tau \Delta_{f_M^*} + o(\tau)$.

Найдем $q_{M,\tau}$ с точностью до $o(\tau^2)$. Разложим с точностью до $o(\tau^2)$ все функции, входящие в (30):

$$M_{-\tau} = M - \tau m(J(f_M^*)) + \tau^2 B(M) + o(\tau^2),$$

где B неизвестно;

$$f_{M_{-\tau}}^* = f_M^* - \tau D_M f_M^*|_M m(J(f_M^*)) + \tau^2 D_M f_M^*|_M B + (\tau^2/2) A_2(M) + o(\tau^2),$$

где

$$A_2(M) = \left. \frac{d^2 f_{M+tm(J(f_M^*))}^*}{dt^2} \right|_{t=0}; \quad (33)$$

$$T_\tau(x + \tau\alpha) = x + \tau\alpha + \tau J(x) + \tau^2 D_x J(x)|_x \alpha + (\tau^2/2) D_x J(x)|_x J(x) + o(\tau^2);$$

$$T_\tau(f_{M_{-\tau}}^*) = f_M^* - \tau D_M f_M^*|_M m(J(f_M^*)) + \tau^2 D_M f_M^*|_M B(M) + (\tau^2/2) A_2(M) +$$

$$+ \tau J(f_M^*) - \tau^2 D_f J(f)|_{f_M^*} D_M f_M^*|_M m J(f_M^*) +$$

$$+ (\tau^2/2) D_f J(f)|_{f_M^*} J(f_M^*) + o(\tau^2) =$$

$$= f_M^* + \tau \Delta_{f_M^*} + (\tau^2/2) A_2(M) + (\tau^2/2) D_f J(f)|_{f_M^*} (1 - 2\pi_{f_M^*}) J(f_M^*) +$$

$$+ \tau^2 D_M f_M^* |_{M} B(M) + o(\tau^2).$$

Под действием m , в силу (30), последнее выражение заметно упрощается:

$$m(A_2(M)) = d^2[M + tm(J(f_M^*))]/dt^2 = 0;$$

$$m(1 - \pi_{f_M^*}) = 0;$$

$$m(D_M f_M^* |_{M}) = 1.$$

Поэтому,

$$m(T_\tau(f_M^*)) = M + (\tau^2/2)m(D_f J(f)|_{f_M^*} (1 - 2\pi_{f_M^*}) J(f_M^*)) + \tau^2 B(M) + o(\tau^2)$$

и

$$B(M) = (1/2) m(D_f J(f)|_{f_M^*} (2\pi_{f_M^*} - 1) J(f_M^*)).$$

В соответствии с этим во втором порядке по τ :

$$\begin{aligned} q_{M,\tau} &= T_\tau(f_{M-\tau}^*) = \\ &= f_M^* + \tau \Delta_{f_M^*} + (\tau^2/2)A_2(M) + \\ &+ (\tau^2/2)(1 - \pi_{f_M^*}) (D_f J(f)|_{f_M^*} (1 - 2\pi_{f_M^*}) J(f_M^*)) + o(\tau^2). \end{aligned} \quad (34)$$

Отметим, что кроме динамической составляющей в q появляется также слагаемое $A_2(M)$, связанное с кривизной квазиравновесного многообразия вдоль квазиравновесных траекторий.

Рассмотрим, как ведет себя функционал производства квазиравновесной энтропии в окрестности f_M^* . Пусть $x \in L$ (т.е. $m(x) = 0$). Производство квазиравновесной энтропии $\sigma_M^*(x)$ по определению равно:

$$\sigma_M^*(x) = D_M S(f_M^*) |_{M} m(J(f_M^* + x)). \quad (35)$$

Оно описывает изменение энтропии при движении проекции точки на квазиравновесное многообразие, если истинная траектория проходит через точку $f_M^* + x$.

Воспользуемся тем, что в точке f_M^* подпространство $\ker D_f S(f)$ включает L и поэтому $D_f S(f)|_{f_M^*} \pi_{f_M^*} = D_f S(f)|_{f_M^*}$. Выражение (35) можно представить в виде:

$$\sigma_M^*(x) = D_f S(f)|_{f_M^*} (J(f_M^* + x) - J(f_M^*)). \quad (36)$$

В линейном приближении по x имеем .

$$\sigma_M^*(x) = D_f S(f)|_{f_M^*} D_f J(f)|_{f_M^*} x. \quad (37)$$

Поскольку рассматривается консервативная система, верно тождество $D_f S(f)|_f J(f) \equiv 0$. Дифференцируя его по f , получаем:

$$D_f^2 S(f)|_f J(f) + D_f S(f)|_f D_f S(f)|_f = 0,$$

откуда

$$\sigma_M^*(x) = -D_f^2 S(f)|_{f_M^*} (J(f_M^*), x) = \langle J(f_M^*) | x \rangle_{f_M^*}. \quad (38)$$

Поскольку $x \in L$, $(1 - \pi_{f_M^*})x = x$,

$$\begin{aligned} \langle J(f_M^*) | x \rangle_{f_M^*} &= \langle J(f_M^*) | (1 - \pi_{f_M^*})x \rangle_{f_M^*} = \\ &= \langle (1 - \pi_{f_M^*})J(f_M^*) | x \rangle_{f_M^*} = \langle \Delta_{f_M^*} | x \rangle_{f_M^*}. \end{aligned}$$

Окончательно в линейном по x приближении

$$\sigma_M^*(x) = \langle \Delta_{f_M^*} | x \rangle_{f_M^*}. \quad (39)$$

3.3. Устойчивость квазиравновесного многообразия

Определение устойчивости инвариантного многообразия не вызывает особых трудностей: оно устойчиво если, для любого $\varepsilon > 0$ найдется такое $\delta > 0$, что, начавшись при $t = 0$ на расстоянии, меньшем δ , от многообразия, движение не уйдет от него при $t > 0$ дальше, чем на ε .

Для неинвариантного многообразия это уже не так, и вряд ли возможно дать однозначную формализацию такого представления об *устойчивости квазиравновесного многообразия*: начавшись в его достаточно малой окрестности, движение не уйдет слишком далеко. Действительно, что здесь «в достаточно малой» и что такое «слишком далеко»? Тем не менее, выражение (34) дает нам такую возможность. Действительно, рассмотрим, как производство энтропии зависит от τ , т.е. исследуем функцию

$$\sigma_M(\tau) = \langle \Delta_{f_M^*} | q_{M,\tau} \rangle_{f_M^*}. \quad (40)$$

Естественно ожидать, что $\sigma_M(\tau)$, возрастая вначале, потом выходит на насыщение.

Вопрос, однако, в начальном этапе динамики – выпукла функция $\sigma_M(\tau)$ вверх или вниз в точке $\tau = 0$. Если $d^2 \sigma_M(\tau)/d\tau^2|_{\tau=0} < 0$, то темп нарастания $\sigma_M(\tau)$ сразу

уменьшается, и можно даже оценить предел $\sigma_M^* = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \sigma_M(\tau)$ по первому Паде-приближению:

$$\begin{aligned} \sigma(\tau) &\cong a\tau/(1 + b\tau) = a\tau - ab\tau^2 + \dots \\ \sigma_M^* &\cong a/b = -\frac{2(d\sigma_M(\tau)/d\tau|_{\tau=0})^2}{d^2\sigma_M(\tau)/d\tau^2|_{\tau=0}}. \end{aligned} \quad (41)$$

Выпуклость $\sigma(\tau)$ вверх ($d^2\sigma_M(\tau)/d\tau^2|_{\tau=0} < 0$) аналогична мягкой неустойчивости – модельная кривая $q_{M,\tau}$ далеко не убегает от квазиравновесного многообразия и сразу можно оценить, где остановится σ (41). Если же $d^2\sigma_M(\tau)/d\tau^2|_{\tau=0} > 0$, то это аналогично жесткой неустойчивости, и никакие оценки типа (41) по второму порядку не работают. Итак, все определяется знаком скалярного произведения:

$$d^2\sigma_M(\tau)/d\tau^2|_{\tau=0} = \langle \Delta_{f_M^*} | A_2(M) + D_f J(f)|_{f_M^*} (1 - 2\pi_{f_M^*}) J(f_M^*) \rangle_{f_M^*} \quad (42)$$

(в множителе $(1 - \pi_{f_M^*})$ нет необходимости, поскольку $\Delta_{f_M^*} \in L$).

Далее, оценка установившегося производства энтропии (41) дает

$$\sigma_M^* = -\frac{2\langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*}}{\langle \Delta_{f_M^*} | A_2(M) + D_f J(f)|_{f_M^*} (1 - 2\pi_{f_M^*}) J(f_M^*) \rangle_{f_M^*}}, \quad (43)$$

если знаменатель отрицателен. В противном случае назовем *квазиравновесное многообразие неустойчивым*.

Выражение (43) позволяет дать оценку τ в уравнении, получаемом методом натурального проектора. Воспользуемся выражением (29):

$$(\tau/2)\langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*} = \sigma_M^*.$$

Отсюда

$$\tau \cong -\frac{4\langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*}}{\langle \Delta_{f_M^*} | A_2(M) + D_f J(f)|_{f_M^*} (1 - 2\pi_{f_M^*}) J(f_M^*) \rangle_{f_M^*}}, \quad (44)$$

если знаменатель отрицателен. В этом случае в уравнении (27) не остается произвольных параметров. Следует особо отметить, что значение τ (44) уже не является промежутком времени между встряхиваниями. Этот промежуток устремлен к бесконечности, а τ (44) соответствует оценке предельного значения производства квазиравновесной энтропии.

3.4. Геометрические разложения вместо темпоральных

Укажем еще одну непоследовательность предыдущего раздела – наличие в формулах в явном виде временной переменной τ – времени «схождения» с квазиравновесных начальных условий.

При последовательном геометрическом подходе достаточно ограничиваться энтропийными параметрами (неравновесной частью энтропии $S^*(M) - S$) или связанным с энтропийной квадратичной формой натуральным параметром и т.п.

При таком подходе следует искать аппроксимации не $\sigma(\tau)$, а, например, $\sigma(\Delta S)$ (где $\Delta S = S^*(M) - S$).

Паде-аппроксимацию этой зависимостью могут быть, в свою очередь, получены из разложений по τ .

Простейшая геометрическая оценка заключается в аппроксимации траектории движения $q_{M,\tau}$ кривой второго порядка. На основании данных $\dot{q}_{M,\tau}$, $\ddot{q}_{M,\tau}$ (34) можно построить касательную окружность (в энтропийной метрике $\langle | \rangle_{f_M^*}$, естественно, т.к. энтропия – интеграл движения исходных уравнений). Для ее радиуса получим:

$$R = - \frac{\langle \dot{q}_{M,0} | \dot{q}_{M,0} \rangle_{f_M^*}}{\sqrt{\langle \ddot{q}_{\perp M,0} | \ddot{q}_{\perp M,0} \rangle_{f_M^*}}}, \quad (45)$$

где

$$\dot{q}_{M,0} = \Delta_{f_M^*},$$

$$\ddot{q}_{\perp M,0} = \ddot{q}_{M,0} - \frac{\langle \ddot{q}_{M,0} | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*} \Delta_{f_M^*}}{\langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*}},$$

$$\ddot{q}_{M,0} = (1 - \pi_{f_M^*}) D_f J(f) |_{f_M^*} ((1 - 2\pi_{f_M^*}) J(f_M^*)) + (D_M \pi_{f_M^*}) m(J(f_M^*)).$$

Для предельного коэффициента τ геометрическая оценка дает:

$$\tau \cong (\pi/2) \sqrt{\frac{\langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*}}{\langle \ddot{q}_{\perp M,0} | \ddot{q}_{\perp M,0} \rangle_{f_M^*}}}. \quad (46)$$

Это же τ дает оценку времени релаксации σ к своему значению

$$\sigma = \frac{2\tau}{\pi} \langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*}.$$

4. ПЛЕНКА НЕРАВНОВЕСНЫХ СОСТОЯНИЙ

4.1. Уравнения пленки

Множество $q_{M,\tau}$ в пространстве E образует поверхность, параметризованную "двумя переменными": скалярным $\tau \geq 0$ и значением макропеременных M с условием

$$M = m(q_{M,\tau}) \quad (47)$$

Будем называть эту поверхность *пленкой неравновесных состояний* (или далее для краткости *пленкой*).

