

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Нелинейное броуновское движение

Ю.Л. Климонтович

Обзор теории броуновского движения, которое описывается нелинейными уравнениями Ланжевена и соответствующими уравнениями Фоккера–Планка. Рассматриваются следующие общие проблемы теории броуновского движения: броуновское движение в среде с нелинейным трением; три формы представления соответствующих уравнений Ланжевена и Фоккера–Планка: форма Ито, форма Стратоновича и кинетическая форма; уравнение Смолуховского и управляющее уравнение (master equation). Два способа перехода от управляющего уравнения к уравнению Фоккера–Планка. Управляющее уравнение для одношаговых процессов; традиционное и нетрадиционное определения вероятностей перехода; эволюция свободной энергии и энтропии при броуновском движении; функционалы Ляпунова. Рассмотрены следующие конкретные примеры: броуновское движение в автоколебательных системах; H -теорема для генератора Ван-дер-Поля; самоорганизация в генераторе Ван-дер-Поля, S -теорема; генератор с инерционной нелинейностью; бифуркации энергии предельного цикла; генераторы с мультистабильными стационарными состояниями; процессы в дискретном времени с бифуркациями энергии и периода колебаний; критерий устойчивости при переходе к дискретному времени на основе H -теоремы; броуновское движение квантовых атомов-осцилляторов в равновесном электромагнитном поле; броуновское движение в химически реагирующих системах на примере частично ионизированной плазмы; процесс Мальтуса–Ферхюльста.

PACS numbers: 05.40

Содержание

1. Введение (812).
 2. Два способа описания броуновского движения (813).
 - 2.1. Уравнение Ланжевена. 2.2. Уравнение Фоккера–Планка.
 3. Броуновское движение в среде с нелинейным трением. Три формы уравнений Ланжевена и Фоккера–Планка (814).
 4. Уравнение Фоккера–Планка для газа Больцмана (817).
 5. Уравнение Смолуховского. Управляющее уравнение (master equation) (817).
 6. Два способа перехода от управляющего уравнения к уравнению Фоккера–Планка (818).
 - 6.1. Кинетическая форма уравнения Фоккера–Планка. 6.2. Стационарное решение уравнения Фоккера–Планка.
 7. Управляющее уравнение для системы атомов в электромагнитном поле (820).
 8. Броуновское движение квантовых атомов-осцилляторов (821).
 - 8.1. Управляющее уравнение. 8.2. Уравнение Фоккера–Планка.
 9. Управляющие уравнения для одношаговых процессов (822).
 - 9.1. Традиционное определение вероятностей перехода.
 - 9.2. Нетрадиционное определение вероятностей перехода.
 10. Пространственная диффузия. Уравнение Эйнштейна–Смолуховского (824).
 - 10.1. Пространственная диффузия. Метод Ланжевена. 10.2. Диффузия броуновской частицы во внешнем поле. 10.3. Сравнение стационарных распределений для линейных и нелинейных термостатов.
 11. Гидродинамическое описание броуновского движения (827).
 12. Эволюция свободной энергии и энтропии при броуновском движении. Функционалы Ляпунова A_F, A_S (828).
 - 12.1. Управляющее уравнение. H -теорема. 12.2. Уравнение Фоккера–Планка. H -теорема. 12.3. Уравнение Эйнштейна–Смолуховского. H -теорема.
 13. Броуновское движение в автоколебательных системах. Генератор Ван-дер-Поля (830).
 14. Генератор Ван-дер-Поля. Симметризованная нелинейность (831).
 15. Совместное действие естественного и внешнего шума (833).
 16. Симметризованный генератор. Распределение координаты и скорости (833).
 17. H -теорема для генератора Ван-дер-Поля (833).
 18. Самоорганизация в генераторе Ван-дер-Поля. S -теорема (834). Энтропия Шеннона — "S-информация".
 19. Генератор с инерционной нелинейностью (836).
 20. Ветвления значений энергии предельного цикла. Генераторы с мультистабильными стационарными состояниями (837).
 21. Генераторы в дискретном времени. Бифуркации энергии предельного цикла и частоты колебаний (839).
 22. Критерий устойчивости решения уравнения Фоккера–Планка при переходе к дискретному времени на основе H -теоремы (839).
 23. Броуновское движение в химически реагирующих системах. Частично ионизированная плазма (841).
 24. Процесс Мальтуса–Ферхюльста (Malthus–Verhulst) (842).
- Список литературы (843).

Ю.Л. Климонтович. Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет, 119899, Москва, Воробьевы горы
Тел. (7-095) 939-38-25. Fax: (7-095) 143-85-47
E-mail: ylklim@hklim.phys.msu.ru

Статья поступила 18 января 1994 г.,
после доработки 29 апреля 1994 г.

1. Введение

Явление броуновского движения хорошо известно еще со школьной скамьи. Оно было открыто в 1927 г. ботаником Броуном и представляет собой непрекращающееся хаотическое движение малых макроскопических частиц в жидкости или газе.

Причина броуновского движения была понята значительно позднее. Основы теории были заложены лишь в начале этого века в классических работах А. Эйнштейна, М. Смолуховского и П. Ланжевена. Броуновское движение объясняется наличием неуравновешивающихся толчков окружающих атомов, и, следовательно, оно выявляет атомарную структуру "сплошной" среды, в которой совершается движение броуновских частиц. Основные результаты этой теории впервые были подтверждены опытами Ж. Перрена и Т. Сведберга.

В настоящее время термин "броуновское движение" имеет гораздо более широкий смысл и теория броуновского движения составляет один из основных разделов современной статистической теории открытых систем. Поясним это общее утверждение.

В статистической теории неравновесных процессов "атомы", как микроскопические структурные единицы, используются лишь на первой стадии построения теории при выборе исходной модели рассматриваемой макроскопической системы. "Рабочими" являются приближенные диссипативные нелинейные уравнения "механики сплошных сред". На кинетическом уровне описания — это, например, уравнение Больцмана для функции распределения $f(r, \rho, t)$. Уравнения Власова–Ландау для плазмы, соответствующие уравнения в физике твердого тела и т.д. Здесь используется понятие "сплошной среды" в шестимерном пространстве координат и импульсов.

На уровне гидродинамики основой служат диссипативные нелинейные уравнения "сплошной среды" для локальных функций в трехмерном пространстве, например, плотности $\rho(\mathbf{r}, t)$, скорости $u(\mathbf{r}, t)$ и температуры $T(\mathbf{r}, t)$. Наконец, при еще более грубом описании можно использовать уравнения химической кинетики для концентраций химически реагирующих компонент. Последние характеризуют движение, осредненное по объему рассматриваемой сплошной среды. Они удовлетворяют системе обыкновенных дифференциальных уравнений.

На всех трех уровнях описания — кинетическом, гидродинамическом, химической кинетики мы имеем дело с диссипативными нелинейными уравнениями сплошной среды для детерминированных (неслучайных) функций разной сложности. Такие уравнения можно назвать *динамическими* уравнениями "сплошных сред". Такое название отличает их от *стохастических* уравнений — уравнений для случайных функций. Примером последних могут служить уравнения теории турбулентности для пульсирующих — случайных гидродинамических функций.

При любом уровне описания приближенные динамические диссипативные уравнения сплошной среды могут быть улучшены — приближены к точным динамическим уравнениям исходной микроскопической модели системы, путем учета флуктуаций, наличие которых отражает "атомарную" структуру "сплошной среды". Необходимость учета флуктуаций в диссипативных уравнениях сплошной среды следует и из флуктуа-

ционно-диссипационных соотношений, которые имеют место на всех уровнях описания.

Для расчета флуктуаций существуют два общих метода. Первый из них основан на решении системы уравнений для моментов или корреляционных функций. Это наиболее общий и последовательный способ расчета как равновесных, так и неравновесных флуктуаций. Второй основан на решении кинетических, гидродинамических уравнений, а также уравнений химической кинетики с включением в них соответствующих случайных источников — "источников Ланжевена", отражающих структуру "сплошной среды". Они были впервые введены Ланжевром в диссипативное динамическое, но *линейное*, уравнение движения броуновской частицы.

Диссипативные динамические уравнения являются, как правило, нелинейными. Таким образом, возникает более общая задача — определение структуры источников Ланжевена для нелинейных систем как для равновесных, так и неравновесных процессов. Интенсивности этих источников являются, в общем случае, нелинейными.

Если эта задача решена, то открывается возможность более общего описания процессов в "сплошных средах" на основе соответствующих уравнений Ланжевена — уравнений флуктуационной кинетической теории и гидродинамики, а также флуктуационной химической кинетики. При этом роль "броуновских частиц" играют, соответственно, функции распределения, гидродинамические функции и концентрации.

Учет флуктуаций в "сплошной среде" необходим для описания многих фундаментальных явлений. Это прежде всего самого "классического броуновского движения" малых макроскопических частиц в жидкости. Для его описания необходим учет флуктуаций гидродинамических функций среды. Это можно сделать путем введения в уравнения гидродинамики источников Ланжевена. Мы видим, что само броуновское движение есть следствие атомарной структуры среды.

Разумеется, что можно продолжить перечисление явлений, объяснение которых невозможно без учета флуктуаций. Это и молекулярное рассеяние света. Это и равновесные фазовые переходы, которые происходят благодаря разрушению "старого" состояния нарастающими по мере приближения к точке фазового перехода флуктуациями. Это, наконец, и бесчисленные неравновесные фазовые переходы, последовательности которых формируют процессы самоорганизации.

