Министерство высшего и среднего специального образования РСФСР
ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ РАДИОФИЗИЧЕСКИЙ
ИНСТИТУТ (НИРФИ)

Препринт № 139

НЕЛИНЕЙНЫЕ ФЛУКТУАЦИОННО-ДИССИПАЦИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ И СТОХАСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ В НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКЕ.

II. КИНЕТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ И ВАРИАЦИОННЫЕ ПРИНЦИПЫ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНЫХ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ.

Г. Н. Бочков
Ю. Е. Кузовлев

Горький 1980

УДК 536 758

На основе полной системы флуктуационно-диссипационных соотношений, рассмотренных в пeрвой части работы, сформулирован вариационный принцип для нелинейных необратимых процессов. Согласно этому принципу, функционал виртуального производства энтропии (аналог действия в механике) принимает абсолютно минимальное значение на реальной траектории системы. Найдены универсальная структура «кинетического потенциала» и «лагранжиана» системы, каждый из которых содержит полную информацию о флуктуациях макропеременных. Установлена связь лагранжиана с марковским кинетическим оператором макропеременных. Рассмотрены фундаментальные свойства диссипативных потенциалов, отражающие микроскопическую обратимость. Полученный вариационный принцип применим как к замкнутым системам (стационарное состояние которых равновесно), так и к открытым системам (когда внешние динамические или термодинамические силы вызывают поток энтропии через систему и приводят ее в стационарное неравновесное состояние). Рассмотрены канонические преобразования макропеременных.

I. ВВЕДЕНИЕ

Полученные в первой части настоящей работы [1] универсальные флуктационно-диссипационные соотношения (ФДС) непосредственно подводят нас к вариационной форме теории, описывающей необратимые процессы переноса в произвольной нелинейной системе. Вопрос о существовании и форме вариационного принципа нелинейной неравновесной термодинамики (ННТ) обсуждался в литературе многократно, но остался фактически нерешенным. Наиболее подробное обсуждение этого вопроса содержится, по-видимому, в монографии Дьярмати [2, 6], где утверждалось, что вариационная формулировка ННТ была бы возможна при выполнении нелинейных соотношений взаимности [6]. Поскольку же статистический вывод этих соотношений отсутствовал, а феноменологическим путем они вообще не могут быть получены, то вопрос оставался открытым. Однако анализ точных нелинейных ФДС совершенно определенно показывает [5], что нелинейные перекрестные процессы переноса в общем случае не являются взаимными (подчеркнем, что из тех же самых ФДС вытекают линейные соотношения Онсагера). Иными словами, в общем случае вектор термодинамических потоков содержит, помимо градиентной (потенциальной) компоненты, также вихревую компоненту[1], которая может привести к периодическому диссипативному процессу (даже в отсутствие конвективных движений). Такая ситуация, как отмечали Гленсдорф и Пригожин [3], реализуется, например, в стационарном неравновесном состоянии (СНС), когда в результате неустойчивости возникает периодическая диссипативная структура. При этом функция производства энтропии меняется со временем немоно-

[1] Здесь рассматривается вектор потоков $I_\alpha = I_\alpha(x)$ в пространстве термических сил x_α.

тонно и теряет ту роль кинетического потенциала, которую она играет в линейной теории, а привычные формы вариационного принципа для процессов переноса [2, 6] оказываются непригодными.

Разница между линейной и нелинейной теориями обусловлена тем, что в последней кинетические свойства системы и стохастические характеристики случайных воздействий со стороны термостата (те и другие связаны ФДС) зависят от макроскопического состояния системы. Именно эта зависимость приводит к невзаимности и непотенциальности процессов переноса и нарушению обычных вариационных принципов. Гленсдорф и Пригожин еще в 1965 г. заметили [3, 4] при чисто феноменологическом анализе ряда конкретных задач, что можно получать правильные нелинейные уравнения переноса из особого, локального, по их терминологии, вариационного принципа, в котором при вариациях термодинамических сил кинетические параметры системы замораживаются и не варьируются. Вариационный принцип дополняется необходимым условием локальности: экстремальные значения виртуальных (вообще говоря, физически нереализуемых) сил совпадают с их действительными значениями. Это условие интерпретируется в [3] как утверждение о совпадении средних и наиболее вероятных, по отношению к малым флуктуациям, значений макропеременных. Фигурирующий в вариационном принципе (ВП) локальный кинетический потенциал [3] рассматривается как производство энтропии (ПЭ) при виртуальных процессах в окрестности данного состояния.

Концепция локального кинетического потенциала и связанного с ним ВП дала уже некоторые полезные практические результаты [3, 7]. К сожалению, в рамках чисто феноменологической теории [3] эту концепцию нельзя обосновать с необходимой, с точки зрения статистической термодинамики, общностью и строгостью. Результаты [3] относятся к конкретным специальным системам и получены подбором кинетического потенциала (КП) к заранее известным уравнениям переноса. Но в общей теории, наоборот, КП должен служить источником уравнений переноса, а потому должен определяться независимо от них.

Перечислим основные принципиальные вопросы, возникшие в связи с идеей КП, которые не могут быть решены феноменологической теорией[2].

1) Можно ли дать совершенно общее определение КП, обладающее такими свойствами, которые делают его естественным обобщением ПЭ? В частности, на экстремальной (физической) траектории системы КП должен совпадать с ПЭ. 2) Какова строгая статистическая интерпретация и статистическое обоснование КП? Каким образом КП зависит от флуктуационных характеристик системы и какую именно информацию о флуктуациях он содержит? В линейной теории КП тождествен ПЭ, а, зная ПЭ, можно с помощью гипотезы Онсагера (или, более строго, с помощью флуктуационно-диссипационной теоремы) написать правильные стохастические уравнения Ланжевена. Как выглядит ситуация в нелинейном случае? 3) Можно ли найти универсальную структуру КП как функции макропеременных? Каков рецепт конструирования КП и нелинейных уравнений переноса (обобщенных гидродинамических уравнений)?

Ясно, что ответ на поставленные вопросы можно получить лишь в статистической теории, явно учитывающей флуктуации, и что здесь будут полезны нелинейные ФДС [1, 5, 8, 9]. На самом деле неожиданно оказывается, что на основе ФДС можно полностью и однозначно решить все эти вопросы. Таким образом, развитая в [1] флуктуационно-диссипационная теория[3] содержит необходимые предпосылки для канонической вариационной формулировки ННТ, а ФДС гарантируют существование ВП для любой нелинейной системы. Более того, ФДС определяют в важнейших чертах структуру КП, форму и физический смысл ВП.

Полученные в первой части работы ФДС (см., также [8]) ведут к новому, статистическому, определению КП, которое дает обоснование и обобщение феноменологической конструкции Пригожина и Гленсдорфа, но по сути дела совершенно независимо от нее. В первой части работы мы уже построили КП самого общего вида. Мы показали, что КП целиком определяется флуктуационными характеристиками системы. И наоборот, КП однозначно определяет свойства нелинейных (лан-

---

[2] Предложенное в [3] статистическое истолкование носит интуитивный характер. Это обстоятельство (и в первую очередь недостаточно ясный физический смысл КП) явилось причиной критики в адрес концепции КП (см., например, [6]).

[3] См. также [5, 8, 9] и цитированные в [1] работы по марковской теории.

жевеновских) случайных источников в уравнениях переноса и форму марковского кинетического оператора (для построения его нужно еще задать равновесное распределение макропеременных, либо функцию свободной энергии, т. е. конкретизировать зависимость между термическими силами и неравновесными средними значениями макропеременных). Следовательно, КП заключает в себе полную информацию о флуктуациях, которую в нелинейном случае нельзя извлечь из ПЭ. Можно сказать, что в нелинейной теории нельзя «избавиться» от флуктуаций.

Связь между различными уровнями описания изображается такой схемой:

Гидродинамические уравнения (уравнения переноса)	$\longleftarrow$	Кинетический потенциал, вариационные принципы	$\longrightarrow$ $\longleftarrow$	Марковские стохастические модели.

Здесь стрелки обозначают импликацию. Все связи определяются ФДС. Обратный переход от гидродинамики к КП, строго говоря, неоднозначен, т. е. одна и та же гидродинамическая модель может сопрягаться с различными стохастическими моделями. Однако ФДС налагают жесткие ограничения на структуру КП [1]. Поэтому (и это подтверждается анализом конкретных задач) в большинстве случаев по гидродинамическим уравнениям однозначно восстанавливаются КП и стохастические уравнения системы. В противном случае надо привлечь дополнительную информацию о статистике процесса переноса (не впадая в противоречие с ФДС). Если же оказалось, что из гидродинамических уравнений вообще нельзя вывести КП с необходимыми свойствами, то это свидетельствует о неправильности с термодинамической точки зрения и физической нереализуемости таких уравнений. Несмотря на отсутствие нелинейных соотношений взаимности, процессы переноса обладают опрделенной симметрией. Дело в том, что виртуальные силы влияют на потоки всегда взаимно, а соответствующие локальные («замороженные») тензоры коэффициентов переноса всегда симметричны [1, 8]. Кстати заметим, что этот факт в статистической теории доказывается с помощью ФДС тривиально, а в феноменологической — его пришлось бы постулировать.

Задача настоящей работы состоит в выводе из ФДС различных форм вариационного принципа ННТ, анализа возникающих при этом модификаций КП (диссипативных функций) и их связи со стохастическими моделями. Дается рецепт вывода гидродинамических уравнений из ВП, полностью подобного модифицированному принципу Гамильтониана в механике [10], причем роль канонических координат и импульсов играют макропеременные и сопряженные с ними термические силы. Перейдя от термических сил к виртуальным потокам (скоростям) с помощью преобразования Лежандра, получим принцип Гамильтона в лагранжевой форме. «Лагранжиан», как будет показано, имеет смысл производства энтропии (рассеиваемой мощности, в энергетических единицах) в виртуальном процессе. Будет найдено общее выражение для лагранжиана и доказан ряд его важных свойств, которые обеспечивают ясную физическую трактовку ВП.

Будем пользоваться всюду, кроме разд. 5, дискретными обозначениями и «дискретной» терминологией, но результаты в полной мере переносятся и на распределенный случай. Однако при анализе распределенных систем в качестве особых, фактически независимых переменных, естественно выделяются градиенты термических сил, сопряженные с векторными пространственными потоками. Оперируя градиентами, можно получить несколько специальных, более простых и удобных для применения, форм ВП для распределенных систем. В разд. 5 мы рассмотрим некоторые из возможностей, не касаясь вопросов, связанных с граничными условиями.

Наиболее общее выражение для КП в распределенном случае является пространственно-нелокальным (и содержит пространственные производные любого порядка). Это выражение вместе с правилом вывода уравнений переноса из КП дает нам стандартный метод построения моделей сплошной среды любой степени сложности (нелинейных, нелокальных и т. п.). При этом ни одна возможность не будет упущена, и все модели удовлетворяют ФДС и термодинамически допустимы. Очень важно, что при этом мы всегда, в соответствии со статистическим смыслом КП (фактически КП — это характеристический функционал ланжевеновских сил), контролируем статистическую подоплеку гидродинамической модели и можем дать ее стохастический эквивалент. В важном классе задач, когда все случайные пространственные потоки и все скалярные случайные источники (например, связанные с химическими реакциями) δ-коррелированы в пространстве, уравнения переноса содержат производные порядка не выше второго, а соответствующий ВП принимает простую локальную форму и записывается через плотность «лагранжиана»[4].

В разд. 2 дается определение КП, обсуждаются его свойства и статистическая интерпретация. В разд. 3 сформулирован ВП для стационарного процесса переноса через открытую систему в терминах сил и потоков. В разд. 4 рассмотрен ВП нестационарных процессов в замкнутой системе, в разд. 5 — его «распределенный» вариант. Полученные в [1] ФДС для открытых систем и их марковская реализация позволяют сформулировать также ВП для нестационарных процессов в открытой системе, которая описывается более детально не только глобальными внешними потоками, но и некоторыми внутренними макропеременными. Этому важному и интересному вопросу посвящен разд. 6. Соответствующий КП имеет здесь смысл избыточного производства энтропии, которое может оказаться и отрицательным (и тогда возникает неустойчивость, приводящая к временной диссипативной структуре).

2. КИНЕТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ И СТОХАСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

Согласно [1], уравнения переноса, связывающие между собой обобщенные потоки $I_\alpha = Q_\alpha$ и динамические силы x_α или термические силы x_α, можно записать в следующей канонической форме:

$$\dot{Q}_\alpha \equiv I_\alpha = \bar{I}_\alpha(x;\ \mathrm{x}) = \left\{ \frac{\partial}{\partial z_\alpha} F(z;\ x;\ \mathrm{x}) \right\}_{z=\mathrm{x}+x}; \tag{2.1}$$

$$x_\alpha = x_\alpha(Q); \quad x_\alpha(Q) = T\partial S(Q)/\partial Q_\alpha; \tag{2.2}$$

$$F(z;\ x;\ \mathrm{x}) = z_\alpha \bar{I}^r_\alpha(x;\ \mathrm{x}) + \Phi(z;\ x;\ \mathrm{x}); \tag{2.3}$$

$$\Phi(z;\ x;\ \mathrm{x}) = \frac{1}{2!}\lambda_{\alpha\beta}(x;\ \mathrm{x}) z_\alpha z_\beta + \frac{1}{3!}\lambda_{\alpha\beta\gamma}(x;\ \mathrm{x}) z_\alpha z_\beta z_\gamma + \cdots = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \lambda_n(x;\ \mathrm{x}) z^n. \tag{2.4}$$

Здесь Q_α — это средние значения макропеременных, соответ-

[4] Но и в этом частном случае предположенная в [6] симметричная, взаимная форма соотношений между потоками и градиентами сил не является необходимой, так как локальные коэффициенты переноса могут зависеть от градиентов сил.

ствующих обычно (но не обязательно) экстенсивным физическим величинам; I_α^r — обратимые компоненты потоков или, иначе говоря, конвективные члены в макроскопических уравнениях движения. Функцию $F(z;\ x;\ \mathrm{x})$ мы называем локальным кинетическим потенциалом (КП), следуя в терминологии Гленсдорфу и Пригожину, которые ввели аналогичный объект в своей чисто феноменологической теории [3, 4]. Как уже отмечалось во введении и как это очевидно из [1, 5, 8], в нашей статистической теории само существование КП и его важные свойства оказываются необходимыми следствиями универсальных ФДС.