Для каждого $\tau \geq 0$ определено *сечение пленки*: множество $q_{M,\tau}$ при данных τ . Оно параметризовано значением M . При $\tau = 0$ сечение пленки совпадает с квазиравновесным многообразием. Саму пленку можно рассматривать как траекторию движения сечения при изменении $\tau \in [0; +\infty)$. Несложно выписать уравнения этого движения, используя определение $q_{M,\tau}$:

$$q_{M,\tau} = T_\tau f_{M-\tau}^*, \quad (48)$$

где T_τ – сдвиг по времени в силу исходной динамической системы, $M-\tau$ определяется уравнением (30).

Для малых $\Delta\tau$

$$q_{M,\tau+\Delta\tau} = q_{M-\Delta M,\tau} + J(q_{M,\tau}) \Delta\tau + o(\Delta\tau), \quad (49)$$

где $\Delta M = m J(q_{M,\tau}) \Delta\tau$. Отсюда

$$\frac{dq_{M,\tau}}{dt} = (1 - D_M q_{M,\tau} m) J(q_{M,\tau}). \quad (50)$$

Начальным условием для уравнения (50) служит квазиравновесие

$$q_{M,0} = f_M^*. \quad (51)$$

Уравнение (50) с начальным условием (51) определяет пленку неравновесных состояний в пространстве E . Эта пленка является минимальным положительно инвариантным множеством (т.е. инвариантным относительно сдвигов T на положительные времена $\tau > 0$), содержащим квазиравновесное многообразие f_M^* . В связи с гипотезой о выделенности квазиравновесных начальных условий именно на этой пленке разыгрывается вся интересующая нас неравновесная кинетика.

Исследование неравновесной кинетики разделяется на две проблемы:

1) Построение пленки неравновесных состояний – решения (50) с начальными условиями (51).

2) Исследование движения системы по пленке.

Естественно, следует предполагать, что пленка будет построена лишь приближенно. Поэтому вторую проблему следует разбить еще на две:

2а) Построение проекции исходного векторного поля J на приближенно найденную пленку и построение уравнений для M, τ .

2б) Исследование и решение уравнений для M, τ .

Следует особо подчеркнуть, что существование пленки не вызывает особых содержательных сомнений (хотя, конечно, получение теорем существования и единственности для (50, 51) может оказаться сложной математической задачей). Напротив, существование кинетических коэффициентов (вязкости и т.п.) и, шире, быстрое стремление dM/dt к определенной зависимости $\dot{M}(M)$ является содержательной гипотезой, которая, к тому же, не всегда верна, как и положено содержательной гипотезе.

Далее мы будем решать в основном задачу построения уравнений, то есть задачи 1) и 2а). И начнем с задачи 2а). Итак, пусть пленка приближенно построена.

4.2. Термодинамический проектор на пленку.

Проектор нужен нам, чтобы спроектировать векторное поле на касательное пространство. Идея термодинамического проектора [3] состоит в том, чтобы описывать любое многообразие (любое с точностью до некоторых требований трансверсальности) как квазиравновесное. Для этого строится проекция некоторой окрестности многообразия на него, а потом линеаризацией получается требуемый проектор.

Проекция окрестности многообразия на него должна удовлетворять, по существу, одному условию: точка многообразия должна быть точкой максимума энтропии на своем прообразе. Если прообраз точки f^* – область в аффинном подпространстве $L_{f^*} \subset E$, то требуемое условие:

$$D_f S^*(L_{f^*} - f^*) \equiv 0. \quad (52)$$

Для таких проекций диссипативное векторное поле проецируется в диссипативное, а консервативное (с сохранением энтропии) – в консервативное, т.е. баланс энтропии является точным.

Итак, пусть задана пленка $q_{M,\tau}$. Построим для нее термодинамический проектор.

При малой вариации переменных M, τ

$$\begin{aligned}\Delta q_{M,\tau} &= D_M q_{M,\tau} \Delta M + D_\tau q_{M,\tau} \Delta \tau + o(\Delta M, \Delta \tau), \\ \Delta S &= D_f S|_{q_{M,\tau}} \Delta q_{M,\tau} + o(\Delta M, \Delta \tau).\end{aligned}\quad (53)$$

После простых преобразований получаем:

$$\begin{aligned}\Delta \tau &= \frac{1}{D_f S|_{q_{M,\tau}} D_\tau q_{M,\tau}} + o(\Delta M, \Delta S), \\ \Delta q_{M,\tau} &= \left[1 - \frac{D_\tau q_{M,\tau} D_f S|_{q_{M,\tau}}}{D_f S|_{q_{M,\tau}} D_\tau q_{M,\tau}} \right] D_M q_{M,\tau} \Delta M + \\ &\quad + \frac{1}{D_f S|_{q_{M,\tau}} D_\tau q_{M,\tau}} D_\tau q_{M,\tau} \Delta S + o(\Delta M, \Delta S)\end{aligned}\quad (54)$$

Отсюда получаем термодинамический проектор для J :

$$\pi_{id}|_{q_{M,\tau}} J = \left[1 - \frac{D_\tau q_{M,\tau} D_f S|_{q_{M,\tau}}}{D_f S|_{q_{M,\tau}} D_\tau q_{M,\tau}} \right] D_M q_{M,\tau} m J + \frac{D_\tau q_{M,\tau} D_f S|_{q_{M,\tau}}}{D_f S|_{q_{M,\tau}} D_\tau q_{M,\tau}} J. \quad (55)$$

Для консервативных систем второе слагаемое в (53) обращается в 0 и мы получаем:

$$\pi_{id}|_{q_{M,\tau}} J = \left[1 - \frac{D_\tau q_{M,\tau} D_f S|_{q_{M,\tau}}}{D_f S|_{q_{M,\tau}} D_\tau q_{M,\tau}} \right] D_M q_{M,\tau} m J. \quad (56)$$

Соответствующее (56) уравнение для M имеет вид:

$$\begin{aligned}\dot{M} &= m \pi_{Tg}|_{q_{M,\tau}} J(q_{M,\tau}) = \\ &= m \left[1 - \frac{D_\tau q_{M,\tau} D_f S|_{q_{M,\tau}}}{D_f S|_{q_{M,\tau}} D_\tau q_{M,\tau}} \right] D_M q_{M,\tau} m J = m J(q_{M,\tau}).\end{aligned}\quad (57)$$

Оно должно быть дополнено уравнением для S :

$$\dot{S} = 0 \quad (58)$$

или для τ , в соответствии с (54)

$$\frac{d\tau}{dt} = \frac{\dot{S} - D_f S|_{q_{M,\tau}} D_M q_{M,\tau} \dot{M}}{D_f S|_{q_{M,\tau}} D_\tau q_{M,\tau}} = - \frac{D_f S|_{q_{M,\tau}} D_M q_{M,\tau} \dot{M}}{D_f S|_{q_{M,\tau}} D_\tau q_{M,\tau}}, \quad (59)$$

где \dot{M} определяется в соответствии с (57). Числитель (59) имеет простой смысл – скорость изменения энтропии в силу (57) при условии постоянства τ (при замороженном τ). А выражение (59) может быть получено из условия постоянства энтропии при движении по пленке в силу систем (57, 59).

Предположим далее, что выполнено условие (32):

$$q_{M,\tau} = f_M^* + \tau \Delta_{f_M^*} + o(\tau).$$

В выражениях (54, 57, 59) присутствует знаменатель $D_f S|_{q_{M,\tau}} D_\tau q_{M,\tau}$. При $\tau \rightarrow 0$ это выражение стремиться к нулю:

$$D_\tau q_{M,\tau}|_{\tau=0} = \Delta_{f_M^*},$$

$$D_f S|_{f=f_M^*} x = 0 \text{ при } x \in \ker m,$$

$m(\Delta_{f_M^*}) = 0$, следовательно, $D_f S|_{q_{M,\tau}} D_\tau q_{M,\tau} \rightarrow 0$ при $\tau \rightarrow 0$. При $\tau \rightarrow 0$ в выражениях (54 - 56, 58, 59) появляются неопределенности вида 0/0. Устраним неопределенности и вычислим соответствующие пределы.

Неопределенности, собственно, две:

$$N_1(\tau) = \frac{(D_\tau q_{M,\tau})(D_f S|_{q_{M,\tau}}) D_M q_{M,\tau} m J}{D_f S|_{q_{M,\tau}} D_\tau q_{M,\tau}} \quad (60)$$

и правая часть (59). Раскроем неопределенность (60) по правилу Лопиталья. Получим:

$$N_1(\tau) \xrightarrow{\tau \rightarrow 0} \frac{\Delta_{f_M^*} D_f S|_{f_M^*} \pi_{f_M^*} D_f J(f)|_{f_M^*}}{\langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*}};$$

используем тождество (28), аналогично (29), получим:

$$N_1(\tau) \xrightarrow{\tau \rightarrow 0} - \frac{\Delta_{f_M^*} \langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*}}{\langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*}} = -\Delta_{f_M^*}.$$

Таким образом, при $\tau \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \pi_{id}|_{q_{M,\tau}} J(q_{M,\tau}) &\rightarrow D_M f_M^* m J(f_M^*) + \Delta_{f_M^*} = \\ &= \pi_{f_M^*} J(f_M^*) + (1 - \pi_{f_M^*}) J(f_M^*) = J(f_M^*). \end{aligned} \quad (61)$$

Аналогично, простыми преобразованиями получаем, что

$$\frac{d\tau}{dt} \rightarrow 1 \text{ при } \tau \rightarrow 0. \quad (62)$$

То, что при $\tau \rightarrow 0$ действие термодинамического проектора на J становится тривиальным $\pi_{id} J = J$ может быть получено (без вычислений) из конструкции $q_{M,\tau}$ в окрестности нуля: мы так выбрали эту зависимость, что $J(q_{M,\tau})$ становится касательно к пленке при $\tau \rightarrow 0$. Это следует из условия (32). Подчеркнем, однако, что сами формулы

(56 - 59) выведены без опоры на (32) и применимы к любому анзатцу $q_{M,\tau}$, не обязательно с правильным поведением в окрестности квазиравновесия (если такие анзатцы зачем-нибудь понадобятся).

4.3. Неподвижные точки и "правильные асимптотики" для уравнения пленки

Как устроена динамика пленки в соответствии с (50)? Наивное ожидание: $q_{M,\tau}$ стремится к неподвижной точке (50), – приводит к странным последствиям. Неподвижная точка (50) – это инвариантное многообразие q_M – на нем

$$J(q_{M,\tau}) = D_M q_M t J(q_M), \quad (63)$$

т.е. проекция векторного поля J на q_M совпадает с J . Если бы выполнялось $q_{M,\tau} \rightarrow q_M$ при $\tau \rightarrow \infty$, то динамика становилась бы все более консервативной. На предельном многообразии q_M энтропия сохранялась бы. Это приводило бы к необычным последствиям. Первое из них – ограниченная продолжимость назад "по энтропии".