Естественно, что во многих случаях флуктуации макроскопических функций могут быть рассчитаны в линейном приближении. Такая возможность заложена в самом понятии "сплошная среда". Оно подразумевает определение "точки" как физически бесконечно малого объема, содержащего много частиц. Благодаря этому во многих случаях флуктуации являются малыми и приближение Гаусса для расчета даже локальных флуктуаций является эффективным. Ситуация, однако, существенно меняется, когда система приближается к одной из критических точек. Здесь приближение Гаусса оказывается уже недостаточным и необходима нелинейная теория флуктуаций. Роль нелинейности флуктуаций в еще большей мере существенна при описании неравновесных фазовых переходов.

Для расчета нелинейных флуктуационных процессов во многих случаях более эффективными оказываются кинетические уравнения для функций распределения тех

макроскопических величин, стохастическая динамика которых определяется соответствующими уравнениями Ланжевена. В результате мы приходим к так называемым *управляющим уравнениям* (master equations). К их числу относятся и уравнения Фоккера–Планка.

Управляющие уравнения для функций распределения макроскопических переменных во многих случаях оказываются линейными по функциям распределения. Нелинейность исходных уравнений Ланжевена отражается тем, что входящие в них коэффициенты диффузии и трения зависят сами от макроскопических переменных.

Теории броуновского движения посвящена очень большая литература. Основополагающие работы Эйнштейна и Смолуховского можно найти в [1]. В этот сборник включены и две обзорные работы Ю.А. Круткова и Б.И. Давыдова. В ряде руководств по статистической физике и физической кинетике [2–9] имеются специальные разделы, посвященные в значительной мере линейной теории броуновского движения, когда диссипативные коэффициенты и интенсивность соответствующего источника Ланжевена постоянны. Математическое обоснование уравнений броуновского движения базируется на классических работах А.Н. Колмогорова.

В последние годы начала интенсивно развиваться нелинейная теория броуновского движения [5–26]. В настоящее время она составляет один из основных разделов современной статистической теории открытых систем. Применения этой теории чрезвычайно обширны. Отметим для иллюстрации лишь два обзора, посвященных теории флуктуаций в лазерах [20, 21].

Однако, несмотря на большие успехи, в развитии нелинейной теории броуновского движения имеется ряд принципиальных вопросов, которые не нашли еще достаточно полного освещения в имеющихся обзорах. Восполнению этого пробела и посвящена настоящая работа. Из всего разнообразия вопросов выбраны лишь те, которые составляют основу теории.

Это, во-первых, сопоставление альтернативных способов описания нелинейного броуновского движения. В настоящее время броуновское движение при заданных нелинейных диссипативных коэффициентах описывается различными по структуре и физическому содержанию уравнениями Ланжевена и Фоккера–Планка. Среди них выделяются три формы записи стохастических и соответствующих кинетических уравнений — форма Ито (I-form), форма Стратоновича (S-form) и "Кинетическая форма" (K-form) [17–19].

В связи с этим возникает необходимость дополнительного физического анализа, позволяющего выделить из них наиболее обоснованную с физической точки зрения форму записи уравнений нелинейной теории броуновского движения.

Аналогичная проблема неоднозначности возникает и при использовании так называемых управляющих уравнений (master equations). Здесь также для выбора наиболее естественной формы записи используются дополнительные физические аргументы. Сопоставление альтернативных форм записи иллюстрируется на примере одношаговых процессов [19].

К числу принципиальных относится и вопрос перехода от уравнения Фоккера–Планка для функции распределения $f(r, v, t)$ к уравнению Эйнштейна–Смолуховского для пространственного распределения $f(r, t)$ броуновских частиц. Обсуждается, в частности, аналогия

этого перехода с переходом от уравнения Больцмана к уравнениям газовой динамики. Она служит основой для введения в теории броуновского движения обобщенного кинетического уравнения [27, 28], на основе которого переход к приближению Крамерса [11, 12, 29, 30] для описания броуновского движения проводится без привлечения теории возмущений.

Изложение иллюстрируется примерами броуновского движения в пассивных и активных нелинейных системах. Рассматриваются, в частности, примеры броуновского движения при равновесных и неравновесных фазовых переходах. В заключение обсуждаются некоторые проблемы теории нелинейного броуновского движения.

Для цельности картины изложение начинается с краткого напоминания некоторых результатов линейной теории броуновского движения.

2. Два способа описания броуновского движения

2.1. Уравнение Ланжевена

Представим броуновскую частицу в виде шарика радиуса a и массы M . Через v обозначим относительную скорость частицы и жидкости. При движении в жидкости шарик испытывает силу трения, которая при постоянном значении v определяется формулой Стокса:

$$\mathbf{F} = -M\gamma\mathbf{v}, \quad \gamma = \frac{6\pi a}{M}\eta, \quad \eta = \rho\nu, \quad (2.1)$$

γ — коэффициент трения. Он пропорционален динамической вязкости η .

Уравнения движения шарика при наличии лишь силы трения недостаточно для описания броуновского движения. Оно отвечает приближению сплошной среды. Для учета атомарной структуры жидкости Ланжевен ввел в уравнения движения соответствующую дополнительную силу $F_L \equiv My(t)$:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}, \quad \frac{d\mathbf{p}}{dt} + \gamma\mathbf{p} = \mathbf{F}_0 + My(t), \quad \mathbf{F}_0 = -\text{grad } U. \quad (2.2)$$

Здесь учтена также внешняя сила \mathbf{F}_0 , например, сила тяжести.

Итак, в уравнении движения имеются три силы. Это прежде всего сила Стокса, которая имеет место и в приближении сплошной среды, внешняя сила и, наконец, сила Ланжевена. Она является случайной функцией времени, так как отражает наличие атомарной структуры жидкости.

Предположим, что среда находится в состоянии равновесия и внешняя сила отсутствует. Тогда все направления случайной силы равноправны и, следовательно, ее среднее значение равно нулю. Какова же структура второго момента $\langle y_i(t) y_j(t') \rangle$? Можно считать, что характерное время корреляции значений силы Ланжевена τ_{cor}^L много меньше времени релаксации $\tau_{\text{rel}} = 1/\gamma$ за счет силы трения, т.е.

$$\tau_{\text{cor}}^L \ll \tau_{\text{rel}} = \frac{1}{\gamma}. \quad (2.3)$$

В нулевом приближении по этому параметру время корреляции принимается нулевым. Такой случайный источник называется δ -коррелированным. Естественно

также считать, что разные компоненты силы Ланжевена не коррелируют между собой, так как ни одно из направлений не выделено. В результате приходим к выражениям для двух моментов:

$$\langle v_i(t) \rangle = 0, \quad \langle v_i(t) v_j(t') \rangle = 2D \delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (2.4)$$

Здесь введено обозначение $2D$ для интенсивности источника Ланжевена — средней интенсивности случайных толчков со стороны атомов среды. Множитель 2 введен, чтобы величина D в кинетическом уравнении (см. ниже) играла роль соответствующего коэффициента диффузии.

Так как имеет место неравенство (2.3), то есть основание считать случайный процесс $y(t)$ процессом Гаусса. Тогда для статистического описания случайного воздействия достаточно знать два первых момента.

Уравнения движения с источником Ланжевена все же еще незамкнуты, так как нам неизвестна интенсивность шума D . Для ее определения надо использовать условие существования статистического равновесия между броуновскими частицами и окружающей средой. С учетом этого и приходим к соотношению Эйнштейна

$$D = \gamma \frac{kT}{M}, \quad (2.5)$$

которое связывает интенсивность источника Ланжевена с диссипативным фактором γ и температурой T . Эта формула является исторически первым примером флуктуационно-диссипационного соотношения.

2.2. Уравнение Фоккера–Планка

Уравнение Ланжевена — стохастическое дифференциальное уравнение, которое наряду с детерминированными содержит и случайные силы. Случайными могут быть также и любые параметры дифференциального уравнения. По решению этих уравнений можно определить статистические характеристики броуновского движения.

Имеется, однако, и альтернативный способ описания броуновского движения. Он основан на решении кинетического уравнения для функции распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ броуновских частиц в шестимерном фазовом пространстве \mathbf{r}, \mathbf{v} . Это уравнение аналогично кинетическому уравнению Больцмана для разреженного газа. В теории броуновского движения кинетическое уравнение носит название уравнения Фоккера–Планка или уравнения Крамерса. Первое название более принято в литературе.

При использовании кинетического метода описания броуновского движения необходимо ввести ансамбль невзаимодействующих броуновских частиц — соответствующий ансамбль Гиббса. При этом мы отказываемся от возможности слежения за отдельными частицами, а исследуем распределение ансамбля невзаимодействующих броуновских частиц в шестимерном пространстве. Тем самым, используем снова представление о "сплошной среде", но теперь из броуновских частиц. Можно провести аналогию с гидродинамикой. Тогда метод Ланжевена будет соответствовать методу Лагранжа, а кинетический — методу Эйлера.