Согласно [1], тензоры $\lambda_n = \lambda_{\alpha_1 \ldots \alpha_n}$ следующим образом выражаются через коэффициенты диффузии D_n, характеризующие статистическую структуру процесса переноса:

$$\lambda_n(x;\ \mathrm{x}) = (-1)^n \frac{1}{2} \beta^{n-1} D_n(x;\ \mathrm{x}), \tag{2.5}$$

где $\beta = T^{-1}$ — обратная температура термостата, входящего в состав рассматриваемой термодинамической системы[5]. Тензоры коэффициентов диффузии определяются формулой

$$\begin{gathered} D_{\alpha_1 \ldots \alpha_n} = \frac{1}{\tau} \langle \Delta Q_{\alpha_1}(\tau), \ldots, \Delta Q_{\alpha_n}(\tau) \rangle, \\ \Delta Q_\alpha(\tau) \equiv Q_\alpha(\tau) - Q_\alpha(0), \end{gathered} \tag{2.6}$$

где интервал времени τ много больше времени корреляции τ_μ флуктуаций потоков (т. е. ланжевеновских источников, входящих в стохастический вариант гидродинамических уравнений (2.1), (2.2)), но много меньше времени корреляции и времени релаксации к равновесию τ_m макропеременных Q_α. Угловая скобка с запятыми внутри в (2.6) обозначает совместный кумулянт приращений ΔQ_α, соответствующий неравновесному квазистационарному (или стационарному, если $\tau_m \to \infty$ в термодинамическом пределе) состоянию, которое характери-

[5] Природа термостата и его «местоположение» не играют роли, как и вообще в неравновесной термодинамике. Важно лишь, что при отсутствии внешних возмущений контакт с термостатом, имеющим бесконечную теплоемкость, в конце концов приведет систему в равновесие. По существу, это единственное предположение, которое нужно добавить к точным динамическим ФДС [5, 9], чтобы построить на основе ФДС термодинамическую теорию.

зуется внешними динамическими силами x_α и термическими силами x_α. Последние вводятся как параметры квазиравновесного вероятностного распределения макропеременных (подчеркнем, что в [1] при построении канонической формы гидродинамических уравнений мы использовали квазиравновесную аппроксимацию лишь для макропеременных, но не для полной микроскопической функции распределения). Именно, зависимость (2.2) задается соотношением

$$
\begin{aligned}
Q_\alpha &= \int q_\alpha W_0(q) e^{-\beta x q} dq \, \Xi^{-1}(-\beta x), \\
\Xi(u) &\equiv \int W_0(q) e^{uq} dq,
\end{aligned}
\tag{2.7}
$$

где $W_0(q) \sim \exp(-\beta\varphi(q))$ — равновесное распределение макропеременных, $\varphi(q)$ — функция свободной энергии системы.

В [1] показано, что такое определение термических сил оказывается не только естественным, но и необходимым. Это видно из следующего. Во-первых, при таком определении точные ФДС для марковских кинетических коэффициентов (они строго выводятся [9] из динамических ФДС и марковской гипотезы) переходят в точные ФДС для стационарных неравновесных состояний. Во-вторых, такие термические силы входят в теорию формально равноправно и аддитивно с динамическими. В-третьих, такое определение согласуется как с теорией неравновесного статистического оператора Зубарева, так и с известным теоретико-информационным подходом к неравновесной термодинамике. В-четвертых, формулы (2.1) — (2.4), (2.7) образуют замкнутую относительно $Q_\alpha(t)$ систему уравнений, которая описывает всегда устойчивую по Ляпунову [1, 8] эволюцию замкнутой системы в согласии со вторым законом термодинамики. В линейном и гауссовском приближении из этих уравнений получается обычный формализм Онсагера. Наконец, в разд. 4 мы докажем, что эти уравнения допускают вариационную формулировку.

Приведенные аргументы позволяют также утверждать, что сформулированное в [1] правило перехода от марковской модели флуктуаций $q_\alpha(t)$ к марковским (первого порядка по времени) гидродинамическим уравнениям для средних $Q_\alpha(t)$ можно рассматривать как каноническую процедуру составления уравнений ННТ. Это утверждение можно доказать и другим путем. Именно, всякие необратимые гидродинамические уравнения представляют собой, с точки зрения статистической механики, результат условного усреднения обратимых стохастических уравнений [12]. Требование же обратимости (точнее говоря, условие детального баланса для равновесных флуктуаций) в марковской теории приводит к представлению вида (2.1), (2.4), (2.6) при любом условии усреднения. Таким образом, уравнения (2.1) — (2.5), (2.7) в совокупности с определением (2.6) и ФДС [1, 5, 8],

$$(-\varepsilon)^n \lambda_n(\varepsilon x;\ \varepsilon \mathrm{x}) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!}(x+\mathrm{x})^m \lambda_{n+m}(x;\ \mathrm{x}) \quad (n \geqslant 0)$$

$$(\lambda_0 \equiv 0, \quad \lambda_1(x;\ \mathrm{x}) = -\frac{1}{2} I(x;\ \mathrm{x})), \tag{2.8}$$

представляют собой наиболее общие уравнения ННТ (для замкнутых систем). В разд. 6 будет дано их простое обобщение на открытые системы.

Рассмотрим вытекающую из (2.1), (2.4), (2.8) каноническую форму уравнений переноса:

$$\bar{I}_\alpha = \bar{I}_\alpha(x;\ \mathrm{x}) + \lambda_{\alpha\beta}(x;\ \mathrm{x})(x_\beta + \mathrm{x}_\beta) + + \frac{1}{2}\lambda_{\alpha\beta\gamma}(x;\ \mathrm{x})(x_\beta + \mathrm{x}_\beta)(x_\gamma + \mathrm{x}_\gamma) + \dots \tag{2.9}$$

Обратимые компоненты потоков $\bar{I}^r$ в общей теории никак не конкретизируются, но они подчиняются вследствие (2.8) соотношению [1, 5]

$$(x_\alpha + x_\alpha) I^r_\alpha(x;\ x) = 0, \tag{2.10}$$

показывающему, что конвективные процессы сами по себе не увеличивают энтропию. Если все переменные времени — четные ($\varepsilon_\alpha = 1$), то уравнения (2.9) полностью необратимы и $\bar{I}^r = 0$.

Согласно (2.9) диссипативные потоки зависят от сил двояким образом: 1) непосредственно, как в линейном случае, и 2) через коэффициенты диффузии. Первая явная часть зависимости определяется статистикой процесса переноса, степенью и характером негауссовости шумовых ланжевеновских источников[6]. Для важного класса систем (будем их называть гаус-

[6] Разумеется, гауссовость или негауссовость источников — понятие относительное. При переходе к другому набору макропеременных и другому уровню описания изменятся как стохастические, так и диссипативные параметры модели (но сохраняются ФДС между ними). Эта относительность не всегда принимается во внимание.

совскими) с гауссовскими источниками имеем из (2.5)—(2.8)

$$I_\alpha = I^r_\alpha + \lambda_{\alpha\beta}(x;\ \mathrm{x})(x_\beta + \mathrm{x}_\beta),\quad D_n = \lambda_n = 0 \quad (n \geqslant 2); \tag{2.11}$$

$$\lambda_{\alpha\beta}(x;\ \mathrm{x}) = \lambda_{\beta\alpha}(x;\ \mathrm{x}) = \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \lambda_{\alpha\beta}(\varepsilon x;\ \varepsilon \mathrm{x}). \tag{2.12}$$

Если источники негауссовские, то все тензоры λ_n отличны от нуля. Эти тензоры всегда полностью симметричны по самому своему статистическому определению (2.5), (2.6):

$$\lambda_{\alpha\beta} = \lambda_{\beta\alpha},\quad \lambda_{\alpha\beta\gamma} = \lambda_{\alpha\gamma\beta} = \lambda_{\beta\alpha\gamma} = \cdots,\ \cdots \tag{2.13}$$

Это фундаментальное свойство и каноническое представление (2.9) позволяют рассматривать λ_n как локальные нелинейные коэффициенты переноса. Термин «локальные» означает, что эти коэффициенты зависят от состояния системы, а точнее, от состояния термостата, поскольку именно он определяет статистические характеристики шумовых источников. Мы видим, что локальные коэффициенты переноса подчиняются соотношениям взаимности (2.13). Этого нельзя сказать о действительных коэффициентах переноса, которые не зависят от сил и задаются формулой (при $\mathrm{x} = 0$)

$$\overline{I}_\alpha = \overline{I}^r_\alpha + \gamma_{\alpha\beta} x_\beta + \frac{1}{2!}\gamma_{\alpha\beta\gamma} x_\beta x_\gamma + \ldots;\quad \gamma_{\alpha\ldots\delta} = \mathrm{const},$$

$$\gamma_{\alpha\beta} = \lambda_{\alpha\beta}(0),\quad \gamma_{\alpha\beta\gamma} = \lambda_{\alpha\beta\gamma}(0) + \frac{\partial}{\partial x_\gamma}\lambda_{\alpha\beta}(0) + \frac{\partial \lambda_{\alpha\gamma}}{\partial x_\beta}(0), \ldots$$

Отсюда находим, что

$$\gamma_{\alpha\beta\gamma} - \gamma_{\beta\alpha\gamma} = \frac{\partial \lambda_{\alpha\gamma}}{\partial x_\beta}(0) - \frac{\partial \lambda_{\beta\gamma}}{\partial x_\alpha}(0) \neq 0$$

в общем случае. Вторая часть зависимости потоков от сил (через локальные коэффициенты переноса) приводит к нарушению нелинейных соотношений взаимности и к непотенциальности вектора потоков в пространстве сил.

Нужно подчеркнуть, что в негауссовской системе λ_n обязательно зависят от сил. Это видно из ФДС (2.8), поскольку, полагая в правой части (2.8) $\lambda_n = \mathrm{const}$, $\lambda_{n+1} = \mathrm{const}$ и т. д., придем к противоречию.

Ввиду (2.8) λ_n не являются независимыми параметрами теории. Кроме того, ряд важных ограничений на возможную форму λ_n вытекает из их статистического смысла ((2.5), (2.6)). Например, из (2.6) получаем, что

$$\lambda_{\alpha\beta}(x;\ \text{x}) z_\alpha z_\beta > 0, \tag{2.14}$$

т. е. матрица $\lambda_{\alpha\beta}$ при всех x, x положительно определенная. Другие свойства локальных кинетических коэффициентов рассмотрим ниже[7]. Итак, главнейшая задача заключается в том, чтобы изучить вытекающие из ФДС свойства КП и выделить его действительно независимые и произвольные параметры.

Эта задача уже почти решена в [1]. Наиболее просто она выглядит в марковской неравновесной термодинамике в которой формула (2.6) заменяется (в макроскопической шкале времени) на

$$D_n = \lim_{\tau\to 0} \frac{1}{\tau} \langle (\Delta Q(\tau))^n \rangle . \tag{2.15}$$

Из (2.15) следует, что функция

$$\exp\Big[\tau D(iu;\ x;\ \text{x}) \Big] = \exp\Big[\tau \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(iu)^n}{n!} D_n(x;\ \text{x}) \Big] \tag{2.16}$$

при любом, сколь угодно малом значении τ, есть характеристическая функция вероятностного распределения. Поэтому (2.16) — это характеристическая функция безгранично-делимого распределения, и ее логарифм всегда можно представить в форме Леви-Хинчина [11]:

$$\begin{gathered} D(iu;\ x;\ \text{x}) = iu\bar{I}(x;\ \text{x}) + \\ + \int \frac{1}{|q|^2} (e^{iuq} - 1 - iuq)\, G(q;\ x;\ \text{x})\, dq , \end{gathered} \tag{2.17}$$

где функция G неотрицательна. Из (2.4), (2.5), (2.17) находим следующее представление для КП [1]:

---

[7] Ясно, что если забыть о статистической природе теории и соотношениях типа (2.14), то для формального выбора КП (2.4) откроются неограниченные возможности. Можно, например, взять $F = z_\alpha \overline{I_\alpha}$. Однако подобные «потенциалы» не имеют никакого статистического и термодинамического смысла.

$$\Phi(z;\ x;\ \mathrm{x}) = \int \frac{1}{|a|^2}(e^{az} - 1 - az) R(a;\ x;\ \mathrm{x})\,da \equiv$$

$$\equiv \int \frac{1}{2\beta|q|^2}(e^{-\beta zq} - 1 + \beta zq)\, G(q;\ x;\ \mathrm{x})\,dq = \tag{2.18}$$

$$= \frac{1}{2\beta}\left\{D(-\beta z;\ x;\ \mathrm{x}) + \beta z I(x;\ \mathrm{x})\right\};$$

$$R(a;\ x;\ \mathrm{x}) \equiv \frac{1}{2} G(-Ta;\ x;\ \mathrm{x}) \geqslant 0. \tag{2.19}$$

ФДС (2.8), (2,9) принимают следующий вид [1.5]:

$$I_\alpha = I^r_\alpha(x;\ \mathrm{x}) + \frac{1}{2}\int \frac{1}{|q|^2}\left[1 - e^{-\beta(x+\mathrm{x})q}\right] q_\alpha G(q;\ x;\ \mathrm{x})\,dq; \tag{2.20}$$

$$G(-\varepsilon q;\ \varepsilon x;\ \varepsilon\mathrm{x}) = e^{-\beta q(x+\mathrm{x})} G(q;\ x;\ \mathrm{x}); \tag{2.21}$$

$$P(x;\ \mathrm{x}) = \beta(x + \mathrm{x})\, I(x;\ \mathrm{x}) = 2\beta\Phi(x + \mathrm{x};\ x;\ \mathrm{x}). \tag{2.22}$$

В последнем равенстве $P(x;\ \mathrm{x})$ — производство энтропии в системе [1]. Это равенство можно получить либо из двух предыдущих, либо из равенства

$$D(-\beta(x + \mathrm{x});\ x;\ \mathrm{x}) = 0, \tag{2.23}$$

которое вытекает из (2.8) при $n = 0$.

В представлении (2.18) все требования, которые нужно предъявить к КП и которые полностью отражают статистическую природу КП, выражаются соотношениями (2.19), (2.21). Оба эти соотношения имеют принципиальный характер. Из них непосредственно вытекают термодинамические свойства КП. Перечислим их [1, 8].

1. $\Phi(z;\ x;\ \mathrm{x}) \geqslant 0.$ (2.24)

Это свойство — простое следствие (2.19) и неотрицательности функции $e^\eta - 1 - \eta$. Очевидно, $\Phi = 0$ в единственной точке $z = 0$.

2. $2\beta F(x+\mathrm{x};\ x;\ \mathrm{x}) = P(x;\ \mathrm{x}) \geqslant 0.$ (2.25)

Это — следствие (2.10) и (2.22).

3. КП является строго выпуклой функцией z_α:

$$b_\alpha b_\beta^* \frac{\partial^2}{\partial z_\alpha \partial z_\beta} \Phi(z;\ x;\ \mathrm{x}) > 0. \tag{2.26}$$

4. Производная КП порядка $2n$ по любому направлению в пространстве z также является выпуклой функцией z.

Свойства 3 и 4 — очевидное следствие (2.18), (2.19). При $z=0$ из (2.26) получим (2.14). Таким образом, зависимость Φ от z относится к очень специальному классу функций.