Рассмотрим множество точек $M_{-\tau}$ для данного M . Ввиду того, что существует предел $T_\tau M_{-\tau} \rightarrow q_M$ при $\tau \rightarrow \infty$, разность $S(M) - S(M_{-\tau}) = \Delta S_\tau$ ограничена на полуоси $\tau \in [0; +\infty)$: $\Delta S_\tau < \Delta S_\infty(M)$. Это означает, что в значения макроскопических переменных M "не попасть" из квазиравновесных начальных условий M_1 , для которых $S(M) - S(M_1) > \Delta S_\infty(M)$. Дополнительно предполагая некоторую регулярность q_M и $M_{-\tau}$, приходим к тому, что нельзя попасть снаружи в ε -окрестность равновесного состояния M^* (по макропеременным) из квазиравновесных начальных условий M_0 , если $S(M_0) < S_\varepsilon$, где S_ε – зависящий от ε порог энтропии. Таким образом, возможные неподвижные точки уравнения пленки (50), хотя и представляют несомненный интерес, будут демонстрировать, скорее, некоторые экзотические возможности. Качественным ожиданиям соответствуют следующие "правильные асимптотики" при больших τ . А именно, ожидается, что при достаточно больших τ \dot{M} становится с хорошей точностью функцией от M и далее от τ практически не зависит:

$$t(J(q_{M,\tau})) \rightarrow \dot{M}(M); \quad (64)$$

при этом производство энтропии

$$\sigma(q_{M,\tau}) = D_M S(M) t J(q_{M,\tau}) \rightarrow \sigma(M) > 0, \quad (65)$$

и, соответственно, $S(q_{M,\tau}) \rightarrow -\infty$, $\tau \rightarrow \infty$.

Уже простые примеры (линейные J) показывают, что реализовать такую асимптотику не так-то просто, более того, для сколько-нибудь разумно построенных

конечных систем они, по-видимому, не существуют. Действительно, пусть $J(q) = Lq$, будем искать "правильную асимптотику" вида $q_{M,\tau} = a(M) + \tau b(M) + o(1)$. Получим:

$$\begin{aligned} m b &= m Lb = 0, \quad m a(M) = M, \\ Lb(M) - D_M b(M) &= m L(a(M)) = 0, \\ La(M) - D_M a(M) &= m L(a(M)) = b(M). \end{aligned} \quad (66)$$

Действуя на первое уравнение оператором mL , получим $mL^2b(M) = 0$, далее, действуя оператором mL^2 , получим $mL^3b(M) = 0$ и т.д.

Итак,

$$b(M) \subset \bigcap_{k=0}^{\infty} \ker mL^k = H. \quad (67)$$

Пространство H является L -инвариантным, поэтому, можно перейти от исходной динамики $\dot{f} = Lf$ к динамике в фактор-пространстве. Это не отразится на динамике макроскопических переменных в силу определения H (67).

Тем самым, вместо правильной асимптотики уравнения (66) вновь приводят нас к уравнению инвариантного многообразия ($b = 0$, $a(M)$ определяют инвариантные многообразия).

4.4. Огрубляющий проектор

Получение точной проекции микроскопической динамики на макроскопическую бессодержательно, и имеет смысл только как промежуточный результат. Действительно, в ситуации общего положения такая проекция (конечный отрезок траектории $M(t)$) содержит практически ВСЮ информацию об уравнении Лиувилля – это немного слишком.

Кроме того, ни для каких конечных консервативных систем не существует инвариантных многообразий с диссипативной динамикой. Вывод таков: всегда – явно, или иногда неявно – производится огрубление – замена системы чем-то иным.⁴

Известно несколько приемов огрубления, но по существу – два. Первый связан с выделением некоторого многообразия M и проектора Π на него; многообразию M с проектором Π отделяют "микроскопическое" (ядро Π) от макроскопического – M . В

⁴ Иногда ошибочно утверждается, что, например, Боголюбов построил динамически инвариантное многообразие для уравнения Лиувилля, параметризованное одночастичной функцией распределения, и на этом многообразии динамика описывается уравнением Больцмана. Это не соответствует истине.

частности, $m(f) = m(\Pi f)$. Далее, параметризуется "новая макроскопическая динамика": вместо $\dot{M} = m(J(f))$ принимается равенство

$$\dot{M} = m(J(\Pi f)). \quad (68)$$

Это уравнение (68) задает, например, совсем другую систему связей в цепочке производных M, \dot{M}, \ddot{M} (а в исходной системе таких связей может и вообще не быть). Для построения "правильных асимптотик" соотношение (66) подходит куда лучше исходного истинного соотношения: например, вместо mL^k в (67) можно получить $m(L\Pi)^k$, а ядро $(L\Pi)^k$ всегда содержит ядро Π .

Если постулирован огрубляющий проектор Π и многообразие M , то гипотеза о существовании макроскопического предела состоит в том, что существует предел:

$$\Pi q_{M,\tau} \rightarrow f_M^\# \text{ при } \tau \rightarrow \infty. \quad (69)$$

Точного выполнения равенства (69), однако, ожидать не следует – это все еще случай точной проекции (на M). Реально можно ожидать малости при $\tau \rightarrow \infty$ остатка

$$\delta(\tau, M, N) = \Pi q_{M,\tau} - f_M^\#, \quad (70)$$

где N – число частиц, и его исчезновение при $N \rightarrow \infty$.

Для более точной формулировки этого условия следует оценить δ при $\tau \rightarrow \infty$, например, так:

$$\varepsilon(M, N) = \sqrt{\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\theta} \int_0^\theta \|\delta(\tau, M, N)\|^2 d\tau} \quad (71)$$

и далее исследовать термодинамический предел $N \rightarrow \infty$.

До сих пор, однако, в нашем рассмотрении не участвовало число частиц и мы имели дело с одной фиксированной системой. В таком случае ничего не остается, кроме как предполагать, что величина $\varepsilon(M)$ (71) "достаточно мала". Заметим также, что вопрос об определении динамики для термодинамического предела бесконечных систем – задача чрезвычайно непростая: для бесконечной системы даже определение энергии, энтропии и других характеристик неясно. речь идет не о пределе, которого нет (число частиц всегда конечно), а об асимптотике при больших N , поэтому, строго говоря, нужно знать не просто пределы, но и дать оценку остаточным членам.

Второй способ огрубления системы состоит в ее разбиении на малые подсистемы и введении двух несоизмеримых масштабов времени: макро и микро. Основное предположение: за сколь угодно малое макроскопическое время малая часть систем проходит бесконечно длительную микроразволюцию. Это приводит к

квазихимическому описанию: в каждый отрезок времени совершается некоторое количество элементарных неделимых процессов (событий). К этому реально сводится, например, вывод уравнения Больцмана во всех формализмах. Мы еще вернемся к подробному рассмотрению этого подхода, а пока займемся огрубляющим проектором для уравнения пленки.

4.5. Выбор огрубляющего проектора и послойная линеаризация

Простейший выбор огрубляющего проектора:

$$\Pi(f) = (M(f), \dot{M}(f)) = (mf, mJ(f)).$$

Для большинства задач, например, для исследования невязки (68) нет необходимости в размещении многообразия M в исходном пространстве E – достаточно изучать $\dot{M}_M^\#$.

В тех случаях, когда все же нужно иметь соответствующие элементы E , хорошим выбором может быть соответствующее Π квазиравновесное многообразие. Квазиравновесные многообразия обладают следующим очевидным, но полезным свойством. Пусть есть последовательность линейных отображений:

$$f \xrightarrow{m_1} M_1 \xrightarrow{m_2} M_2, f \xrightarrow{m_2 m_1} M_2,$$

где m_1, m_2 – отображения "на", образ которых все соответствующее пространство.

Пусть, далее, $\mathbf{M}_1 \subset E$ – квазиравновесное многообразие в E , соответствующее m_1 , \mathbf{M}_2 – квазиравновесное многообразие макропеременных M_2 , соответствующее m_2 , \mathbf{M}_{21} – квазиравновесное многообразие в E , соответствующее $m_2 m_1$. Тогда

$$m_1(\mathbf{M}_{21}) = m_2, \text{ или } \mathbf{M}_{21} = m_1^{-1}(\mathbf{M}_2). \quad (72)$$

Для операции перехода к квазиравновесному приближению это свойство записывается еще проще

$$U_2 U_1 = U_{21}, \quad (73)$$

где U_i – соответствующая m_i операция взятия квазиравновесного приближения.

Для каждого M_2 определена точка квазиравновесия $M_1^*(M_2)$ и линейное многообразие $m_2^{-1}(M_2)$, содержащее эту точку, для каждого M_1 определено квазиравновесие $f_1^*(M_1)$ и линейное многообразие $m_1^{-1}(M_1)$, содержащее эту точку. Также определены $f_2^*(M_2)$ и содержащее его $(m_2 m_1)^{-1}(M_2)$.

Выполнены соотношения:

$$f_2^*(M_2) = f_1^*(M_1^*(M_2)),$$

$$m_1^{-1}(m_2^{-1}(M_2)) = (m_2 m_1)^{-1}(M_2). \quad (74)$$

Квазиравновесное многообразие $f_2^*(M_2)$ в E , параметризованное M_2 , лежит на квазиравновесном многообразии $f_1^*(M_1)$ в E , параметризованном M_1 . Для каждого M_2 множество

$$\{f_1^*(M_1) \mid f_1^*(M_1) \subseteq (m_2 m_1)^{-1}(M_2)\}$$

образует квазиравновесное многообразие в $(m_2 m_1)^{-1}(M_2)$ со множеством макропеременных $m_2^{-1}(M_2)$ и той же энтропией. Для проектора $\Pi(f) = (M(f), \dot{M}(f))$ это означает, что для каждого M в линейном многообразии, на котором $m(f) = M$, определено квазиравновесное многообразие, соответствующее макропеременным $\dot{M}(f) = mJ(f)$ (если $J(f)$ – линейное отображение на этом многообразии).

Вот это последнее замечание приводит к важной конструкции, названной нами "послойной линейризацией". Поле $J(f)$ представляется в виде

$$J_L(f) = J(f_{m(f)}^*) + D_f J(f)|_{f_{m(f)}^*} (f - f_{m(f)}^*). \quad (75)$$

Особо важное значение для теории нелинейных уравнений (75) имеет "послойно квадратичная энтропия":

$$S_L(f) = S(f_{m(f)}^*) - (1/2) \langle f - f_{m(f)}^* \mid f - f_{m(f)}^* \rangle_{f_{m(f)}^*}. \quad (76)$$

Напомним, что билинейная форма $\langle \mid \rangle_{f_{m(f)}^*}$ порождена вторым дифференциалом энтропии в точке f .

Послойно линейризованные уравнения позволяют добавлять к моментам другие и строить квазиравновесные приближения с помощью энтропии (76). Особенно важно это для моментов-производных \dot{M} , \ddot{M} и т.п.

Использование послойно линейризованных уравнений (73) с послойно квадратичной энтропией (76) позволило построить термодинамически согласованную теорию моментных уравнений для уравнения Больцмана [4].

Дополнять квазиравновесие f_M^* квазиравновесием по макропеременным \dot{M} :

$$\dot{M}(f) = m(D_f J(f)|_{f_{m(f)}^*} f) - \quad (77)$$

удобно в два этапа: дополнение производством энтропии, а потом, сохраняющей энтропию частью.