Уравнение Фоккера–Планка может быть установлено различными способами, в частности, как мы увидим, на основе уравнений Ланжевена. Например, кинетическое уравнение, отвечающее уравнениям (2.2), имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{1}{M} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = D \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{v}^2} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} (\gamma \mathbf{v} f) = I_{\text{F-P}}. \quad (2.6)$$

По сделанному допущению между броуновскими частицами и средой возможно установление равновесного состояния. Тогда функция распределения релаксирует к распределению Максвелла–Больцмана:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = C \exp \left[- \frac{(M\mathbf{v}^2/2) + U(\mathbf{r})}{kT} \right], \quad \int f d\mathbf{r} d\mathbf{v} = 1. \quad (2.7)$$

Подстановка этого распределения в уравнение Фоккера–Планка и приводит к соотношению Эйнштейна (2.5).

3. Броуновское движение в среде с нелинейным трением. Три формы уравнений Ланжевена и Фоккера–Планка

Рассмотрим теперь случай, когда коэффициент трения зависит от скорости:

$$\gamma(\mathbf{v}) = \gamma(-\mathbf{v});$$

например,

$$\gamma(\mathbf{v}) = \gamma(1 + b\mathbf{v}^3). \quad (3.1)$$

В этом случае уравнения Ланжевена усложняются. Прежде всего интенсивность шума также должна зависеть от скорости. Это есть следствие флуктуационно-диссипационного соотношения при нелинейном трении: $D = D(\mathbf{v})$. Благодаря этой зависимости появляется и дополнительная сила, пропорциональная производной от функции $D(\mathbf{v})$. Необходимость ее введения следует из приведенных ниже уравнений Фоккера–Планка. С учетом этого уравнения Ланжевена принимают теперь вид:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}, \quad \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \gamma(\mathbf{v})\mathbf{v} + \frac{1}{M} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} + a \frac{\partial D}{\partial \mathbf{v}} = \sqrt{D(\mathbf{v})} \mathbf{y}(t). \quad (3.2)$$

Здесь в силе Ланжевена уже выделена интенсивность случайного источника, поэтому моменты источника $y(t)$ определяются равенствами:

$$\langle y(t) \rangle = 0, \quad \langle y_i(t) y_j(t') \rangle = 2\delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (3.3)$$

Уравнения Ланжевена снова являются незамкнутыми и в большей мере, чем раньше. Теперь неопределенной является функция $D(\mathbf{v})$ и в дополнение к этому еще и коэффициент a перед производной от функции $D(\mathbf{v})$. Для однозначного их определения будут использованы два условия. Это прежде всего существование равновесия между броуновскими частицами и средой. Это условие приводит, однако, к дифференциальной связи между функциями $D(\mathbf{v})$ и $\gamma(\mathbf{v})$. Лишь при определенном выборе коэффициента a эта связь становится алгебраической в соответствии с принятой формой ФДС. Таким образом, второе условие — сохранение формы ФДС. Это приводит к обобщенной формуле Эйнштейна для броуновского движения с нелинейным трением:

$$D(\mathbf{v}) = \gamma(\mathbf{v}) \frac{kT}{M}. \quad (3.4)$$

Соображения, которые привели нас к обобщенному соотношению Эйнштейна, с точки зрения кинетической теории представляются настолько естественными, что альтернативные возможности даже и не обсуждаются [4, 9]. Это соотношение естественным образом следует,

в частности, из уравнений Больцмана для смеси тяжелых и легких частиц (см. ниже), а также из кинетического уравнения Ландау или Балеску–Ленарда для плазмы. Действительно, соотношение Эйнштейна вида (3.4) является прямым следствием этих уравнений для равновесного состояния. Проблемы возникают, однако, когда исходными для описания нелинейного броуновского движения служат не кинетические, а стохастические уравнения — уравнения Ланжевена.

Тогда в зависимости от математической трактовки интегралов, содержащих δ -коррелированные источники Ланжевена, возможны разные способы описания стохастических процессов в системах с одним и тем же нелинейным трением. При этом наиболее характерными являются три разных формы записи как уравнений Ланжевена, так и соответствующих уравнений Фоккера–Планка. Одна из них соответствует трактовке математика Ито (I-form), вторая — трактовке Стратоновича (S-form). Третья является естественным следствием кинетической теории (K-form) [11–15, 17–19].

Чтобы показать отличие этих трех форм на примере броуновского движения при нелинейном трении, осуществим переход от уравнений Ланжевена (3.2) к соответствующему кинетическому уравнению — уравнению Фоккера–Планка для функции распределения $f(r, v, t)$. Будем при этом следовать методу, который широко используется при выводе кинетических уравнений для газов и плазмы [9].

Введем, как и в кинетической теории газа, микроскопическую фазовую плотность в 6 -мерном пространстве \mathbf{r}, \mathbf{v} :

$$N(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \sum_{1 \leq i \leq N} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i(t)). \quad (3.5)$$

Отличие состоит в следующем. В кинетической теории газов и плазмы функции $\mathbf{r}_i(t), \mathbf{v}_i(t)$ удовлетворяют обратимым уравнениям движения для атомов или заряженных частиц плазмы. Теперь же эти функции являются случайными функциями, удовлетворяющими диссипативным и, в общем случае, нелинейным уравнениям Ланжевена (3.2). Есть и еще одно отличие — броуновские частицы не взаимодействуют друг с другом.

Поскольку среда броуновских частиц представляет собой "идеальный газ", то вместо фазовой плотности (3.5) можно использовать одночастичное динамическое распределение:

$$f^{(d)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}(t)) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}(t)), \quad \int f^{(d)} \mathbf{dr} \mathbf{dv} = 1. \quad (3.6)$$

Функции $r(t), v(t)$, удовлетворяют уравнениям Ланжевена (3.2). С учетом этого уравнение для динамического распределения может быть записано в виде уравнения непрерывности:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f^{(d)}}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f^{(d)}}{\partial \mathbf{r}} - \frac{1}{M} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f^{(d)}}{\partial \mathbf{v}} = \\ = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left[\left(\gamma(\mathbf{v}) \mathbf{v} + a \frac{\partial D}{\partial \mathbf{v}} \right) f^{(d)} \right] - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(\sqrt{D(\mathbf{v})} \mathbf{y}(t) f^{(d)} \right). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Искомое статистическое распределение является первым моментом:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \langle f^{(d)} \rangle \text{ и флуктуация } \delta f = f^{(d)} - f. \quad (3.8)$$

Уравнение для функции распределения f следует из уравнения (3.7) после усреднения по ансамблю Гиббса и имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{1}{M} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \\ = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left[\left(\gamma(\mathbf{v}) \mathbf{v} + a \frac{\partial D}{\partial \mathbf{v}} \right) f \right] - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(\sqrt{D(\mathbf{v})} \langle \mathbf{y}(t) \delta f \rangle \right). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Это уравнение не является замкнутым, так как в него наряду с функцией распределения f входит и коррелятор $\langle \mathbf{y}(t) \delta f \rangle$. Здесь учтено, что среднее значение $\langle \mathbf{y}(t) \rangle$ равно нулю.

Чтобы получить замкнутое уравнение, надо, как и в кинетической теории газа, выразить неизвестный коррелятор через распределение f . Эта задача более простая, чем вывод кинетического уравнения Больцмана, так как исходными являются не обратимые уравнения Гамильтона, а диссипативные уравнения Ланжевена. Расчет коррелятора проводим следующим образом [9, 10, 17].

С помощью уравнений для функций $f^{(d)}, f$ находим уравнение для флуктуации δf . При вычислении коррелятора $\langle \mathbf{y}(t) \delta f \rangle$ достаточно знать решение уравнения для функции δf лишь на малых временах порядка τ^L . По этой причине в уравнении для функции δf достаточно оставить лишь член с δ -коррелированным источником $\mathbf{y}(t)$. В результате уравнение для флуктуации функции распределения принимает вид:

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(\sqrt{D(\mathbf{v})} \mathbf{y}(t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \right). \quad (3.10)$$

Из него следует искомое решение:

$$\delta f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(\sqrt{D(\mathbf{v})} \int_0^\infty \mathbf{y}(t - \tau) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t - \tau) \mathbf{d}\tau \right). \quad (3.11)$$

Подставим это решение в последний член уравнения (3.9). С учетом структуры коррелятора $\langle y_i(t) y_j(t') \rangle$ получаем равенство:

$$\begin{aligned} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(\sqrt{D(\mathbf{v})} \langle \mathbf{y} \delta f \rangle \right) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \sqrt{D(\mathbf{v})} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(\sqrt{D(\mathbf{v})} f \right) = \\ = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(D(\mathbf{v}) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(\frac{1}{2} \frac{\partial D}{\partial \mathbf{v}} f \right). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Подставим его в правую часть (3.9). В результате получаем замкнутое кинетическое уравнение — уравнение Фоккера–Планка [17–19]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \\ = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(D(\mathbf{v}) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left\{ \left[\gamma(\mathbf{v}) \mathbf{v} + \left(a + \frac{1}{2} \right) \frac{\partial D}{\partial \mathbf{v}} \right] f \right\}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Оно, как и исходные уравнения Ланжевена, не является еще полностью замкнутым, так как содержит неопределенную функцию $D(v)$ и коэффициент a . Чтобы продви-

нуться дальше, используем снова условие существования статистического равновесия между броуновскими частицами и окружающей средой.