Свойства (2.24) — (2.26) приводят к естественной интерпретации КП,

$$\Pi(z;\ x;\ \mathrm{x}) \equiv 2\beta F(z;\ x;\ \mathrm{x}), \tag{2.27}$$

как производства энтропии в виртуальном (нефизическом) состоянии системы, в котором силы z, вызывающие макроскопические усредненные потоки, не совпадают с силами $(x+\mathrm{x})$, характеризующими состояние термостата. Переменные z играют роль виртуальных сил, не затрагивающих термостат. В реальном процессе при $z = x + \mathrm{x}$ термостат жестко связан с макропеременными, а КП (2.27) совпадает с действительным производством энтропии. В виртуальном процессе действие сил z на потоки благодаря (2.13) всегда взаимно и описывается локальными коэффициентами переноса λ_n. Далее мы убедимся, что такое истолкование КП не встречает возражений. Оно дает удобную феноменологическую терминологию, так как точный физический смысл КП однозначно определяется ФДС[8].

Формулы (2.18), (2.19), (2.21) дают наиболее общее выражение для КП. Всякая функция G, удовлетворяющая простым условиям (2.19), (2.21), порождает допустимый КП. Теперь легко выделить независимые произвольные параметры КП.

---

[8] Концепция виртуальных сил, состояний и процессов необходима для формулировки любого вариационного принципа. В механике рассматриваются виртуальные движения, которые на самом деле не реализуются. Данная теория, основанная на ФДС, попросту дает общий принцип для различения виртуальных и реальных процессов. В линейной неравновесной термодинамике концепция виртуальных процессов осталась неразвитой, поскольку потенциал $\Phi(z;\ x;\ \mathrm{x}) = \frac{1}{2}\lambda_{\alpha\beta} z_\alpha z_\beta$ $(\lambda_{\alpha\beta} = \mathrm{const})$ содержит только виртуальные переменные и не позволяет отличить их от реальных. Однако и в чисто линейном случае ВП в локальной форме (разд. 4) требует введения виртуальных сил.

Стохастическая интерпретация (2.17), (2.18) проста. Всякий (векторный) процесс с независимыми приращениями $\Delta Q(t)$ является суперпозицией ряда независимых пуассоновских процессов с различной высотой скачка q [11]. Функция G в (2.17) определяет вес (частоту скачков) каждой компоненты.

Заметим, что функция $D(iu;\ x;\ \mathrm{x})$ в (2.16) определена, строго говоря, только для мнимого аргумента iu, поэтому интегралы в (2.18) могут не иметь непосредственного смысла и расходиться на бесконечности. Эти интегралы нужно вычислять с помощью аналитического продолжения $D(iu;\ x;\ \mathrm{x})$ на действительную ось u. Однако при использовании формулы (2.20) никакие трудности не возникают, поскольку ее можно переписать в виде

$$\bar{I}_\alpha = \bar{I}^r_\alpha(x;\ \mathrm{x}) + \frac{1}{2} \int\limits_{q(x+\mathrm{x})>0} |q|^{-2} \left(1 - e^{-\beta q(x+\mathrm{x})}\right) q_\alpha \times \tag{2.28}$$
$$\times \{G(q;\ x;\ \mathrm{x}) + G(\varepsilon q;\ \varepsilon x;\ \varepsilon \mathrm{x})\} dq,$$

где экспонента всегда меньше единицы.

В области $q(x + \mathrm{x}) > 0$, по которой берется интеграл (2.28), функция G совершенно произвольна, так что спектр возможных зависимостей $\bar{I}(x;\ \mathrm{x})$ очень широк. Но, как отмечалось во введении, благодаря дополнительной информации о статистике переноса можно восстановить функцию G и КП по известным уравнениям (2.1), (2.9), (2.28). Переход же от КП к марковскому кинетическому уравнению всегда однозначен.

Введем шумовые источники в гидродинамические уравнения (2.1). Стохастические уравнения Ланжевена имеют вид

$$\frac{d}{dt} Q_\alpha = K_\alpha(Q;\ \mathrm{x}) + j_\alpha(t),$$

где условные (при фиксированных Q) корреляторы источников даются выражениями

$$\langle j_\alpha(t)\rangle = 0, \quad \langle j_\alpha(t)\, j_\beta(t')\rangle = K_{\alpha\beta}(Q;\ \mathrm{x})\,\delta(t-t'),$$
$$\langle j_\alpha(t)\, j_\beta(t')\, j_\gamma(t'')\rangle = K_{\alpha\beta\gamma}(Q;\ \mathrm{x})\,\delta(t-t')\,\delta(t-t''),\ldots$$

В соответствии с [1, 8], марковские кинетические коэффициенты K_n связаны с коэффициентами диффузии D_n или локальными коэффициентами переноса λ_n формулами

$$K_n(Q;\ x) = \frac{1}{W_0(Q)} D_n\left(T\frac{\partial}{\partial Q};\ x\right) W_0(Q). \qquad (2.29)$$

Кинетический оператор

$$L_x = L\left(x;\ Q; \frac{\partial}{\partial Q}\right) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(-\frac{\partial}{\partial Q}\right)^n K_n(Q;\ x), \qquad (2.30)$$

входящий в уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} W(t;\ Q) = L_x W(t;\ Q), \quad x = x(t), \qquad (2.31)$$

просто связан с функцией G и КП. Преобразование (2.29) переводит ФДС (2.8) в марковские ФДС [1, 8,9]. В частности, соотношение (2.23) переходит в условие стационарности

$$L_x W_0(Q) \exp(\beta x Q) = 0.$$

Таким образом, КП в совокупности с известной функцией $W_0(Q)$ (либо зависимостью $x=x(Q)$) дает как полное гидродинамическое, так и полное стохастическое описание системы.

Рассмотрим примеры.

Пример 1. В случае гауссовских систем функция G пропорциональна δ-функции в точке $q=0$, а КП имеет вид

$$F(z;\ x;\ x) = z_\alpha \bar{I}^r_\alpha(x;\ x) + \frac{1}{2}\lambda_{\alpha\beta}(x;\ x) z_\alpha z_\beta, \qquad (2.32)$$

где $\lambda_{\alpha\beta}$ удовлетворяет соотношениям (2.12). Соответствующий оператор L_x является оператором Фоккера-Планка. Формула (2.11) эквивалентна

$$K_\alpha(Q;\ x) = K^r_\alpha(Q;\ x) + \frac{1}{2}\beta W_0^{-1}(Q)\Big(x_\beta +$$

$$+ T\frac{\partial}{\partial Q_\beta}\Big) K_{\alpha\beta}(Q;\ x)\, W_0(Q).$$

Пример 2. Рассмотрим случай одной-единственной четной переменной, и для упрощения записи положим, что $x \equiv 0$. Пусть в области $qx > 0$ функция $G(q;\ x)$ имеет вид

$$G(q;\ x) = g(x)\,|q|^{-1} \qquad (qx>0),$$

где $g(x)>0$. Тогда из (2.28) получим

$$I(x) = \frac{\Gamma(1-\gamma)}{\gamma}\, g(x)\,|\beta x|^{\gamma} \operatorname{sign} x \quad (1>\gamma\geqslant 0). \tag{2.33}$$

Соответствующий КП (2.27) выглядит следующим образом в области $x > z > 0$:

$$\Pi(z;\ x) = \frac{\Gamma(1-\gamma)}{\gamma(\gamma+1)}\, g(x)\,\{(\beta z)^{\gamma+1} + (\beta(x-z))^{\gamma+1} -$$
$$- (\beta x)^{\gamma+1} + (\gamma+1)\beta z(\beta x)^{\gamma}\}.$$

На этом примере легко продемонстрировать, что ценность нелинейных ФДС находится в сильной зависимости от наличия информации (или гипотез) о статистической структуре процесса. С формальной точки зрения $g(x)$ в (2.3) может быть любой (неотрицательной) функцией. Кроме того, всегда можно считать, что γ зависит от x. В результате оказывается, что (2.33) — произвольная функция. Но, с другой стороны, задаваемая зависимость $G \sim |q|^{-\gamma}$ жестко определяет тип статистики. Достаточно предположить, что $g = \text{const}$ или хотя бы что $g(x)$ — аналитическая в точке $x=0$ функция, как мы получаем из (2.33) важную информацию о связи между статистикой процесса переноса и неаналитической зависимостью $\overline{I}(x) \sim |x|^{\gamma} \operatorname{sign} x$.

Пример 3. С помощью представления (2.28) можно выделить различные классы систем, которые обнаруживают явную однозначную связь между нелинейной диссипацией и статистикой переноса. Например, это системы, для которых (снова положим $\text{x} \equiv 0$)

$$G(q;\ x) = G(q;\ 0) \equiv G_0(q) \text{ при } qx > 0. \tag{2.34}$$

В такой системе силы не влияют на частоту и спектр прямых скачков с $qx > 0$, но уменьшают в соответствии с (2.21) частоту обратных скачков ($qx<0$) (можно рассмотреть и противоположный случай).

Пусть все переменные четные. Тогда из (2.28) и (2.17), (2.34) имеем

$$\overline{I}_{\alpha}(x) = \int\limits_{qx>0} |q|^{-2}(1 - e^{-\beta|q|})\, q_{\alpha}\, G_0(q)\, dq, \tag{2.35}$$

$$D(iu;\ x) = \int\limits_{qx>0} \left\{ \frac{\cos uq - 1}{|q|^2} (1 + e^{-\beta xq}) + \right.$$

$$\left. + i \frac{\sin uq}{|q|^2} (1 - e^{-\beta xq}) \right\} G_0(q)\, dq \cdot$$

В данном случае $G_0(q) = G_0(-q)$ благодаря (2.21). Эти формулы позволяют по уравнениям переноса найти функцию $G_0(q)$, а затем — характеристический функционал $D(iu;\ x)$ и тем самым КП. И, наоборот, зная характеристический функционал $D(iu;\ 0)$ равновесных флуктуаций, можно получить нелинейные уравнения переноса. В этом отношении такие системы подобны линейным, и их можно назвать простыми стохастическими системами.

Из (2.35) легко увидеть, что в простой системе выполняются нелинейные соотношения взаимности

$$\frac{\partial I_\alpha(x)}{\partial x_\beta} = \frac{\partial I_\beta(x)}{\partial x_\alpha}, \qquad (2.36)$$

поскольку подынтегральная функция в (2.35) обращается в нуль на границе области интегрирования. Характеристическая функция для данного класса систем имеет вид

$$D(u;\ x) = \frac{1}{2} \left\{ D_0(u + \beta x) + D_0(u) - D_0(\beta x) \right\}; \qquad (2.37)$$

$$D_0(u) \equiv D(u;\ 0) = D_0(-u)\,. \qquad (2.38)$$

Отсюда и из (2.36) видно, что потоки потенциальны:

$$I_\alpha(x) = \frac{1}{2\beta} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \tilde{\Pi}(x), \quad \tilde{\Pi}(x) \equiv D_0(\beta x)\,.$$

Здесь $D_0(u)$ — равновесная характеристическая функция, которая определяет и неравновесные свойства системы. Обычный потенциал $\tilde{\Pi}(x)$ является положительной и выпуклой функцией, но не совпадает с производством энтропии $P(x) = \Pi(x;\ x)$. Этот потенциал можно использовать для специфического вариационного описания простых систем. Однако это описание менее естественно с физической точки зрения, чем самое общее описание с помощью КП $\Pi(z;\ x)$.

Пример 4. Рассмотрим еще один класс простых систем. Функция (2.37) является специальным решением уравнений (2.8). Имеется также другое решение (мы снова полагаем $\varepsilon_\alpha = 1$ и вводим динамические силы):

$$D(u;\ x;\ \mathrm{x}) = D_0\left(u + \frac{x + \mathrm{x}}{2T}\right) - D_0\left(\frac{x+\mathrm{x}}{2T}\right), \qquad (2.39)$$

где $D_0(u)$ удовлетворяет (2.38). В данном случае

$$I_\alpha(x) = \frac{1}{2\beta}\ \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\tilde{\Pi}(x);\quad \tilde{\Pi}(x) \equiv 4D_0\left(\frac{1}{2}\beta x\right),$$

где $\tilde{\Pi}(x)$ опять не совпадает с производством энтропии. Для марковских кинетических коэффициентов из (2.29), (2.39) находим выражения

$$K_n(Q;\mathrm{x}) = \frac{1}{W_0(Q)}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}D_{n+m}(0)\left(\frac{\mathrm{x}}{2T} + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial Q}\right)^m W^0(Q) =$$

$$= \frac{1}{W_0(Q)}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}D_{n+m}\left(\frac{\mathrm{x}}{2T}\right)\left(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial Q}\right)^m W_0(Q) = \qquad (2.40)$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}\left(\frac{\mathrm{x}}{2T}\right)^m K_{n+m}(Q;\ 0),$$

$$D_n\left(\frac{\mathrm{x}}{2T}\right) = \int K_n(q;\ \mathrm{x})\,W_0(q)\,dq.$$

Таким образом, весь кинетический оператор L_{x} можно восстановить, зная лишь усредненные по равновесному распределению кинетические коэффициенты в отсутствие внешних сил $D_n(0)$.

С другой стороны, из (2.40) имеем

$$K_{n+1}(Q;\ \mathrm{x}) \equiv \left(2T\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}\right)^n K_1(Q;\ \mathrm{x}).$$

Так что L_{x} однозначно восстанавливается по диссипативным функциям $K_\alpha(Q;\ \mathrm{x})$. Такие системы рассматривались Стратоновичем [13].

Существуют и другие типы простых систем. Возникает вопрос, какова их физическая природа, при каких условиях система оказывается простой? Этот вопрос выходит за рамки статьи. Но вполне очевидно, что простые системы даже в неравновесном состоянии не претерпевают бифуркаций[9], ведут себя всегда «монотонно», и в этом смысле сравнительно малоинтересны. Помимо общей «энтропийной» функции Ляпунова [1.8] ($S(Q)$) они имеют «кинетическую» функцию Ляпунова $\tilde{\Pi}(x)$. Легко с учетом (2.7) показать что

$$\frac{d}{dt}\tilde{\Pi}(x(Q)) < 0, \qquad \tilde{\Pi}(x) > 0.$$

Итак, рассмотрена структура и свойства КП для произвольной марковской гидродинамической модели замкнутой системы. При этом мы использовали представление (2.17), (2.18), вытекающее из определения коэффициентов диффузии (2.15) в марковской стохастической теории.

Рассмотрим теперь свойства КП для стационарного неравновесного состояния (СНС) открытой системы [1, 5, 8].

Коэффициенты диффузии в СНС выражаются формулой (в нормальной, микроскопической, шкале времени)

$$D_n = \lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\langle \Delta Q(\tau), \ \ldots, \ \Delta Q(\tau)\rangle . \tag{2.41}$$

Эта формула получается из (2.6) в пределе $\tau_m \to \infty$, $\tau \to \infty$. В отличие от (2.6), (2.15) коэффициенты диффузии (2.41) определены совершенно точно и являются в одинаковой мере и макро- и микроскопическими параметрами СНС. Поэтому и КП (2.4) для СНС представляет совершенно строгую конструкцию. Существование и свойства КП здесь оказываются исключительно следствием ФДС и не связаны с какими-либо гипотезами относительно макроописания.