1) Дополняем M производством энтропии: в послойно линейном приближении

$$\sigma(f) = \langle \Delta_{f_m^*(f)} | f - f_m^*(f) \rangle_{f_m^*(f)} \quad (78)$$

(как было установлено ранее, см. (39)). Квазиравновесное многообразие, соответствующее σ , в слое над f_M^* имеет вид:

$$f_{M,\sigma}^* = f_M^* + \frac{\sigma(f)\Delta_{f_M^*}}{\langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*}}. \quad (79)$$

Квазиравновесный проектор в слое $\pi_\sigma = \frac{|\Delta_{f_M^*}\rangle\langle\Delta_{f_M^*}|}{\langle\Delta_{f_M^*}|\Delta_{f_M^*}\rangle_{f_M^*}}$.

2) Выделяем в $L = DJ(f)|_{f_M^*}$ консервативную (сохраняющую энтропию) часть над f_M^* :

$$L_M^C \varphi = L_M (\varphi - \pi_\sigma \varphi).$$

Это соответствует тому, что мы зафиксировали $\sigma(f) = \langle \Delta_{f_M^*} | \varphi \rangle$ и рассматриваем движение в слое при фиксированном σ . При этом

$$L_M \varphi = L_M^C \varphi + \frac{L_M \Delta_{f_M^*} \langle \Delta_{f_M^*} | \varphi \rangle}{\langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*}} = L_M^C \varphi + \frac{\sigma(\varphi)}{\langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*}}. \quad (80)$$

Квазиравновесное многообразие, соответствующее L_M^C , в слое над f_M^* строится так: ищется ядро L_M^C в L (множество всех решений уравнений $L_M^C \varphi = 0$, $m\varphi = 0$). Обозначим его K ; ортогональное дополнение K^\perp к K в скалярном произведении $\langle | \rangle_{f_M^*}$ и есть соответствующее многообразие. Для каждой точки из образа L_M на L ($\psi \in L_M^C(L)$) существует и единственно $\varphi \in K_{f_M^*}^\perp$, такое, что $L_M \varphi = \psi$. Обозначим это: $\varphi = (L_M^C)^{-1}(\psi)$. В итоге, для любого $\psi \in L_M^C(L)$

$$f_{M,\sigma,\psi}^* = f_M^* + \frac{\sigma\Delta_{f_M^*}}{\langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle_{f_M^*}} + (L_M^C)^{-1}\psi. \quad (81)$$

Второе и третье слагаемое в (81) взаимно ортогональны в скалярном произведении $\langle | \rangle_{f_M^*}$.

4.6. Неудача с галеркинскими приближениями

Простейший подход к проблеме связан с галеркинскими приближениями: рассматривается проекция векторного поля $J(f)$ на интересующее нас многообразие и исследуются полученные уравнения движения. Нетрудно убедиться, что для консервативных систем такой подход непродуктивен: если выбирать $\langle | \rangle_{f_M^*}$ – ортогональное проектирование, то в послонно линейном приближении получим просто квазиравновесные приближения с увеличенным числом моментов. Для диссипативных систем, напротив, этот метод приводит к вполне удовлетворительным результатам. Так, если для уравнения Больцмана и гидродинамических моментов искать инвариантное многообразие в виде $f_M^\# = f_M^* + a(M)\Delta_{f_M^*}$, то получим уравнения Навье-Стокса с вязкостью, вычисленной с помощью первых моментов Сони́на. Использование же другого скалярного произведения приводит просто к нефизическим результатам.

Для уточнения возникающих проблем приведем пример с использованием линейного поля $J(f) = Af$ и квадратичной энтропии $S(f) = (1/2) \langle f|f \rangle$. Консервативность J означает, что для любого f выполнено

$$\langle f|Af \rangle = 0. \quad (82)$$

Квазиравновесное подпространство, соответствующее моментам $M = mf$, есть ортогональное дополнение $\ker M$. Квазиравновесный проектор π – ортогональный проектор на это подпространство и не зависит от точки. Для невязки $\Delta_{f_M^*}$ получаем

$$\Delta_{f_M^*} = (A - \pi A) f_M^*. \quad (83)$$

В галеркинском приближении полагаем

$$q_{M,\tau} = f_M^* + a(M, \tau) \Delta_{f_M^*}. \quad (84)$$

Проектор векторного поля на $\Delta_{f_M^*}$ есть

$$\frac{|\Delta_{f_M^*} \rangle \langle \Delta_{f_M^*}|}{\langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle}. \quad (85)$$

Итак, переходим от уравнения движения пленки (50) к галеркинскому приближению для $a(M, \tau)$:

$$\dot{a} = 1 + a \frac{\langle \Delta_{f_M^*} | A \Delta_{f_M^*} \rangle}{\langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle} - a \frac{\langle \Delta_{f_M^*} | A \pi A \Delta_{f_M^*} \rangle}{\langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle} - a^2 \frac{\langle \Delta_{f_M^*} | A \pi A \Delta_{f_M^*} \rangle}{\langle \Delta_{f_M^*} | \Delta_{f_M^*} \rangle} -$$

$$- (D_M a) m \frac{A f_M^* + a A \Delta_{f_M}^*}{\langle \Delta_{f_M}^* | \Delta_{f_M}^* \rangle}. \quad (86)$$

Для этого уравнения можно попытаться найти точки остановки (Решая уравнения $\dot{a} = 0$). Это спроектированное уравнение инвариантности.

В силу свойств оператора A и самосопряженного проектора π получаем:

$$\langle \Delta_{f_M}^* | A \Delta_{f_M}^* \rangle = 0, \quad (87)$$

$$\langle \Delta_{f_M}^* | A \pi A \Delta_{f_M}^* \rangle = -\langle \pi A \Delta_{f_M}^* | (\pi A^2 - (\pi A)^2) \Delta_{f_M}^* \rangle. \quad (88)$$

Для диссипативных систем форма (87) отрицательно определена и именно она определяет уравнение Навье-Стокса (в приближении по первым полиномам Сонина) при выводе этого уравнения из уравнения Больцмана. Для консервативных же уравнений эта главная часть обращается в 0, а второе слагаемое (85), вообще говоря, не знакоопределено.

Еще более явно неудача галеркинских приближений проявляется в уравнении движения по пленке. Тут все очень просто:

$$\dot{a} = 1 + a \frac{\langle \Delta_{f_M}^* | A \Delta_{f_M}^* \rangle}{\langle \Delta_{f_M}^* | \Delta_{f_M}^* \rangle}. \quad (89)$$

Для диссипативных систем при замороженных M и a релаксирует к неподвижной точке:

$$a = - \frac{\langle \Delta_{f_M}^* | \Delta_{f_M}^* \rangle}{\langle \Delta_{f_M}^* | A \Delta_{f_M}^* \rangle} \quad (90)$$

("главному члену" решения уравнения инвариантности $\dot{a} = 0$ (84)).

Для консервативных систем $\dot{a} = 1$. Этот ответ был заранее очевиден из формулы производства энтропии (29) и того, что

$$S(f) = (1/2) \langle f | f \rangle = (1/2) \langle \pi f | \pi f \rangle + (1/2) \langle (1 - \pi) f | (1 - \pi) f \rangle.$$

4.7. Возможные выходы за пределы галеркинских приближений

Первый вариант – использование метода проекционных операторов [5]. Уравнение пленки (48) рассматривается для двух наборов "переменных" – медленных "макропеременных" Πq и быстрых "микрпеременных" $(1 - \Pi)q$ (где Π – огрубляющий проектор, см. п. 4.4).

Далее исключаются быстрые переменные и пишется уравнение с запаздыванием на медленные Πq . Это формально точное уравнение после ряда дополнительных аппроксимаций ("короткая память", "марковские модели" и др.) становится доступным для анализа. Метод применим для линейных (послойно линейных) векторных полей $J(q) = L_M q$. Главная проблема – вычисление коэффициентов, включающих средние вдоль траекторий быстрого движения.

Второй вариант – введение диссипативной части (использование термодинамического предела): к векторному полю $J(q_{M,\tau})$ в (50) добавляется либо оператор "релаксации"

$$- \gamma(q_{M,\tau} - f_M^*), \quad (91)$$

либо оператор γP , моделирующий случайный процесс, например, если f – функция на некотором пространстве X , то типичный вид P с "детальным равновесием" f_M^* :

$$P(f) = \int Q(x, x') \left(\frac{f(x')}{f_M^*(x')} - \frac{f(x)}{f_M^*(x)} \right) dx' \quad (92)$$

с неотрицательным ядром $Q(x, x') \geq 0$, $\int Q(x, x') dx' \equiv 0$.

В результате система становится диссипативной, для нее возможно построение инвариантных многообразий – стационарных решений уравнений пленки. Они ищутся либо в форме ряда [6,7] либо (более эффективно) методом Ньютона с неполной линеаризацией [8,9]. Можно использовать галеркинские приближения и т.п.

Далее совершается переход к термодинамическому пределу. Предполагается, что для найденного инвариантного многообразия $q_M^\#(\gamma)$ существует термодинамический предел, а, если затем устремить γ к нулю, то существует и конечный предел $\Pi q_M^\#(\gamma)$. Именно этим пределом и предлагается пользоваться для определения производных макроскопических переменных M .

В ряде задач диссипативной кинетики (именно в проблеме начального слоя для уравнения Больцмана) неожиданно эффективным оказалась аппроксимация траекторий ломаными (с последующим сглаживанием и уточнением или без оных). Эти ломаные строились так: бралось начальное направление движения и f изменялось вдоль него настолько далеко, насколько это возможно с сохранением монотонности изменения энтропии и т.п. Далее из достигнутой точки операция повторяется (детали см. в [10,11]).

К сожалению, в задаче начального слоя для консервативных систем при движении вдоль прямой точек остановки не возникает (точнее, само начало движения может считаться точкой остановки, поскольку в линейном приближении возможно (80): в начальном слое для диссипативной системы, двигаясь по прямой, система некоторое время будет все равно наращивать энтропию). В консервативных системах нужно "поворачивать фазу" и моделью движения должны служить не прямые, а дуги эллипсов (в линейном приближении) или линии постоянства энтропии. В задаче о пленке, как показывает рассмотрение уже простейших примеров, простейшая хорошая модель уже не эллипсоид, а общее коническое сечение. Простой пример: $\gamma f = Af$, A – генератор поворота вокруг оси с направлением $\vec{r} = \vec{e}_x + \alpha \vec{e}_y$, $M = x$, пленка – боковая поверхность конуса, полученная вращением квазиравновесного многообразия – оси $\{x \vec{e}_x\}$ вокруг оси $\{\phi \vec{r}\}$. При $\alpha < 1$ кривая $q_{M,\tau}$ – эллипс, при $\alpha > 1$ – гипербола, при $\alpha = 1$ – парабола.

4.8. Пленка: кеплеровские модели второго порядка

Кривая $q_{M,\tau}$ получается пересечением двух многообразий: результата движения квазиравновесного многообразия вдоль векторного поля $J(f)$ и линейного многообразия $f_M^* + \ker m$.

Уже в конечномерном пространстве и линейном приближении (J – линейно, S – квадратична) получаем интересную геометрическую картину: квазиравновесное многообразие есть ортогональное дополнение $\ker m$, A – генератор поворота. $(\ker m)^\perp$ вращается под действием $e^{A\tau}$, искомая кривая – это пересечение

$$(f_M^* + \ker m) \cap e^{AR_+} (\ker m)^\perp, \quad (93)$$

где $R_+ = [0; +\infty)$, $f_M^* \in (\ker m)^\perp$.