При этом условии уравнение Фоккера–Планка в равновесном состоянии должно иметь решение в виде распределения Максвелла–Больцмана (2.7). Подстановка этого распределения в уравнение (3.13) для равновесного состояния приводит к следующему уравнению:

$$D(\mathbf{v}) = \left[\left(a + \frac{1}{2} \right) \frac{\mathbf{v}}{v^2} \frac{\partial D(v)}{\partial \mathbf{v}} + \gamma(\mathbf{v}) \right] \frac{kT}{M}. \quad (3.14)$$

Оно связывает интенсивность источника $D(v)$ с нелинейным диссипативным коэффициентом $\gamma(v)$, но содержит не определенный пока еще коэффициент a .

Заметим, что это уравнение при заданном коэффициенте нелинейного трения можно рассматривать как дифференциальное уравнение относительно интенсивности случайного источника $D(v)$, т.е. как дифференциальное флуктуационно-диссипационное соотношение. Однако из статистической теории следует, что такая связь не является дифференциальной — флуктуационный фактор пропорционален диссипативному фактору. Это означает, что для рассматриваемого случая оно должно сводиться к обобщенному соотношению Эйнштейна (3.4). Это и определяет выбор коэффициента в уравнениях Фоккера–Планка и Ланжевена: $a = -1/2$. В результате для броуновского движения при нелинейном трении приходим к "кинетической форме" уравнения Фоккера–Планка [17–19]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{1}{M} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(D(\mathbf{v}) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(\gamma(\mathbf{v}) \mathbf{v} f \right). \quad (3.15)$$

Запишем и соответствующие уравнения Ланжевена:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}, \quad \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \gamma(\mathbf{v})\mathbf{v} + \frac{1}{M} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} - \frac{1}{2} \frac{\partial D}{\partial \mathbf{v}} = \sqrt{D(\mathbf{v})} \mathbf{y}(t). \quad (3.16)$$

Подведем итоги.

Мы видим, что, хотя уравнение Ланжевена по диссипации является нелинейным, кинетическое уравнение Фоккера–Планка линейно относительно функции распределения. Нелинейность среды в кинетическом уравнении проявляется через зависимость коэффициентов $D(\mathbf{v})$, $\gamma(\mathbf{v})$ от скорости.

Наряду с "кинетической формой" записи уравнения Фоккера–Планка в виде (3.15) в литературе широко используются и другие представления уравнений Ланжевена и соответствующих им уравнений Фоккера–Планка. Из них наибольшее значение имеют представления Ито (I-form) и Стратоновича (S-form). "Кинетическую форму" можно кратко назвать "K-form".

Представления Ито и Стратоновича основаны на разной трактовке стохастических интегралов, возникающих при решении соответствующих нелинейных стохастических уравнений — уравнений Ланжевена [11–15, 17–19]. Эти представления, хотя они и основываются на одинаковых по форме стохастических уравнениях (здесь на уравнениях (3.2) при $a = 0$), но приводят к отличным по форме уравнениям Фоккера–Планка:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{1}{M} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}^2} \left(D(\mathbf{v}) f \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(\gamma(\mathbf{v}) \mathbf{v} f \right) = 0 \quad (3.17)$$

в представлении Ито и

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{1}{M} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left[\sqrt{D(\mathbf{v})} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(\sqrt{D(\mathbf{v})} f \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(\gamma(\mathbf{v}) \mathbf{v} f \right) = 0 \quad (3.18)$$

в представлении Стратоновича.

Сопоставим три приведенных уравнения Фоккера–Планка с уравнением (3.13) при неопределенном значении параметра a . Форма Ито отвечает значению $a = 1/2$, форма Стратоновича — значению $a = 0$ и, наконец, "кинетическая форма" — значению $a = -1/2$. Только в последнем случае уравнение (3.14) совпадает с обобщенным соотношением Эйнштейна.

Заметим также, что формально уравнение (3.14) можно привести к форме соотношения Эйнштейна (3.4), если ввести эффективный коэффициент трения:

$$D(\mathbf{v}) = \gamma_{\text{eff}} \frac{kT}{M}, \quad \gamma_{\text{eff}} = \gamma(\mathbf{v}) + \left(a + \frac{1}{2} \right) \frac{\mathbf{v}}{v^2} \frac{\partial D(v)}{\partial \mathbf{v}}. \quad (3.19)$$

Используя это обозначение, можно привести к "кинетической форме" и общее уравнение Фоккера–Планка (3.13).

Это, однако, лишь формальный нефизический прием. Остается вопрос: "Почему нелинейной динамической системе с заданным диссипативным коэффициентом отвечают три разных уравнения Фоккера–Планка?" В такой ситуации с неизбежностью возникает необходимость выбора.

Различие трех уравнений Фоккера–Планка приводит и к трем различным формам распределения для стационарного состояния:

$$f(\mathbf{v}) = \frac{C}{(D(\mathbf{v}))^v} \exp \left(- \int_0^v \frac{\gamma(\mathbf{v}')}{D(\mathbf{v}')} d\mathbf{v}'^2 \right), \quad \int f(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = 1. \quad (3.20)$$

Здесь $v = 1$ для представления Ито, $v = 1/2$ для представления Стратоновича и, наконец, $v = 0$ для "кинетического" представления. Только в последнем случае стационарное решение определяется отношением флуктуационного и диссипативного факторов, что отвечает общей структуре флуктуационно-диссипационных соотношений.

Вернемся к уравнению Ланжевена (3.2) при произвольном значении параметра a . Сила Ланжевена зависит от \mathbf{v} , поэтому ее среднее значение отлично от нуля. Коррелятор определяем описанным выше способом. В результате получаем выражение

$$\left\langle \sqrt{D(\mathbf{v})} \mathbf{y}(t) \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial D(\mathbf{v})}{\partial \mathbf{v}} \right\rangle. \quad (3.21)$$

Мы видим, что оно не зависит от значения a .

Остается подтвердить физическими примерами выбор уравнения Фоккера–Планка в "кинетической форме" (3.15). Это мы и сделаем в следующем разделе. Вопрос об обратном переходе от уравнения Фоккера–Планка к уравнению Ланжевена также является весьма существенным [5]. С точки зрения статистической теории

в большей мере обоснованными — первичными, являются именно кинетические уравнения.

4. Уравнение Фоккера–Планка для газа Больцмана

Рассмотрим разреженный газ, в котором имеется примесь тяжелых атомов. Тяжелые атомы играют роль броуновских частиц в среде из атомов основного газа. Обозначим через $f_n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ функцию распределения атомов примеси и найдем соответствующее кинетическое уравнение.

Исходной служит система уравнений Больцмана для функций распределения легких и тяжелых атомов. Будем предполагать, что концентрация тяжелых атомов настолько мала, что столкновения между ними несущественны. В интеграле столкновений тяжелых и легких частиц проводим разложение по малому параметру: $|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|/Mv_T$ — по отношению изменения импульса легкой частицы к импульсу атома примеси. В результате приходим к уравнению Фоккера–Планка:

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_n}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \frac{\partial f_n}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial}{\partial p_i} \left(D_{ij}(\mathbf{p}) \frac{\partial f_n}{\partial p_j} \right) + \frac{\partial}{\partial p_i} \left(A_i(\mathbf{p}) f_n \right). \quad (4.1)$$

По структуре оно соответствует уравнению (3.15). Теперь, однако, диффузия характеризуется тензором $D_{ij}(\mathbf{p})$, а диссипация — вектором $A_i(\mathbf{p})$.

Возможны две формы записи выражений для этих функций.

1. Тензор диффузии и диссипативный вектор выражаются непосредственно через функцию распределения газа легких частиц, которая удовлетворяет соответствующему уравнению Больцмана.

2. Можно воспользоваться флуктуационным представлением интеграла столкновений Больцмана [9, 17] и выразить тензор диффузии через спектральную плотность флуктуаций "потенциала рассеяния" δU , а коэффициент трения через мнимую часть соответствующей восприимчивости α :

$$D_{ij}(\mathbf{p}) = \frac{1}{16\pi^3} \int \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}) (\delta U \delta U)_{\omega, \mathbf{k}, \mathbf{p}} k_i k_j d\omega d\mathbf{k}, \quad (4.2)$$

$$A_i(\mathbf{p}) = \frac{1}{8\pi^3} \int \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}) k_i \text{Im} \alpha(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{p}) d\omega d\mathbf{k}. \quad (4.3)$$

Обе функции под интегралами выражаются в свою очередь через функцию распределения легких частиц, которая определяется уравнением Больцмана. В равновесном состоянии, когда решением уравнения Больцмана является распределение Максвелла, эти функции связаны флуктуационно-диссипационным соотношением:

$$(\delta U \delta U)_{\omega, \mathbf{k}, \mathbf{p}} = \frac{2}{\omega} \text{Im} \alpha(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{p}) k T. \quad (4.4)$$

С учетом этого соотношения убеждаемся, что функции $D_{ij}(\mathbf{p})$, $A_i(\mathbf{p})$ связаны формулой Эйнштейна:

$$\frac{v_i D_{ij} v_j}{v^2} = D(\mathbf{v}) = \gamma(\mathbf{v}) k T, \quad \gamma(\mathbf{v}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}) \frac{\mathbf{k}\mathbf{v}}{v^2} \text{Im} \alpha(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{p}) d\omega d\mathbf{k}. \quad (4.5)$$

Конкретный вид зависимости коэффициента трения от скорости через функцию $\alpha(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{p})$ зависит от потенциала взаимодействия частиц газа.