Очевидно, многообразие реальных статистик переноса богаче многообразия марковских моделей. Поэтому в случае СНС КП принадлежит к более широкому классу функций, чем описанный выше. Действительно, из (2.41) не следует, что (2.16) при всяком τ является характеристической функцией и что

---

[9] Например, уравнения $\dot{Q} = \overline{I}(x(Q)) - j$, $j = \mathrm{const}$ в случае простых систем всегда имеют единственное устойчивое стационарное решение.

$D(iu;\ x;\ \text{x})$ относится к безгранично делимому распределению (хотя во многих случаях это так). Представление (2.17) — (2.19), вообще говоря, не имеет места.

Какие же из свойств КП 1—4 сохраняются в самом общем случае? Оказывается, не сохраняется только наименее важное свойство 4, которое и не используется ниже при выводе и физической интерпретации ВП. Свойства (2.24) — (2.26) имеют место всегда, т. к. вытекают из ФДС (2.8). Это доказано в [8]. Проиллюстрируем сказанное на примере.

Пример 5. Пусть равновесные флуктуации потока $I(t)$ представляют дихотомический случайный процесс с корреляционной функцией

$$< I(t)\, I(0) > = \sigma^2 e^{-\gamma |t|}.$$

Тогда по определению (2.41) для равновесной характеристической функции $D_0(u)$ получим выражение (см., также [14], пример 1)

$$D_0(u) = -\frac{1}{2}\gamma + \sqrt{\frac{1}{4}\gamma^2 + \sigma^2 u^2}$$

Отсюда видно, что $D_0(u)$ — неотрицательная выпуклая функция u. Видно также, что кумулянт четвертого порядка $D_4 < 0$, поэтому представление (2.17), (2.18) с условием (2.19) невозможно. Дихотомический процесс нельзя «разложить» на гаус совские и пуассоновские процессы.

3. СТАТИЧЕСКИЙ ВАРИАЦИОННЫЙ ПРИНЦИП ДЛЯ ОТКРЫТЫХ СИСТЕМ

В данном разделе для упрощения записи положим $x = 0$. Кроме того, здесь и далее верхним индексом «о» будем отмечать экстремальные значения варьируемых переменных.

Нетрудно видеть, что уравнения переноса (2.1) вытекают из следующей локальной формы ВП для открытых систем в СНС:

$$\delta_z\{I_\alpha z_\alpha - F(z;\ \text{x})\} = 0, \quad I_\alpha z_\alpha - F(z;\ \text{x}) = \max \qquad (3.1)$$

с дополнительным «условием локальности»

$$z^0 = \text{x}. \qquad (3.2)$$

Благодаря свойствам (2.24) и (2.26) экстремум в (3.1) в действительности всегда — максимум (и, очевидно, единственный).

Теперь избавимся от «лишней» переменной z и перейдем к другой форме ВП, свободной от дополнительных условий. Для этого введем виртуальные потоки

$$I_\alpha = \frac{\partial}{\partial z_\alpha} F(z;\ x) \tag{3.3}$$

и выразим виртуальные силы z через I: $z = z(I,\ x)$. Затем с помощью преобразования Лежандра построим функцию (Онсагера — Махлупа)

$$\begin{aligned} \Lambda(I;\ x) &\equiv I_\alpha z_\alpha(I;\ x) - F(z(I;\ x)x) + F(x;\ x) = \\ &= z_\alpha \frac{\partial}{\partial z_\alpha} F(z;\ x) - F(z;\ x) + F(x;\ x), \quad z = z(I;\ x). \end{aligned} \tag{3.4}$$

Заметим, что при переходе от z к I свойство (2.26) играет очень важную роль. Выпуклость КП гарантирует однозначную разрешимость уравнений (3.3) относительно z. Далее функцию $\Lambda(I;\ x)$ будем также именовать лагранжианом.

Уравнения переноса (2.1) могут быть получены из ВП:

$$\delta_I,\ \delta_x \{x_\alpha I_\alpha - \Lambda\ (I;\ x)\} = 0, \tag{3.5}$$

где потоки и силы варьируются либо по отдельности, либо совместно, но независимо. Действительно, варьирование по потокам с учетом (3.3) дает немедленно уравнения

$$\frac{\partial}{\partial I_\alpha} \Lambda\ (I;\ x) = z_\alpha(I;\ x) = x_\alpha, \tag{3.6}$$

обращая которые, получим $I_\alpha = \bar{I}_\alpha(x)$. Варьирование по силам приводит к уравнению

$$\begin{aligned} I_\alpha &= \frac{\partial}{\partial x_a} F(x;\ x) - \left\{ \frac{\partial}{\partial x_a} F(z;\ x) \right\}_{z=z(I;\, x)} = \\ &= \bar{I}_\alpha(x) + \left\{ \frac{\partial}{\partial x_a} F(z;\ x) \right\}_{z=x} - \left\{ \frac{\partial}{\partial x_a} F(z;\ x) \right\}_{z=z(I;\, x)}. \end{aligned}$$

Это уравнение имеет решение $I = \bar{I}(x)$; $z(I;\ x) = x$. При совместном варьировании по потокам и силам это решение автоматически следует из (3.6).

ВП (3.5) формально совершенно аналогичен известному принципу линейной теории [2]. Однако нужно отметить, что в общем нелинейном случае лагранжиан $\Lambda(I;\ x)$ нельзя построить по функции производства энтропии $2\beta F(x;\ x)$. Для этого нужно знать весь КП (лагранжиан также содержит полную информацию о флуктуациях).

Лагранжиан $\beta\Lambda(I;\ x)$ можно рассматривать как производство энтропии в виртуальном состоянии, выраженное через виртуальные потоки. Эта интерпретация подкрепляется следующими важными свойствами лагранжиана.

1. Из (3.4) и (3.6) имеем

$$\beta\Lambda(I^0;\ x^0) = P(x^0) \geqslant 0. \tag{3.7}$$

2. Всякий экстремум в (3.5), приводящий к уравнениям переноса, — всегда максимум. Обозначим через $\delta^2\{...\}$ второй дифференциал выражения, стоящего в фигурных скобках. Нетрудно показать, что в экстремальной точке $(x = x^0,\ I = I^0)$

$$\delta^2\{Ix - \Lambda(I;\ x)\} = \\ = -\frac{1}{2} M_{\alpha\beta}\left(\delta I_\alpha - \frac{\partial \bar{I}_\alpha}{\partial x_\gamma}\delta x_\gamma\right)\left(\delta I_\beta - \frac{\partial \bar{I}_\beta}{\partial x_\mu}\delta x_\mu\right) \leqslant 0, \tag{3.8}$$

где $(x = x^0,\ I = I^0)$ матрица $M_{\alpha\beta}$ определяется выражением

$$M_{\alpha\gamma}\left\{\frac{\partial^2}{\partial z_\gamma \partial z_\beta} F(z;\ x)\right\}_{z = x} = \delta_{\alpha\beta}\,.$$

и в силу свойства КП (2.26) — симметричная и строго положительно определенная матрица.

3. Поскольку можно написать $M_{\alpha\beta} = \dfrac{\partial^2}{\partial I_\alpha \partial I_\beta}\Lambda(I;\ x)$, то видно, что лагранжиан — выпуклая функция потоков. По отношению к силам этого утверждать нельзя.

Данный ВП в определенной мере асимметричен относительно потоков и сил, что обычно вполне соответствует физической стороне вопроса (силы являются причиной потоков). Впрочем, симметрия восстанавливается, если учесть два обстоятельства. Во-первых, под маской сил в конкретных задачах могут выступать величины, имеющие физический смысл потоков. Во-вторых, возможна ситуация, когда локальные коэффициенты переноса и вместе с ними КП являются неоднозначной функцией x_α (конечно, при этом ФДС (2.8) соблюдаются). Так будет, если система в СНС может претерпевать бифуркации и обнаруживает гистерезис. В таком случае не только зависимость $\bar{I} = \bar{I}(\mathrm{x})$, но и зависимость $\mathrm{x} = \mathrm{x}(\bar{I})$ может быть неоднозначной. Рассматриваемый формализм позволяет охватить и эту ситуацию. Действительно, ничто не заставляет нас записывать зависимость кинетических свойств системы от состояния в форме $\lambda_n = \lambda_n(\mathrm{x})$. На самом деле λ_n могут более непосредственно зависеть от потоков, или от x и $\bar{I}$ одновременно. В общем случае необходимо написать:

$$\lambda_n = \lambda_n(\bar{I};\ \mathrm{x}), \quad \Phi = \Phi(z;\ \bar{I};\ \mathrm{x}) = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \lambda_n(\bar{I};\ \mathrm{x}).$$

Уравнения переноса (2.1) приобретут неявную форму:

$$\bar{I}_\alpha = \left\{ \frac{\partial}{\partial z_\alpha} F(z;\ \bar{I};\ \mathrm{x}) \right\}_{z=\mathrm{x}}. \tag{3.9}$$

Вводя виртуальные потоки формулой

$$I_\alpha = \frac{\partial}{\partial z_\alpha} F(z;\ I;\ \mathrm{x}) \tag{3.10}$$

и производя преобразование Лежандра по прежнему рецепту, получим лагранжиан, который уже не будет обязательно выпуклой функцией потоков. В результате силы и потоки полностью уравниваются в правах.

Уравнения переноса (3.9) по-прежнему получаются из ВП (3.5). Свойство (3.8) также сохраняется и в самом общем случае. Докажем это. Рассмотрим функцию

$$(z_\alpha - \mathrm{x}_\alpha) \frac{\partial}{\partial z_\alpha} F(z;\ I;\ \mathrm{x}) - F(z;\ I;\ \mathrm{x}) + F(\mathrm{x};\ I;\ \mathrm{x}) \equiv f(z;\ I; \mathrm{x})$$

при произвольных z и фиксированных произвольных x, I. Если z определяется (3.10), то эта функция совпадает с фигурной скобкой (3.5). Для экстремумов $f(z;\ I; \mathrm{x})$ имеем уравнение

$$\frac{\partial}{\partial z_\alpha} f = (z_\beta - \mathrm{x}_\beta) \frac{\partial^2 F}{\partial z_\alpha \partial z_\beta} = 0,$$

которое ввиду строгой выпуклости КП имеет единственное решение: $z = \mathrm{x}$. Легко увидеть, что это точка абсолютного минимума и что в ней $f = 0$. Следовательно, $f \geqslant 0$ и

$$\Lambda(I;\ x) - xI \geqslant 0. \tag{3.11}$$

Причем равенство достигается в экстремальных физических состояниях. Из (3.7), (3.11) снова получаем неравенство (3.8).

В общем случае варьирование (3.5) приводит к нескольким минимумам, которые соответствуют различным ветвям неоднозначной зависимости варьируемых параметров (сил и потоков) от фиксированных параметров. В каждом минимуме потенциал (3.5) обращается согласно (3.7) в нуль. В таком случае этот потенциал, конечно, имеет и другие экстремумы, координаты которых не удовлетворяют уравнениям переноса и дают нефизическое решение вариационной задачи. Из сказанного ясно, что для получения уравнений переноса из лагранжиана, в принципе, можно обойтись без процедуры варьирования, просто решая уравнение

$$\Lambda(I;\ x) - xI = 0. \tag{3.12}$$

Рассмотрим теперь, как ФДС (2.8) отражаются на структуре лагранжиана. Несложные, но громоздкие выкладки приводят к выводу, что лагранжиан должен удовлетворять следующему соотношению симметрии, представляющему собой следствие микроскопической обратимости:

$$\Lambda(-\varepsilon I + \varepsilon \bar{I}^i(x);\ \varepsilon x) - \frac{1}{2\beta} P(x) = \Lambda(I;\ x) - xI, \tag{3.13}$$

где $\bar{I}^i(x)$ — диссипативные компоненты потоков. В частности, при $x = 0$ вследствие временной симметрии флуктуаций $\Lambda(-\varepsilon I;\ 0) = \Lambda(I;\ 0)$. Из (3.11), (3.13) получаем неравенство

$$\Lambda(I;\ x) \geqslant \frac{1}{2\beta} P(x) \geqslant 0. \tag{3.14}$$

4. ПРИНЦИП МИНИМУМА ПРОИЗВОДСТВА ЭНТРОПИИ ДЛЯ ЗАМКНУТЫХ СИСТЕМ

В замкнутой системе термические силы x_α зависят от текущих неравновесных средних значений макропеременных $Q_\alpha(t)$ в соответствии с (2.7). Поэтому локальные кинетические коэффициенты и КП удобнее записывать в форме $\lambda_n = \lambda_n(Q;\ x)$, $F = F(z;\ Q;\ x)$. Из (2.7) имеем

$$\frac{\partial}{\partial x_\beta} Q_\alpha = -\beta \left\langle q_\alpha,\ q_\beta \right\rangle. \qquad (4.1)$$

Следовательно, матрица $\dfrac{\partial Q_\alpha}{\partial x_\beta}$ симметрична и строго отрицательно определена, а зависимость x и Q взаимно однозначна[10].

Введем потенциал

$$H(z;\ Q;\ \mathrm{x}) = F(z + \mathrm{x};\ Q;\ \mathrm{x}) - F(x(Q) + \mathrm{x};\ Q;\ \mathrm{x}),$$

$$F(z+\mathrm{x};\ Q;\ \mathrm{x}) = (z + \mathrm{x})\bar{I}'(x(Q);\ \mathrm{x}) + \qquad (4.2)$$

$$+ \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} (z+\mathrm{x})^n \lambda_n (x(Q);\ \mathrm{x}).$$

Величина $2\beta H$ имеет смысл избыточного производства энтропии в виртуальном состоянии по отношению к реальному.

Динамический аналог статистического локального ВП (3.1) имеет вид

$$\delta_z \int \{Qz - F(z + \mathrm{x};\ Q;\ \mathrm{x})\}\, dt = 0 \qquad (4.3)$$

с условием локальности

$$z^0(t) = x_\alpha(Q^0(t)). \qquad (4.4)$$

Отсюда получаем гидродинамические уравнения (2.1), (2.7).