Простейшее модельное движение – кривые второго порядка. Однако, недостаточно знать первую и вторую производные. Нужна информация о третьей производной. Если представить кривую $q_{M,\tau}$ как траекторию в задаче Кеплера, то получим: положение r центра притяжения (отталкивания)

$$r = q_0 - \ddot{q} \frac{\langle \dot{q}_\perp | \dot{q}_\perp \rangle}{\langle \ddot{q} | \dot{q}_\perp \rangle}, \quad (94)$$

где q_0 – начальная точка, в которой вычисляют производные; сила равна

$$F = \alpha \frac{r - q}{\langle r - q | r - q \rangle^{3/2}};$$

$$\alpha^2 = \langle \ddot{q} | \ddot{q} \rangle \langle r - q_0 | r - q_0 \rangle^2 = \langle \ddot{q} | \ddot{q} \rangle^3 \frac{\langle \dot{q}_\perp | \dot{q}_\perp \rangle^4}{\langle \ddot{q} | \dot{q}_\perp \rangle^4}; \quad (95)$$

$\alpha > 0$ (притяжение), если $\langle \ddot{q} | \dot{q}_\perp \rangle < 0$;

$\alpha < 0$ (отталкивание), если $\langle \ddot{q} | \dot{q}_\perp \rangle > 0$.

Необходимо специально отметить, что задача Кеплера дает аппроксимацию траектории $q_{M,\tau}$, а не временной зависимости от τ .

Важнейший вопрос – финитность пленки: Будет ли модельное движение финитно?

Ответ очень простой в терминах задачи Кеплера [12]:

$$\frac{\|\dot{q}\|^2}{2} < \frac{\alpha}{\|r - q_0\|}$$

или

$$\frac{\|\dot{q}\|^2 \langle \dot{q}_\perp | \ddot{q} \rangle}{2 \|\dot{q}_\perp\|^2 \|\ddot{q}\|^2} < 1. \quad (96)$$

Здесь $\| \cdot \| - \langle \cdot | \cdot \rangle_{f_M^*}^{1/2}$ – норма в энтропийном скалярном произведении.

4.9. Минимальные модели второго порядка: энтропийная парабола и энтропийная окружность

В построениях кеплеровских моделей второго порядка участвуют производные

$$\dot{q}_{M,\tau} = \partial q_{M,\tau} / \partial \tau; \quad \ddot{q}_{M,\tau} = \partial^2 q_{M,\tau} / \partial \tau^2; \quad \ddot{\ddot{q}}_{M,\tau} = \partial^3 q_{M,\tau} / \partial \tau^3$$

в силу уравнений движения пленки (50).

Есть более грубое построение, приводящее к двум выделенным простейшим моделям второго порядка, и использующее только две производные. Одна из этих моделей финитна (энтропийная окружность), другая – инфинитна (энтропийная парабола). Обе из них можно построить для любой точки пленки (если $\dot{q}_\perp \neq 0$, в противном случае все модели второго порядка превращаются в прямые). Окружность мы уже использовали в разделе 3.3 для оценки устанавливающегося значения σ . Напомним:

$$R = \frac{\langle \dot{q} | \dot{q} \rangle}{\sqrt{\langle \ddot{q}_\perp | \ddot{q}_\perp \rangle}},$$

где $\dot{q} = \partial q_{M,\tau} / \partial \tau$; $\ddot{q} = \partial^2 q_{M,\tau} / \partial \tau^2$;

$$\ddot{q}_\perp = \ddot{q} - \frac{\dot{q} \langle \dot{q} | \ddot{q} \rangle}{\langle \dot{q} | \dot{q} \rangle},$$

$\langle | \rangle$ – энтропийное скалярное произведение, соответствующее разложению энтропии в точке q_{M,τ_0} , или, для линейных (а также послойно линейных) систем – в точке f_M^* .

Движение по окружности можно представить так:

$$\begin{aligned} q_{M,\tau} - q_{M,\tau_0} &= \dot{q} \frac{R}{\|\dot{q}\|} \sin\left(\frac{\|\dot{q}\|}{R}(\tau - \tau_0)\right) + \ddot{q}_\perp \frac{R}{\|\ddot{q}_\perp\|} \left(1 - \cos\left(\frac{\|\dot{q}\|}{R}(\tau - \tau_0)\right)\right) = \\ &= \dot{q} \sqrt{\frac{\langle \dot{q} | \dot{q} \rangle}{\langle \ddot{q}_\perp | \ddot{q}_\perp \rangle}} \sin\left[\sqrt{\frac{\langle \ddot{q}_\perp | \ddot{q}_\perp \rangle}{\langle \dot{q} | \dot{q} \rangle}}(\tau - \tau_0)\right] + \\ &\quad + \ddot{q}_\perp \frac{\langle \dot{q} | \dot{q} \rangle}{\langle \ddot{q}_\perp | \ddot{q}_\perp \rangle} \left(1 - \cos\left[\sqrt{\frac{\langle \ddot{q}_\perp | \ddot{q}_\perp \rangle}{\langle \dot{q} | \dot{q} \rangle}}(\tau - \tau_0)\right]\right). \end{aligned} \quad (97)$$

Парабола строится еще проще:

$$q_{M,\tau} - q_{M,\tau_0} = \dot{q}(\tau - \tau_0) + (1/2)\ddot{q}_\perp(\tau - \tau_0)^2 \quad (98)$$

или даже

$$q_{M,\tau} - q_{M,\tau_0} = \dot{q}(\tau - \tau_0) + (1/2)\ddot{q}(\tau - \tau_0)^2. \quad (99)$$

Различия между (98) и (99) в том, что в формуле (98) угол между $\partial q_{M,\tau} / \partial \tau|_{\varepsilon=\tau_0}$ и $\partial q_{M,\tau} / \partial \tau$ стремится к $\pi/2$ при $\tau \rightarrow \infty$, а в модели (99) также происходит, если $\langle \dot{q} | \ddot{q} \rangle \neq 0$.

Замечание: τ в формулах (97 - 99) совпадает с истинным τ движения по пленке только в нулевом и первом порядке. Для последующего использования может быть необходим пересчет τ с использованием истинных значений \dot{q} в проекции на траекторию. Об этом далее.

4.10. Финитные модели: остановка в точках горизонта

Для построения пошаговой аппроксимации необходимо уметь решать две задачи: выбор направления очередного шага и выбор величины этого шага.

Для движения $q_{M,\tau}$ по прямым (диссипативные системы) направление очередного шага – это \dot{q}_{M,τ_0} (напомним, что \dot{q}_{M,τ_0} – дефект инвариантности

многообразия $q_M = q_{M,\tau_0}$ при данном $\tau = \tau_0$), а величина шага выбирается до точки остановки в этом направлении: до той точки где направление $\dot{q}_{M,\tau}$ станет ортогональным к исходному \dot{q}_{M,τ_0} . Естественно, текущее направление $\dot{q}_{M,\tau}$ вычисляется по (50), но приближенно, с замороженным проектором ($D_M q_{M,\tau_0}$ вместо $D_M q_{M,\tau}$).

Для консервативных систем мы выбрали модели второго порядка вместо линейных. Для финитности моделей надо выбрать моменты остановки. Предлагается поступить также, как и для диссипативных систем: останавливаться в тот момент, когда направление движения будет ортогонально исходному. Только здесь будем брать направление движения вдоль модели.

Итак, если q_{M,τ_0} – начальное положение, а $\tilde{q}_{M,\tau+\theta}$ – движение по финитной модели второго порядка, то условие перехода на следующую модель выглядит так:

$$\langle \dot{q}_{M,\tau_0} | \frac{d\tilde{q}_{M,\tau_0+\theta}}{d\theta} \rangle = 0 \quad (100)$$

(в энтропийном скалярном произведении).

Точками горизонта назовем точки $q_{M,\tau_0+\theta_0}$, в которых скалярное произведение (100) в первый раз обращается в 0 (при $0 \leq \theta < \theta_0$ это скалярное произведение положительно). Это название мотивировано тем, что при $\theta > \theta_0$ движение по модели второго порядка "скрывается за горизонтом" и его ортогональная проекция на прямую, параллельную \dot{q}_{M,τ_0} начинает двигаться обратно, второй раз проходя те же точки.

Соглашение о смене модели в точках горизонта выглядит весьма естественно. Напрашивается такой порядок вычислений:

- 1) полагаем $q_{M,0} = f_M^*$;
- 2) вычисляем $\dot{q}_{M,0}$, $\ddot{q}_{M,0}$, ... по уравнению (50);
- 3) строим модели второго порядка (финитные) $q_{M,\theta}$;
- 4) находим точки горизонта $q_{M,\theta_0(M)}$;
- 5) далее, многообразие точек горизонта выбираем за новое начальное многообразие и т.д.

Этот порядок на первый взгляд противоречит начальной постановке задачи о пленке. Многообразие $q_{M,\theta_0(M)}$ не имеет вида $q_{M,\tau}$ при некотором фиксированном τ и

не является сдвигом квазиравновесного многообразия на заданное время вдоль истинных микроскопических уравнений движения.

Вторая сложность уже отмечалась: время движения вдоль модельной кривой не совпадает с истинным временем τ . Точнее говоря, совпадает с точностью до второго порядка, но строятся не локальные, а глобальные приближения, поэтому требуются или глобальные уточнения времени, или способы обойтись без такого уточнения.

Разрешению этих сложностей посвящены следующие два раздела.

4.11. Лемма о трансверсальном рестарте

Пусть $q_{M,\tau}$ ($\tau \in [0; +\infty)$) – решение (50) с начальным условием (51) (пленка). Назовем *трансверсальным сечением* пленки $q_{M,\tau}$ многообразие $q_{M,\theta(M)}$, где $\theta(M)$ – гладкая функция, $0 \leq \theta(M) \leq t < \infty$.

Пусть выполнено *условие трансверсальности*: для любой ограниченной области M , не включающей равновесие, существует такое $\varepsilon > 0$, что в этой области

$$\frac{\|J(q_{M,\theta(M)}) - D_M q_{M,\theta(M)} m J(q_{M,\theta(M)})\|}{\|J(q_{M,\theta(M)})\|} > \varepsilon \quad (101)$$

в подходящей, например, энтропийной норме. Обозначим $\tilde{q}_{M,\tau}$ решение (50) с начальным условием $\tilde{q}_{M,0} = q_{M,\theta(M)}$. Тогда справедлива следующая *лемма о трансверсальном рестарте*:

$$q_{M,[0;+\infty)} = q_{M,[0;\theta(M)]} \cup \tilde{q}_{M,[0;+\infty)}. \quad (102)$$

Здесь $q_{M,[a;b]} = \{q_{M,\tau} \mid \tau \in [a; b]\}$.

Для обоснования⁵ этой леммы отметим, что она эквивалентна утверждению: для любого M отрезок траектории $T_\tau f_M^*$ ($\tau \in [0; t]$) пересекает многообразие $q_{M,\theta(M)}$, причем только один раз.

Для обоснования единственности пересечения рассмотрим пленку в других координатах: каждой точке q сопоставим M и τ : $q = T_\tau f_M^*$.

Условие трансверсальности исключает складки на $q_{M,\theta(M)}$ в этих координатах.