Отметим еще раз, что коэффициент диффузии и интенсивность соответствующей силы Ланжевена отражает наличие атомарной структуры среды. Атомарная структура — источник неустраняемого — "естественного" шума. Наряду с ним возможны и различного типа внешние шумы, которые по интенсивности могут быть и значительно большими естественного шума. Тем не менее даже малые естественные источники играют существенную роль. В этом мы убедимся на конкретных примерах. Интенсивность естественного шума существенно возрастает при приближении к различного рода критическим точкам, при переходе через которые меняется состояние системы — происходит равновесный или неравновесный фазовый переход. Рост флуктуаций является предвестником наступающей перестройки.

5. Уравнение Смолуховского. Управляющее уравнение (master equation)

Наряду с уравнением Фоккера–Планка в теории броуновского движения широко используются и другие формы кинетических уравнений. Это прежде всего уравнение Смолуховского (или Чепмена–Колмогорова). Оно представляет собой условие согласования функций распределения разных порядков.

Обозначим через x произвольный набор переменных, а через $f(x, t)$, $f(x, t, x', t')$ — функции распределения, соответственно, в данный момент времени и в два последовательных момента времени t, t' . Используем два тождества

$$\begin{aligned} f(x, t) &= \int f(x, t, x', t') dx' \equiv \\ &\equiv \int f(x, t | x', t') f(x', t') dx', \quad \int f(x, t) dx = 1. \end{aligned} \quad (5.1)$$

Первое из них выражает условие согласования, а второе вводит определение условной функции распределения, относящееся к двум моментам времени. Ее принято называть *вероятностью перехода*. Введем для нее специальное обозначение и используем условие нормировки:

$$\begin{aligned} f(x, t | x', t') &\equiv p(x, t, x', t'), \\ \int f(x, t | x', t') dx &= \int p(x, t, x', t') dx = 1. \end{aligned}$$

Тогда равенство (5.1) можно представить в виде

$$f(x, t) = \int p(x, t, x', t') f(x', t') dx', \quad p(x, t, x', t') > 0. \quad (5.2)$$

Путем подстановки в правую часть значения функции $f(x', t')$ через распределение $f(x_0, t_0)$ в более ранний момент получаем интегральное соотношение, включающее промежуточную точку x' :

$$f(x, t) = \int p(x, t, x', t') p(x', t', x_0, t_0) f(x_0, t_0) dx' dx_0. \quad (5.3)$$

С его помощью можно получить замкнутое уравнение для вероятностей перехода. Для этого в левой части (5.3)

используем равенство (5.2) при $x', t' \rightarrow x_0, t_0$. Поскольку полученное таким образом равенство справедливо при произвольном распределении $f(x_0, t_0)$, то мы можем приравнять подынтегральные выражения. В результате и приходим к уравнению Смолуховского:

$$p(x, t, x_0, t_0) = \int p(x, t, x', t') p(x', t', x_0, t_0) dx'. \quad (5.4)$$

Чтобы вернуться от него к равенству (5.3), надо умножить обе части на $f(x_0, t_0)$ и выполнить интегрирование по x_0 . В свою очередь возможен переход от равенства (5.3) к (5.2) и (5.1).

Таким образом, приведенные соотношения являются точными, так как при переходах от одного к другому не делались какие-либо упрощения. В частности, интегральное соотношение (5.2) связывает функции распределения $f(x, t)$, $f(x', t')$ через вероятность перехода. Однако это еще не кинетическое уравнение, так как вероятность перехода неизвестна. Можно лишь утверждать, что она удовлетворяет уравнению Смолуховского (5.4) и условию нормировки. Для получения замкнутого кинетического уравнения необходима, естественно, дополнительная информация о системе. Каковы же следующие шаги?

Прежде всего перейдем от точного соотношения (5.2) к более простому, так называемому управляющему уравнению. (В английской литературе используется термин "master equation".) Для этого сделаем предположение о наличии двух масштабов времени: "быстрого" и "медленного". Наличие разных масштабов времени использовалось при записи уравнений Ланжевена.

Предположим, что функция распределения $f(x, t)$ медленно меняется со временем. Как и раньше, характерное время релаксации обозначим через τ_{rel} . Характерное время корреляции для быстрого процесса обозначим через τ_{cor} . Пусть также вероятность перехода явно зависит лишь от быстрого времени и на соответствующих малых интервалах в нулевом приближении по отношению к времени τ_{cor}/τ_{rel} процесс можно считать стационарным.

С учетом этого уравнение (5.2) при замене временных аргументов t, t' на $t + \Delta t$, $t(\Delta t = t - t')$ можно записать в виде

$$f(x, t + \Delta t) = \int p(x, x', \Delta t) f(x', t) dx'. \quad (5.5)$$

Проведем в левой части разложение по Δt и удержим два первых члена. Предположим, что существует предел

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} p(x, x', \Delta t) = W(x, x'), \quad (5.6)$$

определяющий скорость изменения вероятности перехода. Примем также во внимание свойства вероятности перехода:

$$\int p(x', t', x, t) dx' = 1, \quad p(x', x, \Delta t) = \Delta t W(x', x). \quad (5.7)$$

Первое из них есть следствие условия нормировки функций распределения $f(x, t)$, $f(x', t')$ в уравнении (5.1). Во втором равенстве использовано существование предела (5.6) и оставлен лишь основной член разложения по Δt . С учетом этих свойств проводим преобразование пер-

вого члена, который возникает при разложении по Δt в левой части уравнения (5.5):

$$f(x, t) = \int p(x', x, \Delta t) dx' f(x', t) = \Delta t \cdot \int W(x', x) dx' f(x', t). \quad (5.8)$$

Наконец, с учетом равенств (5.6), (5.8) переходим от уравнения (5.5) к искомому "управляющему уравнению":

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = \int (W(x, x') f(x', t) - W(x', x) f(x, t)) dx', \quad W(x, x') > 0. \quad (5.9)$$

Это уравнение также еще не является замкнутым, поскольку структура функций W пока еще не определена. Заметим, что к такой форме могут быть приведены многие из известных кинетических уравнений статистической теории неравновесных процессов, в частности, и уравнение Больцмана. При этом, однако, управляющее уравнение является нелинейным. Это проявляется в том, что вероятности W сами зависят от функции распределения $f(x, t)$. Для пространственно однородного газа Больцмана переменная $x = p$ и является вектором.

Итак, мы сделали первый шаг на пути конкретизации уравнения (5.2). Это оказалось возможным благодаря упрощающему предположению о наличии двух масштабов времени и стационарности процесса на малых временах. В результате вероятность перехода $p(x, t, x', t')$ заменяется более простыми функциями $W(x, x')$, $W(x', x)$, которые не зависят явно от времени. Полученное таким путем кинетическое уравнение, благодаря исключению мелкомасштабных корреляций, становится необратимым. Мы убедимся в этом при анализе соответствующего уравнения баланса энтропии.

6. Два способа перехода от управляющего уравнения к уравнению Фоккера–Планка

Для дальнейшего удобно использовать вместо (5.9) другую форму управляющего уравнения. Для этого представим вероятность перехода в виде суммы симметричной и антисимметричной частей:

$$W(x', x) = W^s(x, x') + W^a(x, x'), \quad (6.1)$$

$$W^s(x, x') = W^s(x', x), \quad W^a(x, x') = -W^a(x', x).$$

С учетом этого запишем уравнение (5.9) в виде

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = \int [W^s(x, x') (f(x', t) - f(x, t)) - W^a(x, x') (f(x', t) + f(x, t))] dx'. \quad (6.2)$$

К такому виду могут быть приведены все основные кинетические уравнения — уравнение Больцмана, кинетические уравнения для плазмы и для системы атомов, взаимодействующих с электромагнитным полем. В этих случаях, однако, управляющие уравнения являются нелинейными — вероятности перехода сами зависят от функций распределения. Переход к линейным уравнениям возможен лишь для броуновского движения, когда взаимодействием между броуновскими частицами можно пренебречь, а статистические свойства окружающей среды заданы.

Из уравнения (6.2) следует, что в стационарном состоянии вероятности перехода W^s , W^a связаны соотношением

$$W^s(x, x') = W^a(x, x') \frac{f^{(st)}(x') + f^{(st)}(x)}{f^{(st)}(x') - f^{(st)}(x)}, \quad (6.3)$$

которое представляет собой флуктуационно-диссипационное соотношение. Это будет сейчас подтверждено тем, что симметричная функция $W^s(x, x')$ в соответствующем уравнении Фоккера–Планка определяет коэффициент диффузии, а функция $W^a(x, x')$ — коэффициент трения.

Осуществим переход от управляющего уравнения (6.2) к уравнению Фоккера–Планка. Мы увидим, что такой переход не является однозначным и может приводить к различным формам искомого уравнения.