Покажем теперь, что ВП (4.3) можно привести к более традиционному виду. Рассмотрим следующую форму ВП, в котором варьируются как виртуальные силы, так и макропеременные $Q(t)$:

$$\delta_{z,Q} \int \{Qz - H(z;\ Q;\ \mathrm{x})\}\, dt = 0. \qquad (4.5)$$

Здесь z и Q варьируются независимо, что приводит к уравнениям

$$\frac{d}{dt} Q_\alpha = \frac{\partial}{\partial z_\alpha} H(z;\ Q;\ \mathrm{x}) = \frac{\partial}{\partial z_\alpha} F(z + \mathrm{x};\ Q;\ \mathrm{x}); \qquad (4.6)$$

---

[10] Поэтому гидродинамические уравнения (2.1), (2.7) автоматически удовлетворяют так называемому универсальному критерию эволюции (см. [3]):

$$\bar{I}_\alpha \frac{d}{dt} x_\alpha = \bar{I}_\alpha \frac{\partial x_\alpha}{\partial Q_\beta} \bar{I}_\beta \leqslant 0.$$

$$\frac{d}{dt} z_\alpha = -\frac{\partial}{\partial Q_\alpha} H(z; Q; \mathrm{x}) = \frac{\partial x_\beta (Q)}{\partial Q_\alpha} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_\beta} F(x + \mathrm{x}; Q; \mathrm{x}) \right\}_{x = x(Q)} + \tag{4.7}$$

$$+ \left\{ \frac{\partial}{\partial Q_\alpha} F(z + \mathrm{x};\ Q;\ \mathrm{x}) \right\}_{z = x(Q)} - \frac{\partial}{\partial Q_\alpha} F(z + \mathrm{x};\ Q;\ \mathrm{x}).$$

Эти уравнения всегда имеют решение, в котором

$$z_\alpha = x_\alpha (Q), \tag{4.8}$$

а $Q(t)$ удовлетворяют уравнениям (2.1), (2.7). Действительно, при подстановке (4.8) в (4.7) последние два члена сокращаются, и в результате получаем из (4.7) с учетом (4.1)

$$\frac{\partial x_\alpha (Q)}{\partial Q_\beta} \frac{d}{dt} Q_\beta = \frac{\partial x_\beta (Q)}{\partial Q_\alpha} \frac{d}{dt} Q_\beta = \frac{\partial x_\beta (Q)}{\partial Q_\alpha} \bar{I}_\beta\ (Q;\ \mathrm{x}).$$

Это уравнение при условии (4.8) совпадает с (4.6). Таким образом, уравнения (4.6) и (4.7) дублируют друг друга и совпадают с гидродинамическими уравнениями (2.1).

Решение со свойством (4.8) возможно при определенном начальном условии $z_\alpha(t_0) = x_\alpha(Q(t_0))$. Следовательно, для вывода правильных уравнений движения из ВП (4.5) достаточно потребовать, чтобы условие локальности (4.4) выполнялось лишь в один начальный момент времени t_0. Далее оно выполняется автоматически.

Формально ВП (4.5) совершенно аналогичен модифицированному принципу Гамильтона в механике. Функция H играет роль гамильтониана, интеграл (4.5) аналогичен действию (но имеет размерность энергии), Q и z выступают соответственно как канонические координаты и импульсы, а (4.6) и (4.7) имеют в точности вид уравнений Гамильтона. Отличие от механики заключается в том, что «координаты» Q и «импульсы» z обладают одинаковой временной четностью, а динамика необратима во времени. Нужное направление времени и эволюции выделяется условием локальности. Совместимость этого условия с уравнениями движения гарантируется особой формой «гамильтониана» (4.2).

Сам по себе ВП (4.5) не дает никаких преимуществ по сравнению с (4.3) (хотя он позволяет использовать методы аналитической механики). Однако он служит мостом для стандартного перехода к лагранжевой форме ВП, которая обладает замечательными свойствами.

Введем скорости, или потоки:

$$\dot{Q}_\alpha = I_\alpha = \frac{\partial}{\partial z_\alpha} H(z;\ Q;\ x), \tag{4.9}$$

и с помощью преобразования Лежандра построим лагранжиан

$$\Lambda_0(\dot{Q};\ Q;\ x) = \dot{Q}z(\dot{Q};\ Q;\ x) - H(z(\dot{Q};\ Q;\ x);\ Q; x), \tag{4.10}$$

где зависимость $z(\dot{Q};\ Q;\ x)$ находится из (4.9) (напомним, что благодаря выпуклости гамильтониана по z зависимость между импульсами и скоростями взаимно однозначна). ВП (4.5) можно записать в эквивалентной форме

$$\delta_Q A[Q] \equiv \delta_Q \int \Lambda_0(\dot{Q};\ Q;\ x)dt = 0, \tag{4.11}$$

где Q и $\dot{Q}$ варьируются зависимо. Соответствующие уравнения Эйлера имеют более широкий класс решений, чем (2.1), поскольку являются уравнениями второго порядка по времени. Гидродинамические уравнения (2.1), (2.7) получаются из (4.11) при дополнительном начальном условии

$$\dot{Q}(t_0) = \bar{I}(Q(t_0);\ x(t_0)). \tag{4.12}$$

Снова структура лагранжиана обеспечивает совместимость (4.12) с уравнениями Эйлера, при этом последние сводятся к уравнениям первого порядка. Если уравнения переноса предполагаются неизвестными, то (4.12) нужно переписать в виде

$$\left\{\frac{\partial}{\partial \dot{Q}} \Lambda_0\right\}_{\dot{Q}=\dot{Q}(t_0);\ Q=Q(t_0)} = x(Q(t_0)). \tag{4.13}$$

Рассмотрим свойства лагранжиана (4.10). 1). На экстремальной физической траектории, удовлетворяющей гидродинамическим уравнениям

$$\beta\Lambda_0(\dot{Q}^0;\ Q^0;\ x) = \beta\dot{Q}^0 x(Q^0) = P(Q^0;\ x) - \beta\dot{Q}^0 x, \tag{4.14}$$

где P — производство энтропии,

$$\beta\bar{I}(Q^0;\ x)(x + x(Q^0)) = P(Q^0;\ x) \geqslant 0.$$

Если пользоваться традиционной терминологией, то $P(Q; x)$ есть внутреннее производство энтропии P_{in}, $\beta \dot{Q} x(Q)$ есть скорость изменения энтропии макроскопического состояния, и $(-\beta x \dot{Q})$ — внешний поток энтропии в систему P_{ex}. Поэтому равенство [1]

$$\frac{d}{dt} S(Q) = \frac{d}{dt} \{\beta Q x(Q) + \ln \Xi(-\beta x(Q))\} = \dot{Q} x(Q) \quad (4.15)$$

можно переписать в виде

$$\frac{d}{dt} S(Q) = P_{in} + P_{ex}; \quad P_{in} \geqslant 0.$$

2). Введем следующие потенциалы:

$$\Lambda(\dot{Q}; Q; x) \equiv \Lambda_0(\dot{Q}; Q; x) + \dot{Q} x, \quad (4.16)$$

$$\tilde{\Lambda}(\dot{Q}; Q; x) \equiv \Lambda_0(\dot{Q}; Q; x) - \dot{Q} x(Q);$$
$$\tilde{A}[Q] \equiv \int \tilde{\Lambda}(\dot{Q}; Q; x) dt. \quad (4.17)$$

Как показано в разд. 2, при марковском гидродинамическом описании замкнутой системы КП всегда можно представить формулой Леви-Хинчина (2.18), (2.19). Опираясь на это представление, нетрудно получить неравенства

$$\Lambda_0 \geqslant \dot{Q} x(Q); \ \Lambda \geqslant \dot{Q}(x(Q) + x); \ \tilde{\Lambda} \geqslant 0; \quad (4.18)$$

$$\Lambda \geqslant 0, \quad (4.19)$$

причем равенство в (4.18) достигается только на единственной (при данном начальном условии $Q(t_0)$) физической траектории. На этой траектории, согласно (4.14), $\tilde{\Lambda} = 0$. Поэтому ВП (4.11) можно записать как

$$\tilde{A}[Q] = \min = 0. \quad (4.20)$$

Согласно (4.14) — (4.17), (4.19), лагранжианы $\beta\Lambda_0$ и $\beta\Lambda$ есть соответственно производство макроскопической энтропии и полное (внутреннее) производство энтропии в виртуальном процессе. Последнее обращается в нуль, а неравенство (4.19) переходит в равенство только в равновесном состоянии при $\dot{Q}=0$, x = const, $x + x(Q) = 0$.

Лагранжиан $\beta\tilde{\Lambda}$ ввиду (4.16), (4.17) можно назвать избыточным производством энтропии в виртуальном процессе по сравнению с реальным, а ВП (4.20) — принципом минимального избыточного производства энтропии. Лагранжиан $\tilde{\Lambda}$, как и потенциал (3.5), позволяет найти уравнения движения из условия (4.20) без вариационной процедуры. Лагранжианы Λ, $\tilde{\Lambda}$ отличаются на полную производную по времени (4.15) и приводят к одним и тем же уравнениям Эйлера.

Вернемся к исходному потенциалу «действия» (4.11). Из (4.14), (4.15), (4.18) имеем

$$\beta\tilde{A}[Q]=\beta\int_{t_0}^{t_1}\tilde{\Lambda}(\dot{Q};Q;\mathrm{x})\,dt=\beta A[Q]-S(Q(t_1))+S(Q(t_0))>0, \tag{4.21}$$

$$\beta\tilde{A}[Q^0]=\beta A[Q^0]-S(Q^0(t_1))+S(Q^0(t_0))=0,$$

где Q^0—физическая траектория и $Q(t)\neq Q^0(t)$. Если $Q(t_0)=Q^0(t_0)$, $Q(t_1)=Q^0(t_1)$, то из (4.21) получаем

$$A[Q]>A[Q^0]. \tag{4.22}$$

Это еще одна форма ВП (4.11), которая позволяет дать ему название принципа минимального производства макроскопической энтропии. Этот принцип утверждает, что из всевозможных траекторий с заданными концевыми значениями реализуется та, которая приводит к минимальному приращению макроскопической энтропии (и, следовательно, максимальному рассеянию энергии, полученной от источника внешних сил). Минимальное приращение макро-энтропии определяется потенциальной функцией состояния $S(Q)$.

Впрочем, строгая формулировка принципа (4.22) встречает трудности, связанные с тем, что физическая траектория удовлетворяет уравнениям первого порядка и потому не может проходить через любые две концевые точки $Q(t_0)$, $Q(t_1)$. Выбор $Q^0(t_0)$ однозначно определяет $Q^0(t_1)$. Этой трудности можно избежать, если рассматривать только полубесконечные траектории ($t_1\to\infty$) с определенной асимптотикой на бесконечности. Остановимся на случае, когда $x \equiv 0$ или ($x = \text{const}$), т. е. система полностью изолирована. Тогда $A[Q]$ совпадает с полным ПЭ, $\frac{d}{dt} S(Q) > 0$, и энтропия стремится к своему максимальному равновесному значению: $S = 0$, соответствующему $x(Q) = 0$, $Q = Q_{eq}$. Независимо от $Q^0(t_0)$ при $t_1 \to \infty$ $Q^0(t_1) \to Q_{eq}$. Поэтому достаточно рассматривать только виртуальные траектории, стремящиеся к Q_{eq}. Для всех таких траекторий выполняется неравенство (4.22), которое теперь можно назвать просто принципом минимума производства энтропии. Его физическая интерпретация совершенно проста и качественно не отличается, очевидно, от специального линейного случая. Замаскированная разница между нелинейной и линейной теориями заключается, как уже отмечалось, в том, что лагранжиан нельзя построить по функции $P(Q, x)$, поскольку он несет информацию не только о диссипативных, но и о флуктуационных параметрах. В рассмотренном случае при $x = 0$ $A[Q^0] \geqslant 0$.

Каждая из форм ВП (4.20), (4.22) имеет свои преимущества. ВП (4.20) менее прозрачен физически, но не требует никаких оговорок. Действительно, неравенство $\tilde{A}[Q] > 0$ верно для любых виртуальных траекторий, в том числе и таких, что $Q(t_1) \neq Q^0(t_1)$. Поэтому при использовании (4.20) нужно в любом случае фиксировать только начальное условие $Q(t_0)$. В конкретных приложениях этот факт может оказаться очень полезным. В (4.20), (4.22) физическая траектория отвечает абсолютному минимуму. Кроме него, в общем случае имеются другие экстремумы, отвечающие нефизическим экстремальным траекториям. Однако эти траектории содержат определенную информацию о лагранжиане и тем самым о флуктуационных характеристиках системы.

Для второго дифференциала потенциалов A, $\tilde{A}$ в экстремальной точке Q^0 можно получить выражение

$$\delta^2 A[Q^0] = \frac{1}{2} \int M_{\alpha\beta} \left(\delta Q_\alpha - \frac{\partial \bar{I}_\alpha}{\partial Q_\gamma} \delta Q_\gamma \right) \left(\delta \dot{Q}_\beta - \frac{\partial I_\beta}{\partial Q_\mu} \delta Q_\mu \right) dt \geqslant 0,$$

где положительно-опрсделенная матрица $M_{\alpha\beta}$ определяется (3.8).

Рассмотрим теперь приближенную связь лагранжиана с вероятностным функционалом макропеременных. Предположим, что вероятностную меру в пространстве случайных (марковских) траекторий $Q(t)$ можно представить в виде

$$W[Q; x] \sim \exp\left\{-\frac{1}{2}\beta \int L(\dot{Q}; Q; x)dt\right\}, \tag{4.23}$$

так что условное вероятностное распределение приращения $\Delta Q(\tau)$ задается формулой (нормировочный множитель не выписывается)

$$V(\Delta Q) \sim \exp\left\{-\frac{1}{2}\beta\tau L\left(\frac{\Delta Q}{\tau}; Q; x\right)\right\}. \tag{4.24}$$

Здесь $\tau \gg \tau_\mu$. Строгий переход к марковскому пределу $\tau_\mu \to 0$, возможен в (4.24) только для линейной гауссовской системы. Если же шумовые источники негауссовские, то марковский процесс $Q(t)$ является разрывным (в макроскопической шкале времени), и при $\tau \to 0$ представление (4.24) невозможно. Поэтому в общем случае выражения (4.23), (4.24) не могут быть совершенно строгими. Однако они могут быть полезны для простого приближенного описания сглаженных во времени (на достаточно большом интервале τ) случайных траекторий $Q(t)$. Интересно попытаться связать эти сглаженные траектории с введенными выше виртуальными траекториями средних $Q(t)$, а функцию $L(\dot{Q}; Q; x)$ — с лагранжианом. Тогда ВП получается из (4.23) просто как условие максимума вероятности.