Чтобы показать существование для точки пересечения q^* отрезка $T_\tau f_M^*$ ($\tau \in [0; t]$) с $q_{M,\theta(M)}$ определим в окрестности точки f_M^* на квазиравновесном

многообразии отображение в окрестность этой точки пересечения; образ точки f_M^* – пересечение ее траектории $T_\tau f_M^*$ ($\tau \in [0; t]$) с многообразием $q_{M, \theta(M)}$ в окрестности q^* . Это – стандартное отображение последования. Ввиду условия трансверсальности оно существует осуществляет изоморфизм окрестностей. Поэтому, множество тех M , для которых пересечение траекторий с $q_{M, \theta(M)}$ существует, открыто. Оно также и замкнуто, поскольку предел точек пересечения есть точка пересечения (и отрезок $[0; t]$ компактен). Оно, очевидно, не пусто. Следовательно, это – все возможные M .

4.12. Замена времени и инвариантность термодинамического проектора

Пусть пленка построена как $\tilde{q}_{M, \theta}$, где связь θ и τ неизвестна: $\tau = \tau(M, \theta)$, $\theta = \theta(M, \theta)$; для определения этих функций надо решать уравнение, получаемое из (50) подстановкой $q_{M, \tau} = \tilde{q}_{M, \theta(M, \tau)}$ (и проектированием, так как \tilde{q} всего лишь приближение).

Сама по себе эта операция не вызывает принципиальных затруднений, однако, возникает вопрос: можно ли в получении кинетических уравнений обойтись без обратной замены времени? Иными словами, можем ли мы использовать построенный геометрический объект – пленку – без точного восстановления времени τ на нем?

Для утвердительного ответа на заданный вопрос достаточно показать, что уравнения движения по пленке, построенные с помощью термодинамического проектора (57 - 59) при замене времени описывают то же самое движение по пленке.

Это свойство термодинамического проектора практически очевидно: при выводе уравнений (57 - 59) мы не использовали то, что τ – "истинное время" из уравнений (50), и делали локальную замену переменных, переходя от $\Delta M, \Delta \tau$ к $\Delta M, \Delta S$.

Таким образом, термодинамический проектор инвариантен по отношению к замене времени, и при построении уравнений движения нет необходимости возвращаться к "истинному" τ .

Результаты этого и предыдущего разделов позволяют использовать последовательность действий, предложенную в разделе 4.10.

⁵ Напомним, что в той степени общности, в которой ведется рассмотрение, нет доказательства даже теорем существования и единственности.

4.13. Коррекция инфинитных моделей

Пусть для пленки построена инфинитная модель $q_{M,\theta}$, ($\theta \in [0; +\infty)$), $q_{M,0} = f_M^*$. Фактически, это означает, что построено приближение для всей пленки $q_{M,\tau}$ (а не только ее начального фрагмента, как это было для финитных моделей). Естественно, возникает вопрос о исправлении этого начального приближения и, вообще, построения последовательной вычислительной процедуры.

Термодинамический проектор на пленку определен (56). Соответственно, определен и дефект инвариантности пленки

$$\begin{aligned} \Delta q_{M,\theta} &= (1 - \pi_{id} |_{q_{M,\theta}}) J(q_{M,\theta}) = \\ &= \left[1 - \left(1 - \frac{D_\theta q_{M,\theta} D_f S |_{q_{M,\theta}}}{D_f S |_{q_{M,\theta}} D_\theta q_{M,\theta}} \right) D_M q_{M,\theta} m \right] J(q_{M,\theta}). \end{aligned} \quad (103)$$

Легко проверить, что если $q_{M,\theta}$ – решение (50), то $\Delta q_{M,\theta} \equiv 0$.

Дальнейшие действия: вычисление поправок к $q_{M,\tau}$ с использованием одного из итерационных методов для многообразий с краем (см. Приложение).

Вообще говоря, такие поправки можно (и полезно) вычислять и для финитных моделей. Однако, инфинитные выделены тем, что для них без этих поправок не обойтись.

4.14. Пленка и макроскопические уравнения

Пусть пленка построена. Что же дальше? Существует два пути:

1) исследование консервативной гидродинамики " $N + 1$ " переменного, где " N " переменных – это моменты M , а " $+1$ " – это τ на пленке;

2) вывод макроскопических уравнений для M .

Естественно, более желателен второй путь, приводящий к привычным классам уравнений. Первый, однако, всегда остается в резерве, так как, по крайней мере, формально, пленка существует всегда, а вот уравнения для M – не обязательно.

Способ получения уравнений для M все тот же, предложенный нами [9,17-20] вслед за Эренфестами [21] и Зубаревым [22]:

1) Выбирается некоторое время T .

2) Для произвольного M_0 решается задача движения по пленке (57), (59) с начальными условиями $M(0) = M_0$, $\tau(0) = \tau_0$ на отрезке $t \in [0; T]$. Ее решение $M(t, M_0)$.

3) Для отображения $M_0 \rightarrow M(T)$ строится система $dM/dt = F(M)$, обладающая тем свойством, что для ее фазового потока $\theta_T(M)$ выполнено тождество

$$\theta_T(M_0) \equiv M(T, M_0) \quad (104)$$

при данном T и всех M_0 . Это вновь натуральный проектор (см. (26) и весь раздел 3.1).

В этом порядке действий – две нетривиальных задачи: решение уравнений на пленке и восстановление векторного поля по преобразованию фазового потока θ_T при фиксированном T .

Естественный метод для решения первой задачи – метод осреднения. Запишем уравнения движения на пленке в виде

$$\dot{M} = \varepsilon P(M, \tau); \quad \dot{\tau} = Q(M, \tau), \quad (105)$$

где ε – (формальный) малый параметр.

Считая движение M медленным, можно записать ряд метода усреднения Боголюбова-Крылова [13]. Первый член этого ряда – простое усреднение за период T : $\tau_1(T, M)$ – решение уравнения $\dot{\tau} = Q(M, \tau)$ при фиксированном M ,

$$M_1(t, M_0) = M_0 + \varepsilon t \left(\frac{1}{T} \int_0^T P(M_0, \tau_1(\theta, M_0)) d\theta \right) \quad (106)$$

при $t \in [0; T]$, и, соответственно,

$$M_1(T, M_0) = M_0 + \varepsilon \int_0^T P(M_0, \tau(\theta, M_0)) d\theta. \quad (107)$$

Первое приближение для задачи восстановления векторного поля $F(M)$ по преобразованию фазового потока $\theta_T(M)$ тоже очень просто:

$$F_1(M) = \frac{1}{T} (\theta_T(M) - M). \quad (108)$$

Отсюда получаем первое приближение для макроскопических уравнений:

$$\dot{M} = F_1(M) = \frac{1}{T} \int_0^T m (J(q_{M, \tau(t, M)})) dt, \quad (109)$$

где $\tau(t, M)$ – решение уравнения (59) при фиксированном M (при этом, естественно, в (59) вместо \dot{M} подставляется $m J(q_{M, \tau})$).

Второе и дальнейшие приближения существенно более громоздки, но их построение не составляет принципиальной проблемы.

Приведем явный вид выражения для \dot{M} (109) для модельного движения по энтропийной окружности (45), (97) для послойно линейной системы (75).

Исходная система:

$$\dot{f} = J(f_m^*(f)) + L_m(f)(f - f_m^*(f)),$$

где $L_M = (D_f J(f))|_{f_M^*}$.

Макроскопические уравнения:

$$\begin{aligned} \dot{M} &= m(J(f_M^*)) + (1/\omega) m(L_M(\dot{q})) \frac{2\omega}{\pi} \int_0^{\pi/2\omega} \sin(\omega t) dt + \\ &+ (1/\omega^2) m(L_M(\ddot{q}_\perp)) \frac{2\omega}{\pi} \int_0^{\pi/2\omega} (1 - \cos(\omega t)) dt = \\ &= m(J(f_M^*)) + \frac{2\omega}{\pi} m(L_M(\dot{q})) + (1/\omega^2) (1 - 2/\pi) m(L_M(\ddot{q}_\perp)), \end{aligned}$$

где $\dot{q} = \Delta_{f_M^*} = J(f_M^*) - \pi_{f_M^*} J(f_M^*)$, $\pi_{f_M^*}$ – квазиравновесный проектор (16),

$$\ddot{q} = (1 - \pi_{f_M^*}) L_M((1 - 2\pi_{f_M^*}) J(f_M^*)) + D_M \pi_{f_M^*} m(J(f_M^*)),$$

$$\ddot{q}_\perp = \ddot{q} - \frac{\langle \ddot{q} | \dot{q} \rangle_{f_M^*}}{\langle \dot{q} | \dot{q} \rangle_{f_M^*}} \dot{q}.$$

$\langle \circ | \circ \rangle_{f_M^*}$ – энтропийное скалярное произведение, связанное с квадратичным

приближение энтропии в окрестности f_M^* :

$$S(f) = S(f_M^*) + DS|_{f_M^*} (f - f_M^*) - (1/2) \langle f - f_M^* | f - f_M^* \rangle_{f_M^*} + o(\|f - f_M^*\|^2),$$

$$\omega = \sqrt{\frac{\langle \ddot{q}_\perp | \ddot{q}_\perp \rangle_{f_M^*}}{\langle \dot{q} | \dot{q} \rangle_{f_M^*}}}.$$

Примечание. В (110) модель движения по энтропийной окружности (97) взята без пересчета времени, в соответствии с (59). Такой пересчет изменит значения коэффициентов без изменения структуры уравнения: вместо $2/\pi$ и $(1 - 2/\pi)$ будут другие числа.

Вообще, уравнения типа (110) определены с точностью до коэффициентов просто по последовательности точек горизонта финитных кеплеровских моделей второго порядка и соответствующих \dot{q}_i , \ddot{q}_i :

$$\dot{M} = m(J(f_M^*)) + \sum_i (\alpha_i m(L_M(\dot{q}_i)) + \beta_i m(L_M(\ddot{q}_i))), \quad (111)$$

причем $\alpha_i, \beta_i > 0$.

Последнее замечание о положительности "кинетических констант" α_i, β_i важно и не всегда легко проверяемо, однако в рассматриваемом случае оно следует из того, что движение по кеплеровскому эллипсу от начала до точки горизонта всегда обладает следующим свойством:

$$q - q_0 = \alpha \dot{q} + \beta \ddot{q}; \alpha, \beta > 0,$$

где q_0 – начальная точка, \dot{q} и \ddot{q} – скорость и ускорение в точке q_0 , соответственно.

Для модельного движения по окружности это, строго говоря, не всегда так, а гарантирована положительность коэффициентов только при $m(L(\dot{q}))$ и $m(L(\ddot{q}_\perp))$.

С увеличением числа слагаемых в (111) можно связывать два явления: изменение кинетических констант (слагаемые не ортогональны между собой, поэтому новые вносят вклад в предыдущие процессы) и появление новых процессов.

Движение по бесконечной пленке может приводить к установлению кинетических констант как функций от M , а может и вести к их постоянному изменению. Во втором случае в макроскопические уравнения движения неизбежно придется вводить дополнительную переменную – координату τ на пленке.

С точки зрения приложений более естественными могут оказаться другие формы уравнений движений по пленке, в которых в качестве динамических переменных используются кинетические коэффициенты. По существу, это всего лишь другая форма записи уравнений (57), (59): для каждого кинетического коэффициента k вычисляется $dk/dt = \psi_k(\tau, M) = \varphi_k(k, M)$ в силу (57), (59). Замена переменных $(\tau, M) \rightarrow (k, M)$ в этом уравнении возможна (по крайней мере, локально), если значение k не устанавливается в ходе движения по пленке. В результате придем к системе вида:

$$\dot{M} = m(J(f_M^*)) + \sum_j k_j F_j(M); \quad \dot{k}_j = \varphi_j(k_j, M). \quad (112)$$

Для движения, начинающегося с квазиравновесного состояния, начальные условия $k_j = 0$.