6.1. Кинетическая форма уравнения Фоккера–Планка

Осуществим переход следующим образом. Введем вместо x, x' новые переменные $\Delta x, x$:

$$W^{s,a}(x, x') = W^{s,a}\left(x - x', \frac{x + x'}{2}\right) = W^{s,a}\left(\Delta x, x - \frac{\Delta x}{2}\right), \quad \Delta x = x - x' \quad (6.4)$$

и перепишем соответствующим образом управляющее уравнение

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = \int [W_{\Delta x, x - (\Delta x/2)}^s (f(x - \Delta x, t) - f(x, t)) - W_{\Delta x, x - (\Delta x/2)}^a (f(x - \Delta x, t) + f(x, t))] d\Delta x. \quad (6.5)$$

Предположим (!), что $\Delta x \ll x$, но зависимость функций $W^{s,a}$ от первого аргумента Δx не является слабой. Рассмотрим для простоты одномерный случай, когда величина x — скаляр, и произведем разложение по малым изменениям $\Delta x \partial/\partial x$. С учетом равенств

$$\int W_{\Delta x, x}^s \Delta x d\Delta x = 0, \quad \int W_{\Delta x, x}^a d\Delta x = 0 \quad (6.6)$$

преобразуем первый и второй члены уравнения (6.5) к виду

$$\frac{1}{2} \int (\Delta x)^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(W_{\Delta x, x}^s \frac{\partial f}{\partial x} \right) d\Delta x = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial f}{\partial x} \right), \quad \int \Delta x \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(W_{\Delta x, x}^a f \right) d\Delta x = \frac{\partial}{\partial x} (A(x)f). \quad (6.7)$$

Мы использовали здесь обозначения для коэффициента диффузии и трения

$$D(x) = \frac{1}{2} \int (\Delta x)^2 W_{\Delta x, x}^s d\Delta x, \quad A(x) = \int \Delta x \cdot W_{\Delta x, x}^a d\Delta x. \quad (6.8)$$

В результате приходим к кинетической форме уравнения Фоккера–Планка

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial f}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} (A(x)f). \quad (6.9)$$

Чтобы получить соответствующие уравнения в форме Ито и Стратоновича, аналогичные уравнениям (3.17),

(3.18), в уравнении (6.9) надо произвести следующую замену:

$$A(x) \rightarrow A(x) + \left(a + \frac{1}{2}\right) \frac{dD(x)}{dx}, \quad (6.10)$$

означающую переопределение либо коэффициента диффузии, либо коэффициента трения. Значения $a = 1/2$ отвечает представлению Ито, а значение $a = 0$ — представлению Стратоновича.

Таким образом, только при кинетической форме записи уравнения Фоккера–Планка коэффициенты диффузии и трения выражаются полностью, соответственно, через четную и нечетную части вероятности перехода. Это еще один аргумент в пользу К-формы кинетического уравнения.

Как же получить на основе одного управляющего уравнения различные формы уравнения Фоккера–Планка? Вернемся для этого к исходному уравнению (5.9). Введем теперь новые переменные менее симметричным образом, чем в (6.4) [11]: $x, x' \rightarrow x' - x, x' = \Delta x, x + \Delta x$ ($\Delta x = x' - x$). Таким образом, первым аргументом теперь является разность второго и первого аргументов. Второй аргумент остается прежним. Соответствующим образом преобразуются вероятности перехода:

$$W(x, x') \rightarrow W(x' - x, x') = W(\Delta x, x + \Delta x), \quad W(x', x) \rightarrow W(-\Delta x, x). \quad (6.11)$$

В результате управляющее уравнение (5.9) принимает вид

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = \int \left(W(\Delta x, x + \Delta x) f(x + \Delta x, t) - W(-\Delta x, x) f(x, t) \right) d\Delta x. \quad (6.12)$$

Члены нулевого порядка сокращаются в силу равенства

$$\int W(\Delta x, x) d\Delta x = \int W(-\Delta x, x) d\Delta x. \quad (6.13)$$

Чтобы убедиться в его справедливости, полезно использовать представление вероятности перехода в виде (6.1).

В результате приходим к уравнению Фоккера–Планка в форме Ито

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(D(x) f(x, t) \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(A(x) f \right). \quad (6.14)$$

Здесь введены обозначения для коэффициентов диффузии и трения

$$D(x) = \frac{1}{2} \int (\Delta x)^2 W(\Delta x, x) d\Delta x, \quad A(x) = \int \Delta x W(\Delta x, x) d\Delta x. \quad (6.15)$$

Эти выражения близки по форме к (6.8).

Мы видим, что разные способы разложения по Δx приводят к разным формам уравнения Фоккера–Планка. Для выбора одной из них необходимы дополнительные физические аргументы. Об этом шла уже речь в разделе 3. Теперь мы продолжим обсуждение этого вопроса.

6.2. Стационарное решение уравнения Фоккера–Планка

Выше было отмечено, что путем замены (6.10) можно получить из (6.9) все три формы уравнения Фоккера–Планка. Для одномерного случая общее стационарное решение этих уравнений можно записать в виде

$$f(x) = \frac{C}{(D(x))^{v/2}} \exp\left(-\int_0^x \frac{A(x')}{D(x')} dx'\right), \quad \int f dx = 1 \quad (6.16)$$

при значении параметра $v = 2$ для I-формы, $v = 1$ для S-формы и, наконец, $v = 0$ для кинетической формы уравнения Фоккера–Планка. Заметим, что в последнем случае структура распределения наиболее проста — она полностью определяется отношением флуктуационного $D(x)$ и диссипативного $A(x)$ факторов.

Напомним, что выше было рассмотрено стационарное решение уравнения Фоккера–Планка для броуновского движения при нелинейном трении. Оно определяется формулой (3.20). Для равновесного состояния коэффициенты $D(v)$, $\gamma(v)$ связаны соотношением Эйнштейна (3.4) и мы приходим к распределению Максвелла. При использовании управляющего уравнения (5.9) (или (6.2)) ситуация в общем случае более сложная.

Управляющие уравнения используются не только для систем в термостате, когда броуновские частицы совершают движение в среде, находящейся в равновесном состоянии. Они описывают релаксационные процессы и в более сложных ситуациях, когда "окружающая среда" находится в стационарном, но неравновесном состоянии. По этой причине нет, казалось бы, оснований в общем случае апеллировать к соотношению Эйнштейна. И все же это возможно и, более того, необходимо.

Предположим снова, что обобщенная координата x в управляющем уравнении играет роль скорости "броуновской частицы". Пусть, например, через эту скорость выражается электрический ток в автоколебательной системе — в генераторе Ван-дер-Поля. Тогда коэффициенты диффузии и трения $D(v)$, $A(v)$ зависят от величины коэффициента обратной связи a_f . (Индекс "f" от английского слова feedback — обратная связь.) Из-за наличия обратной связи стационарное состояние и отличается от равновесного. Из (6.16) для него следует выражение

$$f(v, a_f) = \frac{C}{(D(v, a_f))^{v/2}} \exp\left(-\int_0^v \frac{A(v', a_f)}{D(v', a_f)} dv'\right), \quad \int f dv = 1. \quad (6.17)$$

Здесь снова трем формам уравнения Фоккера–Планка отвечают приведенные выше значения параметра v .

Естественно наложить условие, что при отсутствии обратной связи (при $a_f = 0$) стационарное состояние совпадает с равновесным. При этом коэффициенты диффузии и трения

$$D(v, a_f = 0) = D(v), \quad A(v, a_f = 0) = A(v) \equiv \gamma(v)v \quad (6.18)$$

удовлетворяют соотношению Эйнштейна (3.4), а распределение $f(v)$ совпадает с распределением Максвелла. Из

(6.16) следует, что последнее имеет место лишь при $v = 0$, т.е. только для K-формы уравнения Фоккера–Планка.

Мы снова приходим к выводу, что с точки зрения статистической теории кинетическая форма уравнения Фоккера–Планка является предпочтительной. Эта позиция в последующих разделах будет подтверждена на многих конкретных примерах.

Начнем с анализа управляющего уравнения для системы атомов, взаимодействующих с равновесным электромагнитным полем. Здесь, таким образом, роль броуновских частиц играют атомы, а роль среды — флуктуационное электромагнитное поле.

7. Управляющее уравнение для системы атомов в электромагнитном поле

Кинетическая теория системы атомы — поле в последние годы получила существенное развитие в связи, главным образом, с потребностями квантовой электроники [9, 20–22, 31–34]. Она базируется на классической работе Эйнштейна [35], в которой впервые рассмотрено уравнение баланса неподвижных атомов и равновесного поля и введены коэффициенты индуцированного и спонтанного излучения — коэффициенты Эйнштейна.

Рассмотрим простейший пример, когда атомы неподвижны и их распределение в пространстве является однородным. Тогда состояние атомов характеризуется функцией распределения f_n значений внутренней энергии атома E_n . Таким образом, состояние атомов задается дискретным набором переменных n . Для рассматриваемого случая кинетическое уравнение может быть записано в виде [9, 33]

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} = \sum_m \left[B_m^n \frac{(\delta \mathbf{E} \cdot \delta \mathbf{E})_{\omega_{nm}}}{4\pi^2} (f_m - f_n) - \frac{1}{2} A_m^n (f_m + f_n) \right] = I_n. \quad (7.1)$$

Здесь использованы обозначения для коэффициентов Эйнштейна

$$B_m^n = \frac{4\pi^2 |\mathbf{d}_{nm}|^2}{3\hbar^2}, \quad A_m^n = \frac{4|\mathbf{d}_{nm}|^2}{3\hbar c^3} \omega_{nm}^3 \equiv \gamma_m^n. \quad (7.2)$$

Эти выражения получаются в ходе вывода кинетического уравнения (7.1). Для системы атомов в равновесном электромагнитном поле спектральная плотность флуктуаций электрического поля определяется выражением

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi^2} (\delta \mathbf{E} \delta \mathbf{E})_{\omega} &\equiv \rho_{\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{1}{2} \hbar \omega \coth \frac{\hbar \omega}{2kT} \equiv \\ &\equiv \frac{\omega^2}{\pi^2 \omega^3} kT_{\omega}, \quad \omega = \omega_{nm}. \end{aligned} \quad (7.3)$$

Здесь ρ_{ω} — распределение Планка для средней энергии равновесного электромагнитного излучения с учетом вклада нулевой энергии.