Вычислим с помощью (4.24) $\left\langle \exp\left(\frac{1}{2}\beta z \Delta Q\right)\right\rangle$, считая τ достаточно большим и используя метод перевала:

$$\begin{aligned}\langle e^{\frac{1}{2}\beta z \Delta Q}\rangle &= \int e^{\frac{1}{2}\beta z \Delta Q} V(\Delta Q)\, d\Delta Q \approx \\ &\approx \exp\left\{\frac{1}{2}\beta\tau\left[zI - L(I; Q; x)\right]\right\},\end{aligned} \tag{4.25}$$

где I выражается через z из уравнения

$$z = \frac{\partial}{\partial I} L(I; Q; x). \tag{4.26}$$

С другой стороны, согласно определению КП, имеем

$$\left\langle \exp\left(\frac{1}{2}\beta z \Delta Q\right)\right\rangle \approx \exp\left\{\frac{1}{2}\beta z \bar{I}(Q;\ x)\tau + 2\beta\tau\Phi\left(-\frac{1}{2}z;\ Q;\ x\right)\right\}.$$

Отсюда получаем

$$L(I;\ Q;\ x) = 4\Lambda^0\left(-\frac{1}{2}I + \frac{1}{2}\bar{I}(Q;\ x);\ Q\ x\right), \tag{4.27}$$

где функция $\Lambda^0(I;\ Q;\ x)$ определяется так:

$$\Lambda^0(I;\ Q;\ x) = zI - \Phi(z;\ Q;\ x),\ I = \frac{\partial}{\partial z}\Phi,$$
$$\Lambda^0(I;\ Q;\ x) = \Lambda(I + \bar{I}^r(Q;\ x);\ Q;\ x) - \frac{1}{2\beta}P(x). \tag{4.28}$$

Очевидно, потенциал Λ^0 — неотрицательная выпуклая функция потоков I, принимающая минимальное значение $\Lambda^0 = 0$ в точке $I=0$. Таким образом, $L \geqslant 0$, $L=0$ при $I=\bar{I}(Q,\ x)$, и форма ВП

$$W[Q;\ x] = \max$$

эквивалентна (4.11). Средние и наиболее вероятные траектории совпадают, однако этот факт не имеет большого значения, так как является следствием самого определения сглаженных случайных траекторий.

5. РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ СИСТЕМЫ

Все результаты разд. 2 относительно КП без принципиальных изменений переносятся на распределенные системы, где каждая макропеременная $Q_\alpha = Q_\alpha(t,\ r)$ зависит от пространственного вектора r и представляет либо скалярное поле, либо компоненту векторного или тензорного поля. Однако в распределенном случае удобно от потоков (скоростей) $I_\alpha = \frac{d}{dt}Q_\alpha$ перейти к пространственным потокам j_α, разбивая I_α на две части, одна из которых связана с пространственным переносом, а другая — с локальными процессами:

$$\frac{\partial}{\partial t}Q_\alpha(t,\ r) = \sigma_\alpha(x;\ x) - \operatorname{div}_0 j_\alpha(x;\ x), \quad x_\alpha = x_\alpha(Q). \tag{5.1}$$

Зависимость между полями термических сил $x_\alpha(t, r)$ и полями $Q_\alpha(t, r)$, вообще говоря, пространственно нелокальна.

В распределенном случае необходимо специально рассматривать граничные условия на силы и потоки. Далее, для простоты ограничимся бесконечными системами с равновесными условиями на бесконечности, когда x_α, σ_α, $j_\alpha \to 0$ достаточно быстро при $|r| \to \infty$, и внешний поток энтропии отсутствует. Получаемый ниже ВП справедлив и в общем случае, если рассматривать виртуальные процессы, совместимые с граничными условиями.

В соответствии со сказанным для производства энтропии можно написать (в это разделе положим $\varkappa \equiv 0$):

$$P = \beta \int \dot{Q}_\alpha x_\alpha \, dr = \beta \int (\sigma_\alpha x_\alpha + j_\alpha \nabla x_\alpha) \, dr \quad \left(\nabla \equiv \frac{\partial}{\partial r}\right). \tag{5.2}$$

Отсюда видно, что силы x_α и градиенты ∇x_α выступают как независимые переменные, определяющие внутренние и пространственные процессы переноса, которые имеют различную физическую природу. Поэтому естественно рассматривать КП как функцию независимых виртуальных переменных z_α и $y_\alpha \equiv \nabla z_\alpha$ и записывать его в виде $F = F(z;\ y;\ Q)$.

Из общего определения КП имеем

$$F(z;\ y;\ Q) = \int \{\sigma_\alpha^r(r;\ Q)\, z_\alpha(r) + j_\alpha^r(r;\ Q)\, y_\alpha(r)\} dr + \Phi(z;\ y;\ Q), \tag{5.3}$$

$$\Phi(z;\ y;\ Q) = \sum_{n+m\geqslant 2}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{1}{m!} \int d^n r\, d^m \rho\, \lambda_{n,m}(r_1, \ldots, r_n, \rho_1, \ldots, \rho_m;\ Q) \times$$

$$\times z(r_1) \ldots z(r_n)\, y(\rho_1) \ldots y(\rho_m),$$

где локальные коэффициенты переноса стандартным образом выражаются через корреляторы (кумулянты) случайных источников σ_α и потоков j_α:

$$\lambda_{\alpha_1 \ldots \alpha_n, \beta_1 \ldots \beta_m}(r_1, \ldots, r_n;\ \rho_1, \ldots, \rho_m) =$$

$$= \frac{(-\beta)^{n+m}}{2\beta} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau d^n t\, d^m \theta \langle \sigma_{\alpha_1}(r_1, t_1), \ldots, \sigma_{\alpha_n}(r_n, t_n), \tag{5.4}$$

$$j_{\beta_1}(\rho_1, \theta_1), \ldots, j_{\beta_m}(\rho_m, \theta_m) \rangle.$$

Пространственные индексы векторов y_α и соответствующие индексы у локальных коэффициентов переноса мы не записываем. Согласно (5.4), локальные коэффициенты переноса полностью симметричны отдельно по индексам (α_i, r_i) и по индексам (β_i, ρ_i).

Из стохастического определения (5.4) КП следует, что и при независимых аргументах z, y он сохраняет все свойства, доказанные в разд. 2 для сосредоточенных систем. Именно: 1. $\Phi(z;\ y;\ Q) \geqslant 0$; 2. $\Phi(z;\ y;\ Q)$ — выпуклая функция аргументов z; y; 3. $\Phi(x;\ \nabla x;\ Q) = P(Q) = \int |\sigma(r;\ Q)\, x(r;\ Q) + j(r;\ Q) \nabla x(r;\ Q)|\, dr \geqslant 0$.

Гидродинамические уравнения (2.1), (2.7), (5.1) записываются через КП в несколько модифицированном виде:

$$\dot{Q}_\alpha(r) = \left\{\left(\frac{\delta}{\delta z_\alpha(r)} - \operatorname{div}\frac{\delta}{\delta y_\alpha(r)}\right) F(z;\ y;\ Q)\right\}_{z=x,\ y=\nabla x} = \left\{\frac{\delta}{\delta z_\alpha(r)} F(z; \nabla z;\ Q\right\}_{z=x}. \tag{5,5}$$

По существу, формулы (5.3) — (5.5) в совокупности с (2.7) дают наиболее общий вид возможных (марковских) гидродинамических уравнений. Эти формулы представляют собой стандартный алгоритм построения различных моделей сплошной среды, причем можно утверждать, что они охватывают все термодинамически оправданные ситуации[11]. Эти формулы дают также правило проверки гидродинамических уравнений: уравнения допустимы, если могут быть записаны в виде (5.5) с КП, обладающим свойствами 1—3 и удовлетворяющим ФДС (2.8).

ВП (4.5) и вытекающий из него ВП (4.11), (4.20), (4.22) справедливы и в случае распределенных систем. Кроме того, рассматривая z и y как независимые виртуальные переменные, можно получить различные другие формы ВП. С помощью преобразования Лежандра по z и y построим лагранжианы

$$\Lambda(\sigma;\ j;\ Q) \equiv \int (\sigma_\alpha z_\alpha + j_\alpha y_\alpha)\, dr - F(z;\ y;\ Q) + F(x;\ \nabla x;\ Q). \tag{5.6}$$

[11] Здесь имеются в виду либо замкнутые системы, либо открытые, в которых СНС формируется граничными условиями Однако в разд 6 мы фактически покажем, что это утверждение верно и в более общем случае, когда возбуждающие СНС силы действуют во всем объеме системы.

$$\sigma_\alpha(r)=\frac{\delta}{\delta z_\alpha(r)}F(z;\ y;\ Q),\ j_\alpha(r)=\frac{\delta}{\delta y_\alpha(r)}F(z;\ y;\ Q),$$
$$\tilde{\Lambda}(\sigma;\ j;\ Q)\equiv\Lambda(\sigma;\ j;\ Q)-\int(\sigma_\alpha x_\alpha+j_\alpha\nabla x_\alpha)\,dr. \tag{5.7}$$

Эти лагранжианы сохраняют все свойства, рассмотренные в предыдущем пункте, в частности, $\Lambda\geqslant 0$, $\tilde{\Lambda}\geqslant 0$.

Уравнение (5.5) вытекает из вариационного принципа

$$\tilde{A}[Q;\ j]\equiv\int\tilde{\Lambda}(\dot{Q}+\operatorname{div}j;\ j;\ Q)\,dt=\min=0, \tag{5.8}$$

где Q_α и j_α варьируются независимо как компоненты 4 — вектора. Соответствующие уравнения Эйлера имеют вид

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\delta}{\delta\sigma_\alpha(r)}\Lambda(\sigma;\ j;\ Q)=\frac{\delta}{\delta Q_\alpha(r)}\Lambda(\sigma;\ j;\ Q),$$
$$\Delta\frac{\delta}{\delta\sigma_\alpha(r)}\Lambda(\sigma;\ j;\ Q)=\frac{\delta}{\delta j_\alpha(r)}\Lambda(\sigma;\ j;\ Q),\ \sigma=\dot{Q}+\operatorname{div}j. \tag{5.9}$$

В общем случае гидродинамические уравнения (5.5) пространственно-нелокальны. Источники $\sigma(r)$ зависят не только от $x(r)$, $Q(r)$, но и от $\nabla x(r)$ и высших пространственных производных. Аналогично, потоки $j(r)$ зависят от $\nabla x(r)$, $\nabla\nabla x(r)$ и т. д. Рассмотрим для примера «гауссовскую систему» с одной степенью свободы, для которой

$$F(z;\ y;\ Q)=\frac{1}{2}\iint\lambda_{2,0}(r_1;\ r_2;\ Q)\,z(r_1)\,z(r_2)\,dr_1\,dr_2+$$
$$+\frac{1}{2}\iint\lambda_{0\,2}(r_1;\ r_2;\ Q)\,y(r_1)\,y(r_2)\,dr_1\,dr_2,$$

$$\dot{Q}(r)=\int\lambda_{2,0}(r;\ r';\ Q)\,x(r')\,dr'-\operatorname{div}\int\lambda_{0,2}(r;\ r';\ Q)\nabla x(r')\,dr'.$$

Из (5.4) следует, что интегральное ядро $\lambda_{2,0}$ симметрично по r, r' и неотрицательно определено, как и ядро $\lambda_{0,2}$. Оба ядра нелокально зависят от Q, т. е. по существу являются функционалами от поля Q. Еще один источник нелокальности — это зависимость $x=x(Q)$.

Обычно используемые гидродинамические модели локальны и хорошо согласуются с опытом. Со «стохастической» точки зрения такие модели соответствуют δ-коррелированным в пространстве шумовым источникам. Сформулируем условие локальности (для однородной системы).

1. $x(r;\ Q) = x(Q(r))$, функционал переходит в функцию.
2. $\lambda_{n,m}(r_1, \ldots, r_n, \rho_1, \ldots, \rho_m;\ Q) = \delta(r_2 - r_1) \ldots \delta(r_n - r_1) \times \times \delta(\rho_1 - r_1) \ldots \delta(\rho_m - r_1)\, \lambda_{n,m}(Q(r_1);\ \nabla x(r_1))$.

Здесь мы предполагаем, что $\lambda_{n,m}$ в правой части зависят локально от всех обобщенных сил, определяющих ПЭ (5.2). При этих условиях

$$\Phi = \int \varphi(z;\ y;\ Q)\, dr,$$

где плотность КП имеет вид

$$\varphi(z;\ y;\ Q) = \sum_{n+m\geqslant 2}^{\infty} \frac{1}{n!\,m!} \lambda_{n,m}(Q;\ \nabla x)\, z^n y^m. \tag{5.10}$$

Теперь нетрудно ввести плотность лагранжиана и написать локальный вариант ВП (5.8) и уравнений Эйлера (5.9.).

Для необратимых потоков из (5.5), (5.10) получаем выражение

$$j_\alpha(r) = \tilde{\lambda}_\alpha(Q;\ \nabla x) + \tilde{\lambda}_{\alpha\beta}(Q(r);\ \nabla x(r))\, \nabla x_\beta(r) + + \frac{1}{2} \tilde{\lambda}_{\alpha\beta\gamma}(Q(r);\ \nabla x(r))\, \nabla x_\beta(r)\, \nabla x_\gamma(r) + \ldots, \tag{5.11}$$

$$\tilde{\lambda}_m(Q, \nabla x) \equiv \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial y} \right)^m \varphi(x;\ y;\ Q) \right\}_{y=0}.$$

Первый член в (5.11) вызван корреляцией «внутренних» необратимых процессов и пространственного переноса и может отличаться от нуля в неизотропной системе. Коэффициенты переноса $\tilde{\lambda}_{\alpha\beta\,\cdot\,\delta}$ полностью симметричны по всем индексам, однако сами могут зависеть от градиентов. Действительно, в общей нелинейной теории корреляторы флуктуационного потока I_α зависят от сопряженной термической силы x_α. Поскольку с потоками j_α сопряжены градиенты

∇x_α, нельзя исключить зависимость λ_n в (5.11) от $\nabla \dot{x}_\alpha$. Поэтому «действительные» коэффициенты переноса в зависимости $j = j(\nabla x)$ невзаимны, вообще говоря, вопреки гипотезе, высказанной в [2]. Однако этот факт не мешает вариационной формулировке нелинейной теории.

Как быть, если в силу некоторого строгого закона сохранения $\sigma_\alpha = 0$? С общей рассмотренной точки зрения это особый вырожденный случай, однако легко убедиться, что никаких трудностей здесь не возникает. Лагранжиан обычным образом строится и в этом случае, но уже не зависит от σ (если все $\sigma_\alpha \equiv 0$). ВП (5.8) принимает вид

$$\int \tilde{\Lambda}(j;\ Q)\,dt = \min = 0,$$

где варьирование происходит при условии $\dot{Q} + \operatorname{div} j = 0$.

Некоторые элементарные примеры и конкретные стохастические модели распределенных систем будут рассмотрены отдельно.

6. ВАРИАЦИОННЫЙ ПРИНЦИП ДЛЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ В ОТКРЫТЫХ СИСТЕМАХ

В разд. 3 построен КП и сформулирован ВП для стационарного процесса переноса через открытую систему. Там отмечалось, что этот КП представляет собой совершенно точную конструкцию, свободную от каких-либо предположений относительно выбора макропеременных, поскольку в СНС $\frac{\tau_m}{\tau} = \frac{\tau}{\tau_\mu} = \infty$. Платой за точность является ограниченность информации, которую можно извлечь из глобальных уравнений переноса $I = \bar{I}(x)$ о внутренних процессах в системе. При определенных значениях внешних сил в системе могут возникнуть пространственные и временные диссипативные структуры, гигантские когерентные флуктуации в форме периодических или нерегулярных (связанных со странными аттракторами, как в известной модели Лоренца) движений. В таком случае $\bar{I}(x)$ совпадают с усредненными по времени колеблющимися потоками и слабо отражают внутренние процессы. Более подробное описание открытой системы, связанное с введением внутренних переменных, по необходимости будет приближенным, но позволит рассмотреть нестационарные процессы и бифуркации в открытых системах.