4.15. Новое в разделении времен релаксации

Классическое Боголюбовское представление о разделении времен релаксации плохо стыкуется с гипотезой о квазиравновесных начальных условиях.

В квазиравновесном состоянии исходно отсутствуют диссипативные процессы (теорема о сохранении типа динамики в квазиравновесном приближении).

Первое, что происходит при движении из квазиравновесных начальных условий – это появление диссипации. Она может быть описана (в первом исчезающем приближении) уравнением (27). Здесь особо важно, что еще не происходит разделения на процессы с различными кинетическими коэффициентами. Это происходит на дальнейших фазах релаксации – появляются различные процессы, устанавливаются их кинетические коэффициенты (см., например, (111)) (или, в некоторых случаях, устанавливается динамика кинетических коэффициентов). И уже далее происходит "гидродинамическая" релаксация – движение макропеременных к своим равновесным значениям.

Укрупняя, можно выделить три фазы:

- 1) появление диссипации;
- 2) разветвление диссипации – появление различных процессов;
- 3) макроскопическая релаксация.

В приведенной схеме важно отметить, что установление кинетических коэффициентов может происходить как во второй фазе, и тогда макроскопическая (гидродинамическая) релаксация может быть описана в привычном виде с кинетическими коэффициентами – функциями макроскопических параметров, так и в третьей (движение по пленке), и тогда в гидродинамическое описание входит также динамика кинетических коэффициентов.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для решения проблемы необратимости мы ввели понятие макроскопически определенных ансамблей. Они представляют собой результат эволюции ансамблей из квазиравновесных начальных условий. Квазиравновесия (ансамбли условного максимума энтропии при заданных макропеременных) в статистической физике интенсивно используются после работы Джейнса [23]. На наше исследование существенно повлияли работы Розоноэра и Когана [24-26].

Технически предлагаемое решение проблемы необратимости выглядит так: *мы* можем оперировать только макроскопически определенными ансамблями; класс этих ансамблей не инвариантен относительно обращения времени. Понятие макроскопически определенных ансамблей переводит проблему необратимости в новый ракурс. Его можно назвать точкой зрения теории управления. Ключевым является вопрос: какими параметрами системы мы можем *управлять*. Именно эти параметры и

фиксируются, пока "все остальное" приходит в равновесие – так достигаются квазиравновесные состояния.

Дальнейшее развитие этого направления должно привести к исследованию макродинамики с управляемыми макропараметрами. Это будет дополнение постулированных квазиравновесных начальных условий изучением общего случая эволюции управляемых ансамблей: начальное условие квазиравновесно, далее производятся доступные управляющие воздействия на систему.

Метод натурального проектора позволяет строить приближенную динамику макропеременных. При стремлении времени проектирования τ к бесконечности эти уравнения должны стремиться к истинным уравнениям макрокинетики, если таковые существуют. Именно гипотеза об их существовании в термодинамическом пределе (сначала число частиц $N \rightarrow \infty$, потом время проектирования $\tau \rightarrow \infty$) лежит в основе метода неравновесного статистического оператора Зубарева [22]. Тут надо, однако, сделать одну оговорку. Зачастую в физике используются объекты, существование и единственность которых не доказаны: решения уравнений гидро-газодинамики, кинетики и др. Часто недоказанность теорем существования и единственности трактуется как отсутствие адекватной математической постановки (выбора пространств и т.п.). При этом подразумевается, что содержательные препятствия либо отсутствуют, либо выделяются отдельно, независимо от доказательства теорем в физически тривиальных ситуациях. Существование (или несуществование) макрокинетики – вопрос совершенно иного рода. Он является содержательным, а случаи несуществования вполне могут встречаться не реже, чем обычное существование.

Понятие инвариантной пленки неравновесных состояний и техника ее приближенного построения позволяют решать вопрос о макрокинетики и в тех случаях, когда автономных уравнений макрокинетики нет. Существование же самой пленки представляется одним из физически тривиальных вопросов о существовании и единственности решений.

Если в первом акте на стене висит ружье, то в последнем оно должно выстрелить. Если появился метод, то должна быть продемонстрирована его работа. Первый акт сыгран, метод построен. Ружье висит на стене – и даже более того. С помощью тейлоровских разложений натурального проектора построены уже первые приложения [17-19]. В частности, найдена пост-Навье-Стоксовская гидродинамика, заменяющая уравнения Барнетта и не имеющая нефизических особенностей [17].

Дальнейшая задача – использование уравнений пленки и его решений в случаях, когда не существует уравнений макрокинетики.

ПРИЛОЖЕНИЕ:

Метод инвариантного многообразия

Цель данного приложения – дать краткое нетехническое изложение метода инвариантного многообразия, в том числе, для положительно инвариантных многообразий с фиксированным краем.

П 1. Построение инвариантных сечений

Пусть E – векторное пространство, в области $U \subset E$ задано векторное поле (микроскопическая система):

$$\dot{f} = J(f), (f \in U). \quad (\text{П1})$$

Предполагается, что J продолжается по непрерывности на замыкание U положительно инвариантно относительно (П1). Это означает, что любое решение (П1) $f(t)$, начавшись в U при $t = 0$, лежит в U при всех $t \in [0; +\infty)$.

Пусть B – векторное пространство (макроскопических переменных) и задано сюръективное отображение $m: E \rightarrow B$.

Требуется построить такое отображение

$$M \mapsto f_M^\#, \quad (M \in m(U), f_M^\# \in U), \quad (\text{П2})$$

чтобы $m(f_M^\#) \equiv M$ и $f_M^\#$ было положительно инвариантным многообразием системы (П1) (поскольку U положительно инвариантно, достаточно проверять локальное условие: поле $J(f_M^\#)$ касается многообразия $f_M^\#$ для каждого $M \in m(U)$).

Естественно, мы продолжаем удерживать тот уровень строгости (нестрогости) рассуждений, когда не оговариваются такие детали, как топология в E и B и т.п., а предполагается, что это может быть при необходимости сделано для конкретных реализаций.

Отображение (П2) будем называть сечением, а задачу построения положительно инвариантного многообразия $f_M^\#$ – задачей об инвариантном сечении.

Ее можно решать с помощью различных приемов. Вот несколько из них:

1) разложение в ряд Тейлора по подходящему параметру в окрестности начального приближения (метод Чепмена-Энскога [14], например);

2) метод Ньютона (как в КАМ-теории [15,16], но с неполной линеаризацией - как в исходной формулировке метода инвариантных многообразий для диссипативных систем [8]);

3) использование на каждой итерации галеркинских приближений.

Оставляя в стороне хорошо известные ряды теории возмущений, остановимся на двух прямых подходах.

Для реализации одного шага метода Ньютона с неполной линеаризацией требуется:

- 1) некоторое приближенное многообразие $f_M^\#$, обозначим его Ω ;
- 2) проектор P_Ω , отображающий окрестность Ω на Ω .

Для каждого $f_M^\#$ проектор $\pi_{f_M^\#}$, отображающий E на касательное пространство

$$T_{f_M^\#} \Omega, \pi_{f_M^\#} = D_f P_\Omega|_{f_M^\#} \quad (\pi - \text{дифференциал } P_\Omega).$$

Обычно, проектор P_Ω выбирают так, чтобы слои (прообразы точек $f_M^\#$ при проектировании) были бы областями в аффинных подпространствах E .

Для каждого $f_M^\#$ определяем дефект инвариантности

$$\Delta_{f_M^\#} = J(f_M^\#) - \pi_{f_M^\#} J(f_M^\#). \quad (\text{П3})$$

Уравнение инвариантности

$$\Delta_{f_M^\#} = 0 \quad (\text{П4})$$

решается методом Ньютона с неполной линеаризацией: для каждого M ищем такое $\delta_{f_M^\#}$, что

$$\begin{cases} P_\Omega(f_M^\# + \delta_{f_M^\#}) = f_M^\#, \\ (1 - \pi_{f_M^\#})DJ(f)|_{f_M^\#} \delta_{f_M^\#} = -\Delta_{f_M^\#}. \end{cases} \quad (\text{П5})$$

Если слои P_Ω – области на аффинных многообразиях, то (П5) – система линейных уравнений. Другой вид этой системы:

$$\begin{cases} \pi_{f_M^\#} \delta_{f_M^\#} = 0, \\ (1 - \pi_{f_M^\#})DJ(f)|_{f_M^\#} \delta_{f_M^\#} = -\Delta_{f_M^\#}. \end{cases} \quad (\text{П5}')$$

Следует особо отметить, что в уравнении (П5) используется неполная линейаризация (в отличие от обычного метода Ньютона) – не производится дифференцирование $\pi_{f_M^\#}$ в $\Delta_{f_M^\#}$ (П3).

Обсуждение приводится в [8]. Отметим только, что для простейших устойчивых самосопряженных линейных систем итерации с неполной линейаризацией (П5) приводят, в случае общего положения, к инвариантному подпространству с самыми большими (т.е. ближайшими к нулю) собственными числами. В отличие от этого, операции с полной линейаризацией приводят в этом случае к инвариантному подпространству, ближайшему к начальному приближению.

После того, как $\delta f_M^\#$ найдено из уравнений (П5), заменяем $f_M^\#$ на $f_M^\# + \delta f_M^\#$, строим новые проекторы P_Ω и повторяем процедуру.

Решение уравнения инвариантности (П4) методом Ньютона с неполной линейаризацией может оказаться сложной задачей – уравнения (П5) хотя и линейны, но не всегда легко разрешимы. Можно попытаться упростить задачу, переходя от уравнения инвариантности к галеркинским приближениям. Простейший пример дают одномерные приближения, когда $\delta f_M^\# = \delta_M \Delta_{f_M^\#}$, а уравнение решается в проекции на $\Delta_{f_M^\#}$:

$$\langle \Delta_{f_M^\#} | (1 - \pi_{f_M^\#}) J(f_M^\# + \delta_M \Delta_{f_M^\#}) \rangle_{f_M^\#} = 0. \quad (\text{П6})$$

Используется энтропийное скалярное произведение $\langle | \rangle_{f_M^\#} = -D^2 S(f)|_{f_M^\#}$.

Решая (П6) методом Ньютона, получаем на первой итерации:

$$\delta M = - \frac{\langle \Delta_{f_M^\#} | \Delta_{f_M^\#} \rangle_{f_M^\#}}{\langle \Delta_{f_M^\#} | DJ(f)|_{f_M^\#} \Delta_{f_M^\#} \rangle_{f_M^\#}}. \quad (\text{П7})$$

Для диссипативных систем знаменатель, чаще всего, отрицателен и это позволяет двигаться дальше. Для консервативных систем одномерные галеркинские приближения не дают удовлетворительного решения, по крайней мере, в комбинации с методом Ньютона (с неполной линейаризацией).

II 2. Энтропийные термодинамические проекторы

Простейший выбор P_Ω очевиден:

$$P_{\Omega}(f) = f_{m(f)}^{\#}; \quad (\text{П8})$$

для f вычисляются значения макропеременных $m(f)$, а по ним – соответствующая точка на многообразии с тем же значением $m(f)$.

Однако, проектор (П8) не всегда удовлетворяет физическим ограничениям.

На множестве U задана вогнутая функция S – энтропия. Рассматриваются два класса систем (П1) – диссипативные, для которых $dS/dt \leq 0$ в силу системы, и консервативные, для которых $dS/dt = 0$. Физически выделены квазиравновесные многообразия f_M^* . Они являются решением экстремальной задачи:

$$\begin{aligned} S(f) &\rightarrow \max, \\ m(f) &= M. \end{aligned} \quad (\text{П9})$$

Использование простейшего проектора (П8) приводит к тому, что векторное поле $\pi_{f_M^*} J(f_M^*)$ на квазиравновесном многообразии сохраняет тип динамики: для консервативных J оно консервативно, а для диссипативных – диссипативно (с той же энтропией). Такое сохранение типа динамики проектором гарантировано лишь для квазиравновесных многообразий.