В равновесном состоянии решением кинетического уравнения (7.1) является распределение Гиббса–Больцмана:

$$f_n = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right), \quad Z = \sum_n \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right). \quad (7.4)$$

Существенно, что в "интеграл столкновений" входит спектральная плотность лишь на частотах перехода ω_{nm} . Это отвечает приближению бесконечно узких резонансов, когда спектральная плотность флуктуаций формируется набором бесконечно узких спектральных линий. Смысл такого приближения подробно обсуждается в [17, 36]. Оно отвечает так называемому "бесстолкновительному приближению" при расчете мелко-масштабных флуктуаций, исключение которых и приводит к необратимым кинетическим уравнениям.

Сопоставим кинетическое уравнение (7.1) с управляющим уравнением в форме (6.2). Это позволяет конкретизировать для рассматриваемого случая выражения для вероятностей перехода $W^{s,a}$:

$$W_{nm}^s = B_m^n \frac{(\delta E \delta E)_{\omega_{nm}}}{4\pi^2}, \quad W_{nm}^a = \frac{1}{2} A_m^n \equiv \gamma_m^n. \quad (7.5)$$

С помощью формул (7.2), (7.3), (7.5) находим соотношение между вероятностями перехода W^s , W^a :

$$W_{nm}^s = W_{nm}^a \coth \frac{\hbar \omega_{nm}}{2kT}. \quad (7.6)$$

Это соотношение конкретизирует для системы атомы — поле общее флуктуационно-диссипационное соотношение (ФДС) (6.3), которое справедливо и для неравновесных стационарных состояний. Формула (7.6) представляет собой ФДС для системы атомов в равновесном электромагнитном поле. Оно связывает флуктуационную характеристику W_{nm}^s с диссипативной W_{nm}^a .

Заметим, что под знаком \coth стоит не текущая частота спектра, а частота перехода ω_{nm} . Такая структура квантовых ФДС является согласно [17, 36] типичной для квантовых систем.

Приведем соответствующие выражения для коэффициентов диффузии и трения. Напомним, что в общем случае они определяются формулами (6.8). Перейдем от непрерывных переменных x, x' к соответствующим дискретным переменным n, m и произведем замену переменных, аналогичную проведенной в (6.4). Тогда выражения (7.5) для вероятностей перехода примут вид:

$$W_{n,m}^{s,a} = W_{n-m, (n+m)/2}^{s,a} \equiv W_{\Delta_{nm}, n-\Delta_{nm}/2}^{s,a}, \quad \Delta_{nm} = n - m. \quad (7.7)$$

Предполагаем, как и при использовании непрерывных переменных, что зависимость от аргумента Δ_{nm} является сильной, но в аргументе $n - \Delta_{nm}/2$ возможно разложение по Δ_{nm} . В результате получаем следующие выражения для локальных (зависящих от n) коэффициентов диффузии и трения:

$$D_n = \frac{1}{2} \sum_{\Delta_{nm}} (\Delta_{nm})^2 W_{\Delta_{nm}, n}^s, \quad A_n = \sum_{\Delta_{nm}} \Delta_{nm} W_{\Delta_{nm}, n}^a. \quad (7.8)$$

Они аналогичны приведенным выше формулам (6.8). В следующем разделе эти результаты будут конкретизированы на примере квантового атома-осциллятора.

В заключение настоящего раздела приведем уравнение баланса для средней энергии, которое следует из кинетического уравнения (7.1):

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n f_n(t), \quad (7.9)$$

$$\frac{d\langle E \rangle}{dt} = \sum_{nm} \gamma_m^n (f_m - f_n) \left(kT_{\omega_{nm}} - \frac{1}{2} \hbar \omega_{nm} \frac{f_m + f_n}{f_m - f_n} \right).$$

В равновесном состоянии правая часть уравнения баланса обращается в нуль и средняя энергия определяется формулой Планка.

Итак, для системы атомы — поле удается конкретизировать выражения для вероятностей перехода $W^{s,a}$. Они, как это следует из формул (7.3)–(7.6), выражаются через характеристики атома — матричный элемент дипольного момента d_{nm} , частоту перехода ω_{nm} и температуру поля, т.е. температуру окружающей среды, в которой происходит броуновское движение атомов. Для дальнейшей конкретизации необходимо задать модель атома.

8. Броуновское движение квантовых атомов-осцилляторов

8.1. Управляющее уравнение

Вернемся к кинетическому уравнению (7.1). Представим атом как одномерный квантовый атом-осциллятор. Роль такого "атома-осциллятора", т.е. броуновской частицы, может играть, например, малый, но макроскопический электрический контур. Обозначим собственную частоту осциллятора через ω_0 . Тогда квадрат матричного элемента можно представить в виде

$$|d_{nm}|^2 \rightarrow |x_{nm}|^2 = \frac{\hbar}{m\omega_0} \left(\frac{m}{2} \delta_{m-1,n} + \frac{m+1}{2} \delta_{m+1,n} \right). \quad (8.1)$$

В результате приходим к следующему выражению для "интеграла столкновений" I_n в кинетическом уравнении (7.1):

$$I_n = \gamma(\omega_0) \left\{ \coth \frac{\hbar \omega_0}{2kT} \left[\frac{n+1}{2} (f_{n+1} - f_n) + \frac{n}{2} (f_{n-1} - f_n) \right] - \left[-\frac{n+1}{2} (f_{n+1} + f_n) + \frac{n}{2} (f_{n-1} + f_n) \right] \right\}, \quad \omega_0 = \omega_{n+1,n}. \quad (8.2)$$

Здесь использовано обозначение для коэффициента радиационного трения

$$\gamma(\omega_0) = \frac{2e^2 \omega_0^2}{3mc^3}. \quad (8.3)$$

Теперь мы снова можем записать уравнение баланса для средней энергии

$$\langle E \rangle = \sum_n \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0 f_n. \quad (8.4)$$

Полезны две формы записи уравнения для средней энергии $\langle E \rangle$:

$$\frac{d\langle E \rangle}{dt} = \gamma(\omega_0) (kT_{\omega_0} - \langle E \rangle) \equiv D_{(E)} - \gamma(\omega_0) \langle E \rangle. \quad (8.5)$$

В последнем выражении использовано определение коэффициента диффузии

$$D_{(E)} = \gamma(\omega_0) kT_{\omega_0}, \quad kT_{\omega_0} = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \coth \frac{\hbar \omega_0}{2kT}. \quad (8.6)$$

Индекс (E) отмечает, что $D_{(E)}$ — диффузия по значениям энергии. Эту формулу можно рассматривать как квантовое обобщение классического соотношения Эйнштейна (2.5).

Вернемся теперь к выражениям (7.8), определяющим локальные коэффициенты диффузии и трения в нулевом приближении по относительной разности Δ_{nm}/n . Для квантового атома-осциллятора их можно представить в виде:

$$D_n = \gamma(\omega_0) \frac{1}{2} \coth \frac{\hbar\omega_0}{2kT} n \equiv \frac{D_{(E)}}{\hbar\omega_0} n, \quad A_n = \gamma(\omega_0)n. \quad (8.7)$$

Здесь использованы обозначения (8.3), (8.4) для коэффициентов радиационного трения и диффузии. Мы видим, что локальные коэффициенты диффузии и трения являются линейными функциями переменной n . С помощью формул (8.7) квантовое выражение (8.2) для "интеграла столкновений" можно представить в более удобной для дальнейшего форме:

$$I_n(t) = [D_{n+1}(f_{n+1} - f_n) - D_n(f_n - f_{n-1})] + \frac{1}{2} [A_{n+1}(f_{n+1} + f_n) - A_n(f_n + f_{n-1})]. \quad (8.8)$$

Мы видим, что в правой части имеются два индуцированных вклада. Они пропорциональны соответствующим коэффициентам диффузии. Их знаки определяются относительной заселенностью соседних уровней. Два последних члена пропорциональны соответствующим коэффициентам трения. Первый из них положительный, так как определяет увеличение заселенности за счет перехода с более высокого уровня. Второй, напротив, отрицателен. Он определяет уход на более нижний уровень.

В состоянии равновесия диффузионные и диссипативные вклады попарно компенсируются в силу флуктуационно-диссипационного соотношения (8.6).

Заметим, что для квантового атома-осциллятора матричные элементы определяются выражением (8.1). Из него следует, что в процессе временной эволюции, которая описывается управляющим уравнением (7.1), вероятности перехода по переменной n могут меняться лишь на ± 1 . Такого рода процессы принято называть *одношаговыми*. Таким образом, квантовое кинетическое уравнение (7.1) с "интегралом столкновений" (8.2) или (8.8) является примером управляющего уравнения для одношагового процесса. Поскольку коэффициенты диффузии и трения (8.7) — линейные функции переменной n , то мы имеем здесь дело с *линейным одношаговым процессом*.