Кинетический потенциал и ВП для открытых систем выводятся в точности так же, как для замкнутых. Исходным пунктом служат марковские ФДС, полученные в [1]. Обозначим через f_i внешние силы, а через $G_i(Q; f)$ обозначим условные средние значения сопряженных с f_i потоков при заданном внутреннем макросостоянии.

Термические силы $x_\alpha = x_\alpha(Q)$ определим по-прежнему формулой (2.7), так что x_α являются мерой отклонения системы от равновесия. Безусловно, можно ввести x_α и иначе, взяв за основу не равновесное состояние, а некоторое другое устойчивое макросостояние, в котором флуктуации макропеременных малы. Однако ФДС ((8.3), [1]), хотя и относятся к существенно неравновесным процессам, в качестве важного элемента содержат равновесное распределение $W_0(q)$. Поэтому определение (2.7) наиболее удобно.

Перепишем марковские ФДС из [1] в принятых обозначениях:

$$(-\varepsilon)^n W_0(Q)\, K_n(\varepsilon Q; \mu f) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!}\left(-\frac{\partial}{\partial Q}\right)^m K_n(Q; f)\, W_0(Q),$$
$$n \geqslant 1, \tag{6.1}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(-\frac{\partial}{\partial Q}\right)^n K_n(Q; f)\, W_0(Q) = \beta f_i y_i(Q; f)\, W_0(Q), \tag{6.2}$$

где $\mu_i = \pm 1$ — индексы четности f_i, а $y_i(Q; f)$ — условные средние сопряженных с f_i потоков при фиксированных мгновенных значениях макропеременных. ФДС (6.1), (6.2) формально отличаются от равновесных соотношений только наличием аргументов f_i и ненулевым членом в правой части (6.2). Полагая

$$K_\alpha(Q; f) \equiv K_\alpha^0(Q; f) + a_{\alpha l}(Q; f) f_l,$$
$$K_n(Q; f) \equiv K_n^0(Q; f) \qquad (n \geqslant 2), \tag{6.3}$$

где функции $a_{\alpha i}$ удовлетворяют соотношениям

$$\frac{\partial}{\partial Q_\alpha} a_{\alpha l}(Q; f)\, W_0(Q) + \beta y_l(Q; f)\, W_0(Q) = 0, \tag{6.4}$$

для K_n^0, $n \geqslant 1$ получим из (6.1), (6.2) ФДС равновесного типа. Из (6.1) также следует (здесь нет суммирования)

$$\varepsilon_\alpha a_{\alpha i}(\varepsilon Q;\ \mu f)\mu_i + a_{\alpha i}(Q;\ f) = 0, \tag{6.5}$$

т. е. второй член в (6.3) является обратимым и дает вклад только в обратимую компоненту гидродинамических уравнений. Он описывает непосредственное динамическое влияние внешних сил f_i на внутренние процессы. Зависимость же $K^0(Q;\ f)$ от f_i описывает влияние f_i на термостат и через термостат на гидродинамику системы.

Для построения гидродинамических уравнений по общему рецепту введем локальные кинетические коэффициенты

$$\lambda_n^0(Q;\ f) \equiv \frac{(-1)^n}{2}\beta^{n-1}\int K_n^0(q;\ f)\,e^{-\beta qx}W_0(q)\,dq\,\Xi^{-1}(-\beta x),$$

которые удовлетворяют ФДС вида (2.8), и функции

$$A_{\alpha i}(Q;\ f) \equiv \int a_{\alpha i}(q;\ f)\,e^{-\beta qx}\,W_0(q)\,dq\,\Xi^{-1}(-\beta x),\quad x = x(Q),$$

$$G(Q;\ f) \equiv \int y_i(q;\ f)\,e^{-\beta qx}W_0(q)\,dq\,\Xi^{-1}(-\beta x).$$

Из (6.4) получаем

$$G_i(Q;\ f) + x_\alpha(Q)A_{\alpha i}(Q;\ f) = 0. \tag{6.6}$$

Гидродинамические уравнения имеют вид

$$\dot Q_\alpha \equiv \bar I(Q;\ f) = A_{\alpha i}(Q;\ f)f_i + \bar I_\alpha^0(Q;\ f), \tag{6.7}$$

где $\bar I_\alpha^0$ определяются K_α^0. Если внешние силы не влияют на термостат, то K_n^0 не зависят от f_i, $\bar I_\alpha^0(Q;\ f) = \bar I_\alpha^0(Q;\ 0)$, $A_{\alpha i}(Q;f) = A_{\alpha i}(Q;\ 0)$, и f_i входят в (6.7) линейно.

Введем КП:

$$\begin{aligned} F(z;\ Q;\ f) &= z_\alpha A_{\alpha i}(Q;\ f)f_i + F^0(z;\ Q;\ f); \\ F^0(z;\ Q;\ f) &= \bar I_\alpha^{0r}(Q;\ f)z_\alpha + \sum_{n=2}^{\infty}\frac{z^n}{n!}\lambda_n^0(Q;\ f). \end{aligned} \tag{6.8}$$

С помощью КП уравнение (6.7) можно записать в виде (2.1). Благодаря (6.5), линейный по z_α член в КП содержит только обратимые функции. Очевидно, что при любых f_i потенциалы F^0 и F выпуклы по z, и что, как и в разд. 2, 4,

$$2\beta F^0(x(Q);\ Q;\ f) = \beta x_\alpha(Q)\overline{I}^0_\alpha(Q;\ f) = P_{in}(Q;\ f) \geqslant 0, \quad (6.9)$$

где P_{in} — полное, или внутреннее, ПЭ, или, другими словами, необратимый поток энтропии в термостат. Для макроскопической энтропии, служащей мерой отклонения системы от равновесия, имеем с учетом (6.6)

$$\frac{d}{dt} S(Q) = \beta x_\alpha(Q)\overline{I}_\alpha(Q;\ f) = P_{in}(Q;\ f) - \beta f_l G_l(Q;\ f). \quad (6.10)$$

Здесь правая часть может быть отрицательной. Величина

$$P_{ex}(Q;\ f) \equiv -\beta f_l G_l(Q;\ f)$$

имеет смысл внешнего потока энтропии к макропеременным. Знак «минус» здесь фигурирует потому, что при положительной работе сил над системой $f_i G_i > 0$ распределение макропеременных отклоняется от равновесного, а энтропия этого распределения $S(Q)$ убывает. В неравновесном стационарном и устойчивом состоянии положительный поток энергии от внешних сил «проходит через макропеременные» и рассеивается в термостате:

$$P_{in} = \beta f_i G_i > 0. \quad (6.11)$$

Если СНС неустойчиво и переходит во временную диссипативную структуру, то $S(Q)$ колеблется (периодически или хаотически), а соотношение (6.11) соблюдается в среднем. Из (6.9), (6.10) также видно, что в те периоды, когда система удаляется от равновесия, и $\dot{S}(Q) < 0$, обязательно $f_i G_i > 0$. Наоборот, совершая положительную работу при $f_i G_i < 0$, система, согласно (6.10), обязательно приближается к равновесию. Для максимальной работы A, которую можно получить от системы за время от t_0 до t_1, из (6.9) (6.10) получаем

$$A = -\int_{t_0}^{t_1} f_l G_l\, dt < T\,\{S(Q(t_1)) - S(Q(t_0))\}.$$

ВП для открытой системы в локальной форме записывается идентично (4.5). Введем «макрогамильтонианы»

$$H^0(z;\ Q;\ f) \equiv F^0(z;\ Q;\ f) - F^0(x(Q);\ Q;\ f),$$

$$H(z;\ Q;\ f) \equiv F(z;\ Q;\ f) - F(x(Q);\ Q;\ f),$$

и с помощью стандартного преобразования Лежандра по z построим соответствующие лагранжианы $\Lambda^0(\dot{Q};\ Q;\ f)$, $\Lambda(\dot{Q};\ Q;\ f)$. Очевидно,

$$\Lambda(\dot{Q};\ Q;\ f) = \Lambda^0(\dot{Q} - A(Q;\ f)f;\ Q;\ f) - f_i G_i(Q;\ f). \tag{6.12}$$

Снова отметим случай, когда внешние силы не влияют на термостат и возбуждают систему динамически. При этом F^0 и Λ^0 фактически не зависят от f, и

$$\Lambda(\dot{Q};\ Q;\ f) \equiv \Lambda^0(\dot{Q} - A(Q)f;\ Q) - f_i G_i(Q), \tag{6.13}$$

где $\Lambda^0(\dot{Q};\ Q) = \Lambda_0(\dot{Q};\ Q)$ — лагранжиан невозмущенной замкнутой системы, рассмотренный (при $\varkappa = 0$) в разд. 4. Этот случай замечателен своей простотой.

Без специального доказательства теперь можно написать неравенства

$$\Lambda^0(\dot{Q};\ Q;\ f) \geqslant 0, \quad \Lambda(\dot{Q};\ Q;\ f) \geqslant -f_i G_i(Q;\ f), \tag{6.14}$$

$$\Lambda^0(\dot{Q};\ Q;\ f) \geqslant \dot{Q}_\alpha x_\alpha(Q); \quad \Lambda(\dot{Q};\ Q;\ f) \geqslant \dot{Q}_\alpha x_\alpha(Q). \tag{6.15}$$

Равенства в (6.14) достигаются только в равновесии при $f_i = 0$. Равенства в (6.15) достигаются только на единственной (при фиксированных $Q_\alpha(t_0)$) физической траектории $Q^0(t)$, удовлетворяющей гидродинамическим уравнениям (6.7), причем

$$\Lambda(\dot{Q}^0;\ Q^0;\ f) = \dot{Q}^0_\alpha x_\alpha(Q^0) = x_\alpha(Q^0)\bar{I}_\alpha(Q^0;\ f).$$

Таким образом, ВП можно записать и в случае открытой системы в аналогичной (4.20) форме:

$$\int \{\Lambda(\dot{Q};\ Q;\ f) - \dot{Q}x(Q)\}\, dt = \min = 0 \tag{6.16}$$

и назвать его принципом минимального избыточного производства энтропии. Аналог ВП (4.22) для открытой системы в общем случае не имеет места, так как при возбуждении макроскопических флуктуаций предел $Q(t)$ при $t \to \infty$ не существует.

Согласно (6.16), в устойчивом стационарном состоянии при $\dot{Q}_\alpha = 0$ значения Q находятся из ВП,

$$\frac{\partial}{\partial Q_\alpha} \Lambda (0;\ Q;\ f) = 0, \tag{6.17}$$

или, в случае (6.13)

$$\frac{\partial}{\partial Q} \{\Lambda^0 (-A(Q) f;\ Q) - f_l G_l (Q)\} = 0; \tag{6.18}$$

$$G_l (Q) = - x_\alpha (Q) A_{\alpha l} (Q). \tag{6.19}$$

Однако с тем же успехом ввиду (6.15), (6.16) стационарное состояние можно найти из одного уравнения:

$$\Lambda (0;\ Q;\ f) = 0; \qquad \Lambda^0 (-A(Q) f;\ Q) - f_l G_l (Q) = 0. \tag{6.20}$$

Строго говоря, из (6.17) — (6.20) в качестве решений получаются и неустойчивые состояния, если такие есть. Для того, чтобы отделить их, нужно повернуться к (6.16).

Для систем типа (6.13) можно сформулировать ВП также для внешних сил. Условие экстремума (6.13) по f_i дает

$$- A_{\alpha l} (Q) \Lambda^0_\alpha (\dot{Q} - A(Q) f;\ Q) - G_l (Q) = 0, \tag{6.21}$$

где введено обозначение

$$\Lambda^0_\alpha (I;\ Q) \equiv \frac{\partial}{\partial I_\alpha} \Lambda^0 (I;\ Q).$$

Учитывая (6.19), видим, что (6.21) удовлетворяется, в частности, при

$$\Lambda^0_\alpha (\dot{Q} - A(Q) f;\ Q) = x_\alpha (Q),$$

а из этих уравнений вытекают уравнения (6.7)

Пусть при некоторых значениях сил в системе возникает временная диссипативная структура. Какой бы сложной ни была периодическая или стохастическая (стационарная в среднем) траектория макропеременных, ввиду финитности, движения из (6.16) имеем

$$\lim_{\tau \to \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \{\Lambda (\dot{Q};\ Q;\ f) - \dot{Q}\, x(Q)\}\, dt = \tag{6.22}$$

$$= \lim_{\tau\to\infty} \frac{1}{\tau}\left\{ \int_0^\tau \Lambda dt - S(Q(\tau)) + S(Q(0))\right\} = \langle \Lambda(\dot{Q};\ Q;\ f)\rangle \geqslant 0,$$

где угловая скобка обозначает усреднение по времени (а в эргодическом случае и усреднение по ансамблю).

Равенство в (6.22) соответствует физической незатухающей траектории $Q^0(t)$. Если ее аппроксимировать виртуальной полипериодической траекторией, зависящей от ряда параметров b_j, определяющих длительность и форму периодов, то наилучшие значения этих параметров находятся из вариационных уравнений

$$\frac{\partial}{\partial b_j} \langle \Lambda(\dot{Q};\ Q;\ f)\rangle = 0.$$

В распределенном случае ВП (6.16), (6.17) можно продуктивно использовать для анализа бифуркаций, приводящих к стабильным пространственным диссипативным структурам, когда решение нелинейных гидродинамических уравнений с частными производными оказывается чрезвычайно сложной задачей. Аппроксимируя поля $Q_\alpha(r)$ пробными функциями, зависящими от ряда неизвестных параметров b_j (и удовлетворяющими граничным условиям),

$$Q_\alpha(r) \approx \tilde{Q}_\alpha(r;\ b),$$

оптимальные значения этих параметров b_j^0 найдем аналитически или численно из ВП:

$$\Lambda(0;\ \tilde{Q}(r;\ b);\ f) = \min.$$

Увеличивая число параметров, можно как угодно близко подойти к точному решению, для которого $\Lambda(0;\ Q^0;\ f) = 0$.

Величина $\Lambda(0;\ \tilde{Q}(r;\ b^0),\ f)$ служит естественной мерой близости приближенного и точного решений.

7. КАНОНИЧЕСКИЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ МАКРОПЕРЕМЕННЫХ

Построенный в разд. 2, 4 КП просто связан с марковской стохастической моделью системы, допускает благодаря свойству 2 простую феноменологическую интерпретацию как виртуальное производство энтропии и поэтому вполне может претендовать на роль одного из основных объектов канонической ННТ. В специальных случаях (простые стохастические системы) возможны и другие способы введения КП. Покажем теперь, что и в самом общем случае КП можно ввести иначе, чем в разд. 2 (ограничимся случаем $x = 0$). Сначала рассмотрим модификацию КП, нарушающую свойство 2, но интересную с точки зрения ФДС, а затем обратимся к широкому классу преобразований КП, сохраняющих все его свойства и сопутствующих каноническим (в обычном смысле механики) преобразованиям координат.

ФДС (2.8) позволяет выразить локальные коэффициенты переноса через симметризированные коэффициенты следующим образом (эти формулы представляют собой вариант формул работы [5], поэтому доказательство не приводим):

$$I_\alpha(x) = \bar{I}^r(x) + \sum_{m=1}^{\infty} C_m x^{2m-1}\left[\lambda_{2m}(x) + \varepsilon^{2m}\lambda_{2m}(\varepsilon x)\right], \tag{7.1}$$

$$\begin{aligned} \bar{I}_\alpha(x) = \bar{I}^r_\alpha(x) &+ C_1\{\lambda_{\alpha\beta}(x) + \varepsilon_\alpha\varepsilon_\beta\lambda_{\alpha\beta}(\varepsilon x)\}x_\beta + \\ &+ C_2\{\lambda_{\alpha\beta\gamma\delta}(x) + \varepsilon_\alpha\varepsilon_\beta\varepsilon_\gamma\varepsilon_\delta(\varepsilon x)\}x_\beta x_\gamma x_\delta + \ldots; \end{aligned} \tag{7.2}$$

$$\begin{aligned} \lambda_n(x) &= \lambda'_n(x) + \sum_{m=1}^{\infty} C_m x^{2m-1}\lambda'_{n+2m-1}(x), \\ \lambda'_n(x) &\equiv \frac{1}{2}\{\lambda_n(x) + (-\varepsilon)^n\lambda_n(\varepsilon x)\} \quad (n \geqslant 2). \end{aligned} \tag{7.3}$$

Здесь числа C_n определяются разложением

$$\operatorname{th}(u/2) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n u^{2n-1}.$$

Тензоры λ'_n не связаны между собой ФДС и поэтому являются произвольными, в определенном смысле, параметрами теории. В частности, для некоторого класса простых систем они не зависят от сил: $\lambda'_n = \mathrm{const}$ $(n \geqslant 2)$. Эта форма уравнений переноса предпочтительней в том смысле, что содержит только симметризированные относительно инверсии времени коэффициенты четного порядка.

Ввиду симметричности тензоров λ'_n можем написать

$$\overline{I}_\alpha(x) = \left\{\frac{\partial}{\partial z_\alpha}\ \widetilde{F}(z;\ x)\right\}_{z=x};\tag{7.4}$$

$$\widetilde{F}(z;\ x) \equiv z_\alpha \overline{I}^r(x) + \widetilde{\Phi}(z;\ x),\quad \widetilde{\Phi}(z;\ x) \equiv \sum_{m=1}^{\infty}\frac{C_m}{m}\, z^{2m}\lambda'_{2m}(x).\tag{7.5}$$

Новый КП $\widetilde{\Phi}$ четен по z. В представлении Леви-Хинчина он имеет вид

$$\widetilde{\Phi}(z;\ x) = 2T\int\frac{1}{|a|^2}\ln\operatorname{ch}(az/2)\,\{R(a;\ x) + R(\varepsilon a;\ \varepsilon x)\}\,da =$$
$$= T\int\frac{1}{|a|^2}\ln\operatorname{ch}(az/2)\,\{R(a;\ x) + R(-a;\ x) +\tag{7.6}$$
$$+ R(\varepsilon a;\ \varepsilon x) + R(-\varepsilon a;\ \varepsilon x)\}\,da.$$

Отсюда видно, что потенциал $\widetilde{\Phi} \geqslant 0$ и является выпуклой функцией z. Однако аналог свойства 2 не выполняется.

Очевидно, рассмотренная модификация КП не единственно возможная. Однако подобные модификации не годятся для канонической формулировки теории, поскольку они теряют часть важной информации. Так, потенциал (7.5) не позволяет восстановить коэффициенты λ_n, $n \geqslant 2$ и марковский кинетический оператор.

Другие, совершенно полноценные (сохраняющие всю информацию), модификации КП можно получить с помощью канонической замены переменных z, Q по тем же правилам, что и в механике. При этом структура гидродинамических уравнений и ВП сохраняется. Здесь будет работать весь развитый в механике формализм канонических преобразований. С помощью подходящего канонического преобразования иногда удастся упростить гидродинамические уравнения. С другой стороны, можно попытаться упростить лагранжиан, а затем использовать ВП (4.20), (6.16) для приближенного определения физической траектории в новых переменных, не решая уравнения движения, а минимизируя полное производство энтропии по пробным параметрам.

Рассмотрим важный класс канонических преобразований (новые переменные и функции в новых переменных обозначим знаком «тильда») [15]:

$$\tilde{Q}_\alpha = \tilde{Q}_\alpha(Q); \; z_\alpha = \tilde{z}_\beta \frac{\partial \tilde{Q}_\beta}{\partial Q_\alpha}. \tag{7.7}$$

В новых переменных «действие» имеет вид (снова при x=0)

$$A = \int \{\dot{\tilde{Q}}_\alpha \tilde{z}_\alpha - \tilde{H}(\tilde{z}; \tilde{Q})\} dt,$$

$$\tilde{H}(\{\tilde{z}_\alpha\}, \{\tilde{Q}_\alpha\}) = H\left(\left\{\tilde{z}_\beta \frac{\partial \tilde{Q}_\beta}{\partial Q_\alpha}\right\}, \; \{Q_\alpha(\tilde{Q})\}\right),$$

на физической траектории

$$\tilde{z}_\alpha = \tilde{x}_\alpha(\tilde{Q}) \equiv x_\gamma(Q) \frac{\partial Q_\gamma}{\partial \tilde{Q}_\alpha} = T \frac{\partial}{\partial \tilde{Q}_\alpha} S(Q). \tag{7.8}$$

Кинетический потенциал в новых переменных имеет вид

$$\tilde{F}(\tilde{z}; \tilde{Q}) = \tilde{\bar{I}}^r_\alpha(\tilde{Q}) \tilde{z}_\alpha + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \tilde{\lambda}_n(\tilde{Q}) \tilde{z}^n,$$

$$\tilde{\bar{I}}^r_\alpha(\tilde{Q}) = \frac{\partial \tilde{Q}_\alpha}{\partial Q_\beta} \bar{I}^r_\beta(Q); \; Q = Q(\tilde{Q}); \tag{7.9}$$

$$\tilde{\lambda}_{\alpha_1 \ldots \alpha_n}(\tilde{Q}) = \lambda_{\beta_1 \ldots \beta_n}(Q) \frac{\partial \tilde{Q}_{\alpha_1}}{\partial Q_{\beta_1}} \cdots \frac{\partial \tilde{Q}_{\alpha n}}{\partial Q_{\beta n}}. \tag{7.10}$$

Все фундаментальные свойства КП при таком каноническом преобразовании сохраняются (выпуклость $\tilde{F}$ по $\tilde{z}$ обеспечена линейностью связи (7.7) по «импульсам»), и локальные коэффициенты переноса (7.10) остаются симметричными. Сохраняют силу и ФДС (2.8), что видно из (7.8), (7.10)

$$(-\tilde{\varepsilon})^n \tilde{\lambda}_{..}(\tilde{Q}\tilde{\varepsilon}) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\tilde{x}^m(\tilde{Q})}{m!} \tilde{\lambda}_{n+m}(\tilde{Q}), \tag{7.11}$$

если преобразование (7.7) приводит к переменным $\check{Q}_\alpha$ определенной четности.

Таким образом, теория полностью инвариантна относительно канонического преобразования (7.7), т. е. относительно любой замены «физических» переменных Q_α (даже не обязательно взаимно однозначной). В новых переменных функция $-\tilde{S}(\tilde{Q}) \equiv -S(Q(\tilde{Q}))$ по-прежнему является функцией Ляпунова. Все это означает, что от нового КП $\tilde{F}$ (7.9) мы можем по общему правилу перейти к марковскому кинетическому оператору и марковской стохастической модели для флуктуаций новых макропеременных $\tilde{Q}_\alpha(t)$. Иначе говоря, получен простой рецепт канонического преобразования стохастических макропеременных и уравнений, находящийся в соответствии с нелинейными ФДС. Понятие КП (и виртуальных процессов) играет здесь ключевую роль.

Преобразование (7.7) позволяет построить стохастическую модель для обобщенных термодинамических сил, которые обычно имеют смысл интенсивных термодинамических величин и не могут быть определены в микроскопической теории как фазовые функции микропеременных, так что их флуктуации не удается разумно ввести на микроскопическом уровне. Пусть, например, Q — поле плотности внутренней энергии в нелинейной задаче теплопереноса. Тогда x — поле обратной температуры, которое вводится как параметр локально-равновесного распределения (2.7). Неясно, как ввести флуктуации температуры на микроуровне. Рассмотренный формализм позволяет сделать это на макроуровне в соответствии с ФДС (2.8), (7.11). Примем за новые переменные термодинамические силы

$$\tilde{Q}_\alpha \doteq \tilde{Q}_\alpha(Q) \equiv x_\alpha(Q),$$

$$\tilde{x}_\alpha(\tilde{Q}) = \tilde{Q}_\gamma \frac{\partial}{\partial \tilde{Q}_\alpha} Q_\gamma(\tilde{Q}).$$

По формулам (7.10) найдем локальные кинетические коэффициенты, а затем по общему рецепту получим марковские кинетические коэффициенты, удовлетворяющие ФДС. В результате построим стохастическую модель для флуктуаций x (температуры).

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выделим в заключение основные результаты настоящей работы.

1. Доказана универсальная точная формула симметрии для вероятностного (или характеристического) функционала макроскопических переменных, выражающая собой обратимость микроскопического движения во времени. Эта формула (названная выше обобщенной ФДТ) эквивалентна бесконечному набору флуктуационно-диссипационных соотношений между нелинейным откликом системы на динамические возмущения и кумулянтами флуктуаций.

2. Доказана обобщенная ФДТ для неравновесных систем и термических возмущений. Термические силы, определяемые статистически как параметры квазиравновесного распределения, фигурируют формально равноправно с динамическими силами. Продемонстрировано, как точные флуктуационно-диссипационные соотношения, вытекая из микрообратимости, в то же время неизбежно ведут к необратимости макроскопической эволюции.

3. Классические и квантовые флуктуационно-диссипационные соотношения представлены в единой форме, исключающей постоянную Планка из соотношений термодинамического характера.

4. Развита марковская теория флуктуаций в неравновесных открытых системах.

5. Показано, что нелинейные диссипативные члены в уравнениях эволюции макропеременных (гидродинамических уравнениях) универсальным образом выражаются через негауссовские статистические характеристики процессов переноса.

6. Сформулированы общие правила построения марковских (локальных по времени) гидродинамических уравнений, находящихся в соответствии с флуктуационно-диссипационными соотношениями и, как следствие, в соответствии с законами термодинамики (принцип возрастания энтропии). Найдена каноническая процедура введения флуктуационных источников в нелинейные гидродинамические уравнения и перехода от них к марковской стохастической модели системы.

7. На основе флуктуационно-диссипационных соотношений даны определение, статистическое обоснование и интерпретация виртуальных состояний и кинетического потенциа-

ла как производства энтропии в виртуальном неравновесном процессе. Кинетический потенциал является фундаментальной характеристикой системы и содержит полную информацию как о диссипативных, так и о флуктуационных процессах в ней.

8. Доказано, что самые общие уравнения нелинейной неравновесной термодинамики являются следствием вариационного принципа, формально аналогичного принципу Гамильтона в механике. Этот вариационный принцип утверждает, что в любом виртуальном процессе производство энтропии всегда больше, чем в реальном, и поэтому может быть назван (как и в известной линейной теории) принципом минимального производства энтропии. Таким образом, дана каноническая гамильтонова вариационная формулировка нелинейной неравновесной термодинамики (оказывающаяся необходимым термодинамическим следствием флуктуационно-диссипационных соотношений).

Различные формы полученного ВП могут быть положены в основу физически прозрачных вариационных методов приближенного (аналитического или численного) исследования неравновесных процессов в нелинейных системах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бочков Г. Н., Кузовлев Ю. Е. — Препринт № 138 / Горьковский научно-исследовательский радиофиз. ин-т, 1980.
2. Дьярмати И. Неравновесная термодинамика — М: Мир, 1974.
3. Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. — М.: Мир, 1973.
4. Glansdorff P., Prigogine I. — Physica, 1964, v. 30, p. 351.
5. Бочков Г. Н. Кузовлев Ю. Е. — ЖЭТФ, 1979, т. 76, с. 1071.
6. Gyarmati I. — Ann. d. Phys., 1969, v. 7, p. 353.
7. Шехтер Р. Вариационные методы в инженерных расчетах. — М.: Мир, 1971.
8. Бочков Г. Н, Кузовлев Ю. Е. — Письма в ЖЭТФ, 1979, т. 30, с. 52.
9. Бочков Г. Н., Кузовлев Ю. Е. — ЖЭТФ, 1977, т. 72, с. 238.
10. Голдстейн Г. Классическая механика. — М : Наука, 1975.
11. Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения, т. 2. — М.: Мир, 1968.
12. Бочков Г Н, Кузовлев Ю. Е. — Радиофизика, 1978, т. 21, с. 1468.
13. Стратонович Р. Л. — Вестник МГУ, сер. физ.-астр., 1962, № 5, с. 16.
14. Бочков Г. Н., Кузовлев Ю. Е. — Радиофизика, 1977,. т. 20, с. 1505.
15. Тер Хаар Д. Основы гамильтоновой механики. — М.: Наука, 1974.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Герман Николаевич Бочков
Юрий Евгеньевич Кузовлев

НЕЛИНЕЙНЫЕ ФЛУКТУАЦИОННО-ДИССИПАЦИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ И СТОХАСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ В НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКЕ.
II. КИНЕТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ И ВАРИАЦИОННЫЕ ПРИНЦИПЫ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНЫХ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ

Сдано в набор 07.08.80. Подписано в печать 23.06.80. МЦ 00703.
Формат $60\times84^{1}/_{16}$. Бумага писчая. Гарнитура литературная
Печать высокая. Объем 3,25 п. л. Тираж 120 экз. Заказ № 1130. Бесплатно.

Горьковский ордена Трудового Красного Знамени научно-исследовательский радиофизический институт (НИРФИ),
г. Горький, 603600. ГСП-51, ул. Лядова 25/14. Тел. 38-90-91, д. 5-09.

Горьковская городская типография областного управления издательств, полиграфии и книжной торговли, ул. Свердлова, 37