Однако, практически для любого многообразия $\Omega = \{f_M^{\#}\}$ можно построить такой проектор P_{Ω} , что все $f_M^{\#}$ будут решениями задачи

$$\begin{aligned} S(f) &\rightarrow \max, \\ P_{\Omega}(f) &= f_M^{\#} \end{aligned} \quad (\text{П10})$$

в некоторой окрестности Ω . Для этого достаточно, чтобы для любого M функционал $DS(f)|_{f_M^{\#}}$ аннулировал бы $\ker \pi_{f_M^{\#}}$:

$$DS(f)|_{f_M^{\#}} (\ker \pi_{f_M^{\#}}) = 0. \quad (\text{П11})$$

Таким образом, для контроля над физичностью получаемых приближений необходимо рассматривать проектор P_{Ω} , зависящий от многообразия [8].

П 3. Метод инвариантных многообразий для положительно инвариантных многообразий с фиксированным краем

В задаче об инвариантных сечениях положение точек $f_M^{\#}$ не было фиксировано, важно было лишь то, что выполнялось условие $m(f_M^{\#}) \equiv M$. Существует другой класс

задач, когда необходимо найти положительно инвариантное многообразие с фиксированным краем. Фактически, это задача о построении траектории края в силу системы (П1) при $t \in [0; +\infty)$.

К числу таких задач относится проблема начального слоя [10,11], а также проблема построения пленки неравновесных состояний, обсуждаемая в данной работе.

Итерационным методы, описанные выше, здесь неприменимы, так как они нарушают граничные условия на крае многообразия: если условия инвариантности на крае начального приближения $f_M^\#$ выполнены с точностью до k -ой производной по времени, то метод Ньютона приведет к тому, что после $(k + 1)$ -ой итерации край многообразия изменится (пленка "оторвется" от края).

В предыдущей работе по проблеме начального слоя [10] мы технически преодолели эту сложность. Для этого траектория моделировалась как упругая балка с жестко закрепленным концом. Эта балка в механическом равновесии имела форму приближенной траектории. Далее, она упруго притягивалась к результату итерации по метод Ньютона. Хотя этот прием и позволял избегать отрыва пленки от края, его техническая искусственность вынуждает продолжить поиск новых методов.

Использование итеративного процесса Пикара позволяет сохранить начальные условия. Для уравнения пленки запишем: пусть $q_{M,\tau}^0$ – некоторое приближение, для пленки. Тогда итерация Пикара дает:

$$q_{M,\tau}^1 = q_{M,0} + \int_0^\tau \frac{\partial q_{M,\theta}}{\partial \theta} \Big|_{q_{M,\theta}^0} d\theta. \quad (\text{П12})$$

Здесь $\frac{\partial q_{M,\theta}}{\partial \theta} \Big|_{q_{M,\theta}^0}$ – правая часть (50), вычисленная в точке $q_{M,\theta}^0$.

Определим, как всегда $\Delta_{M,\theta} = \frac{\partial q_{M,\theta}}{\partial \theta} \Big|_{q_{M,\theta}^0} - \frac{\partial q_{M,\tau}^0}{\partial \theta}$ – разность векторного поля и его проекции на приближенное многообразие. Тогда итерация Пикара принимает вид:

$$q_{M,\tau}^1 = q_{M,\tau}^0 + \int_0^\tau \Delta_{M,\theta} d\theta. \quad (\text{П13})$$

Итерация Пикара дает хороший результат при достаточно малых τ , но может быть слишком радикальна при больших. Можно использовать итерации Пикара с весом, который обеспечит существенную зависимость поправки $q_{M,\tau}^1$ не от всех $\Delta_{M,\theta}$, $0 \leq \theta \leq \tau$, а только в некотором отрезке $\theta \in [\tau - h; \tau]$. Например,

$$q_{M,\tau}^1 = q_{M,\tau}^0 + \int_0^\tau e^{(\theta-\tau)/h} \Delta_{M,\theta} d\theta. \quad (\text{П13})$$

Возможен и другой выбор весовой функции. При больших τ , достаточно малых h и $\Delta \neq 0$ формула (П13) дает:

$$q_{M,\tau}^1 = q_{M,\tau}^0 + h\Delta_{M,\tau} + o(h). \quad (\text{П14})$$

При малых τ получаем:

$$q_{M,\tau}^1 = q_{M,\tau}^0 + \frac{\tau}{k+1} \Delta_{M,\tau} + o(\tau\Delta), \quad (\text{П15})$$

где k – порядок нуля $\Delta_{M,\tau}$ в точке $\tau = 0$.

Срачивая (П14) и (П15) получаем

$$q_{M,\tau}^1 \approx q_{M,\tau}^0 + \frac{h\tau}{(k+1)h+\tau} \Delta_{M,\tau}. \quad (\text{П16})$$

Во всех случаях возникает вопрос о выборе шага. Наиболее простое решение существует для формулы (П16): можно выбирать шаг h , зависящий от точки:

$$q_{M,\tau}^1 = q_{M,\tau}^0 + \lambda_{M,\tau} \Delta_{M,\tau}, \quad (\text{П17})$$

где $\lambda_{M,\tau} = \min \{\tau/(k+1); \delta_{M,\tau}\}$, $\delta_{M,\tau}$ находится из условия остановки в направлении Δ (П6).

Разнообразные сочетания Пикаровских и Ньютоновских итераций могут породить отдельный предмет исследований. Простейшая их гибридизация состоит в следующем. Пусть для каждого (M, τ) найден $\delta_{M,\tau}$ – шаг по методу Ньютона (П5). Положим

$$q_{M,\tau}^1 = q_{M,\tau}^0 + (1/h) \int_0^\tau e^{(\theta-\tau)/h} \delta q_{M,\theta} d\theta. \quad (\text{П18})$$

Множитель $1/h$ перед интегралом нужен для того, чтобы при больших τ величина шага по направлению $\delta q_{M,\theta}$ была близка к 1. Аналог (П16) дается формулой

$$q_{M,\tau}^1 = q_{M,\tau}^0 + \frac{\tau}{(k+1)h+\tau} \delta q_{M,\theta}. \quad (\text{П19})$$

Характерный масштаб времени h , разделяющий в (П18), (П19) Пикаровскую итерацию (малые времена, $\tau \ll h$) и Ньютоновскую (большие времена, $\tau \gg h$), можно оценить по радиусу кривизны (46) (в общем, из отношений $\|\dot{q}\|/\|\ddot{q}\|$ или $\|\dot{q}\|/\|\ddot{q}_\perp\|$).

Дальнейшее развитие методов будет определяться конкретными задачами, решаемыми с их помощью.

Благодарности. А.Н.Г. благодарен Г.Ш. Фридману за стимулирующее обсуждение значимости этой работы. Авторы признательны Михаилу Громову за дух геометрии и возможность выполнить часть этой работы в IHES, а Гансу-Христиану Оттингеру за очень плодотворный вопрос об общем виде огрубления и многочисленные полезные дискуссии. Мы благодарны Т.Г. Поповой за труд по подготовке рукописи к печати.

ЛИТЕРАТУРА

1. Фейнман Р. Характер физических законов. – М.: Наука, 1987. 160 с.
2. R.M. Lewis, J. Math. Phys., 1967. V. 8. P. 1448.
3. Gorban, A. N., & Karlin, I. V. (1992). Thermodynamic parameterization // *Physica A*, 190, 393-404.
4. Горбань А.Н., Карлин И.В. Квазиравновесные приближения и нестандартные разложения в теории кинетического уравнения Больцмана // Сб. Математическое моделирование в биологии и химии. Новые подходы / Под. ред. Хлебопроса Р. Г.- Новосибирск: Наука.- 1992.- С. 69-117.
5. H. Grabert, *Projection Operator Techniques in Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Berlin, Springer, 1982.
6. Kazantzis N. Singular PDEs and the problem of finding invariant manifolds for nonlinear dynamical systems // *Physics Letters*, 2000. V. A 272(4). P. 257-263.
7. Beyn, W.-J., & Kless, W. Numerical Taylor expansions of invariant manifolds in large dynamical systems // *Numerische Mathematik*, 1998. V. 80, P. 1-38.
8. Gorban, A. N., & Karlin, I. V. Method of invariant manifolds and regularization of acoustic spectra // *Transport Theory and Stat. Phys.*, 1994. V. 23, P. 559-632.
9. Gorban, A. N., Karlin, I. V., Ilg, P., & Ottinger, H. C. Corrections and enhancements of quasi-equilibrium states // *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 2001. V. 96(1-2), P. 203-219.
10. Gorban, A. N., Karlin, I. V., Zmievskii, V. B., & Nonnenmacher, T. F. Relaxational trajectories: global approximations // *Physica A*, 1996. V. 231, 648-672.
11. Gorban, A. N., Karlin, I. V., & Zmievskii, V. B. Two- step approximation of space-independent relaxation // *Transp. Theory Stat. Phys.*, 1999. V. 28(3), P. 271-296.
12. Арнольд В.И. Математические методы классической механики

13. Боголюбов Н.Н., Митропольский Ю.А. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М.: 1955.
14. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов.- М.: Изд-во иностр. лит. 1960.- 510 с.
15. Колмогоров А.Н. О сохранении условно-периодических движений при малом изменении функции Гамильтона // ДАН СССР.- 1954. Т. 98 Вып. 4.- С. 527-530.
16. Арнольд В.И. Малые знаменатели и проблемы устойчивости в классической и небесной механике // Усп. мат. наук.- 1963. Т.18.- №6.- С. 91-192.
17. Gorban A.N., Karlin I.V., Ottinger H.C. Tatarinova L.L. Ehrenfest's argument extended to a formalism of nonequilibrium thermodynamics // Phys. Rev. E. 2001.– Vol. 63.– 066124.
18. Gorban A. N., Karlin I. V. Macroscopic dynamics through coarse-graining: A solvable example // Phys. Rev. E., 2002. V 65. 026116(1-5) .
19. Gorban A. N., Karlin I. V. Reconstruction lemma and fluctuation-dissipation theorem // Revista Mexicana de Fisica, 2002. V. 48, Suplemento 1, PP. 238-242.
20. Gorban A. N., Karlin I. V. Geometry of irreversibility // In: Recent Developments in Mathematical and Experimental Physics, Volume C: Hydrodynamics and Dynamical Systems, Ed. F. Uribe. Kluwer, Dordrecht, 2002. P. 19-43.
21. Ehrenfest P. Collected Scientific Papers. North-Holland, Amsterdam, 1959. P. 213–300.
22. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971. 416 с.
23. Jaynes E.T. Phys. Rev. 1957. V. 106, P. 620; V. 108, P. 171.
24. Коган А.М., Розоноэр Л.И. О макроскопическом описании кинетических процессов // ДАН СССР.- 1964. Т.158.- Вып. 3.- С.566--569.
25. Розоноэр Л.И. Термодинамика необратимых процессов вдали от равновесия //Термодинамика и кинетика биологических процессов / Под. ред. Зотина А. И.- М.: Наука.- 1980.- С.169-186.
26. Коган А.М. Вывод уравнений грэдовского типа и изучение их релаксационных свойств методом максимизации энтропии // Прикл. мат. и механика.- 1965. Т.29. Вып.1.- С.122-133.