Общая структура управляющих уравнений для одношаговых процессов будет рассмотрена в следующем разделе. Мы снова убедимся в неоднозначности записи подобных уравнений. Прежде, однако, покажем, что приведенному здесь управляющему уравнению отвечает каноническая форма уравнения Фоккера–Планка.

8.2. Уравнение Фоккера–Планка

Переход к уравнению Фоккера–Планка производится путем разложения по обратному значению квантового числа $1/n$. Это означает переход от дискретного спектра значений энергии осциллятора к непрерывному спектру.

Поскольку при больших значениях n энергия $E = n\hbar\omega_0$, то приходим к следующему уравнению для распределения энергии:

$$\frac{\partial f(E, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial E} \left(D_{(E)} E \frac{\partial f}{\partial E} \right) + \frac{\partial}{\partial E} (\gamma E f), \quad \int_0^{\infty} f dE = 1. \quad (8.9)$$

Равновесное решение этого уравнения определяется распределением Больцмана, но с квантовой температурой (8.6)

$$f(E) = \frac{1}{kT_{\omega_0}} \exp\left(-\frac{E}{kT_{\omega_0}}\right), \quad \langle E \rangle = kT_{\omega_0}. \quad (8.10)$$

В работах [17, 36] можно найти примеры соответствующих уравнений для электрической цепи. При этом интенсивность э.д.с. определяется формулой

$$\langle E^2 \rangle_{\omega} = 2RkT_{\omega_0}, \quad (8.11)$$

которая в классическом приближении совпадает с известной формулой Найквиста.

9. Управляющие уравнения для одношаговых процессов

9.1. Традиционное определение вероятностей перехода

Вернемся к управляющему уравнению (5.9). Для описания одношаговых процессов введем вместо непрерывной переменной x дискретную переменную n . Соответствующее уравнение имеет вид:

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} = \sum_{n'} (W_{nn'} f_{n'}(t) - W_{n'n} f_n(t)), \quad \sum_{n=0}^{\infty} f_n(t) = 1. \quad (9.1)$$

Для одношаговых процессов традиционно [11, 14] используется следующее выражение для вероятности перехода

$$W_{nn'} = g_{n'} \delta_{n, n'+1} + r_{n'} \delta_{n, n'-1}. \quad (9.2)$$

Предполагается, таким образом, что в ходе одного события происходит либо *возникновение (рождение)* в состоянии n , либо *уход (гибель)* из состояния n . Такая терминология принята в теории популяций. Другая терминология: g_n — *коэффициент генерации*, r_n — *коэффициент рекомбинации* принята, например, в теории полупроводников.

Подстановка выражения (9.2) в (9.1) приводит к уравнению:

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} = g_{n-1} f_{n-1} + r_{n+1} f_{n+1} - (g_n + r_n) f_n, \quad \sum_{n=0}^{\infty} f_n = 1. \quad (9.3)$$

Мы предположили, что переменная n заключена в интервале $0 \leq n \leq \infty$. Тогда уравнение (9.3) следует дополнить "граничными условиями":

$$r_0 = 0, \quad g_{-1} = 0$$

и, следовательно,

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} = r_1 f_1 - g_0 f_0. \quad (9.4)$$

Эти условия указывают, что невозможна убыль (рекомбинация) с нижнего уровня и генерация из состояний с отрицательными значениями n . Комбинациями r_n , g_n определяются локальные коэффициенты диффузии и трения:

$$D_n = \frac{1}{2}(r_n + g_n), \quad A_n = r_n - g_n. \quad (9.5)$$

Управляющее уравнение (9.3) широко используется для описания многих процессов (см., например, в [11, 14]). Это и радиоактивный распад, и дробовой шум, и процессы химической кинетики, и многие системы типа "жертва–хищник" (системы Вольтера). Оно эффективно всегда, когда конкуренция "рождения" и "гибели" или "ионизации" и "рекомбинации" отражает основные черты рассматриваемых явлений. В этих случаях, как правило, основную роль играют неравновесные, хотя, быть может, и стационарные состояния. Понятие же равновесного состояния отходит на второй план. В таких ситуациях введение именно функций g_n , r_n в качестве основных характеристик является вполне оправданным.

Понятие равновесия является, однако, фундаментальным. Именно оно при выключении всех управляющих факторов является устойчивым и наиболее хаотическим состоянием. Естественным выступает поэтому требование, чтобы управляющие уравнения описывали бы, в частности, и процессы эволюции к равновесному состоянию. Можно ожидать, что при этом более подходящими при формулировке уравнений будут не функции g_n и r_n , а связанные с ними формулами (9.5) локальные коэффициенты диффузии и трения. Мы убедились в этом на примере броуновского движения квантовых атомов-осцилляторов в равновесном электромагнитном поле.

В подтверждение сказанного рассмотрим некоторые следствия управляющего уравнения (9.3).

Найдем уравнение для первого момента распределения f_n . Оно получается с помощью управляющего уравнения (9.3) и имеет вид

$$\frac{d\langle n \rangle}{dt} = -(\langle r_n \rangle - \langle g_n \rangle) = -\langle A_n \rangle. \quad (9.6)$$

Таким образом, релаксация первого момента определяется средним значением локального коэффициента трения. Конкретизируем это уравнение для линейного одношагового процесса, когда

$$D_n = Dn, \quad A_n = (r - g)n \equiv \gamma n. \quad (9.7)$$

Уравнение (9.6) принимает в этом случае вид

$$\frac{d\langle n \rangle}{dt} = -\gamma \langle n \rangle. \quad (9.8)$$

Мы видим, что величина $\langle n \rangle$ релаксирует к нулевому значению. Если в качестве примера использовать формулы (9.8) для квантового атома-осциллятора, то для средней энергии получим уравнение:

$$\frac{d\langle E \rangle}{dt} = -\gamma(\omega_0)\langle E \rangle, \quad \gamma(\omega_0) = \frac{2e^2\omega_0^2}{3mc^3}. \quad (9.9)$$

Таким образом, в отличие от уравнения (8.5), которое следует из управляющего уравнения с интегралом столкновений (8.2) (или (8.8)), уравнение (9.9) не описывает релаксацию к равновесию с термостатом.

Этот недостаток управляющего уравнения (9.3) проявляется и в структуре соответствующего уравнения Фоккера–Планка. Действительно, производя разложение по параметру $1/n$, приходим к уравнению Фоккера–Планка в форме Ито

$$\frac{\partial f(n, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial n^2} (D_n f(n, t)) + \frac{\partial}{\partial n} (A_n f(n, t)). \quad (9.10)$$

Отсюда также следует уравнение (9.8). Стационарное решение имеет структуру (6.16) (с $\nu = 2$). Тем самым снова имеет место противоречие с формулой Эйнштейна.

Итак, традиционное определение вероятности перехода для одношаговых процессов (9.2) приводит к ряду следствий, противоречащих основным положениям статистической теории. Возникает вопрос об ином определении вероятности перехода, при котором указанные трудности снимаются. Поиск такого определения и является нашей ближайшей задачей.

9.2. Нетрадиционное определение вероятностей перехода

Используем теперь общее управляющее уравнение в форме (6.2). Определим симметричную и антисимметричную вероятности перехода формулами [19]

$$W_{n'n}^s = D_{n+1}\delta_{n+1,n'} + D_n\delta_{n-1,n'} = W_{n'n}^s, \\ W_{n'n}^a = -\frac{1}{2}(A_{n+1}\delta_{n+1,n'} - A_n\delta_{n-1,n'}) = -W_{n'n}^a. \quad (9.11)$$

Подставим эти выражения в уравнение (6.2). В результате получим иное, чем (9.3), управляющее уравнение для одношаговых процессов. "Интеграл столкновений" в нем определяется теперь выражением (8.8). Локальные коэффициенты диффузии и трения связаны с коэффициентами генерации и рекомбинации прежними формулами (9.5).

Напомним, что для линейного одношагового процесса, когда коэффициенты диффузии и трения определяются формулами (8.7), приходим к кинетическому уравнению для квантовых атомов-осцилляторов в равновесном электромагнитном поле.

Выражение (8.8) для интеграла столкновений имеет ясный физический смысл. Диффузия определяет в нем "индуцированные" переходы. Знак соответствующих членов определяется относительной заселенностью соседних состояний.

Традиционное определение вероятности перехода позволяет определить функции $W_{n'n}^{s,a}$ и выразить их через коэффициенты диффузии и трения. Полученные таким путем выражения не имеют, однако, ясного смысла.

Рассмотрим некоторые свойства нетрадиционного управляющего уравнения для одношаговых процессов. Для равновесного состояния из (8.8) следует соотношение между локальными коэффициентами диффузии и трения — флуктуационно-диссипационное соотношение:

$$D_n = \frac{1}{2} A_n \frac{f_n + f_{n+1}}{f_n - f_{n+1}}. \quad (9.12)$$

Поскольку коэффициенты диффузии и трения положительны, то в состоянии равновесия более высокий уровень

является менее заселенным. В общем случае из уравнения (9.12) нельзя выразить функцию распределения через коэффициенты диффузии и трения. Для линейного одношагового процесса, когда справедливы формулы (8.7), из уравнения (9.12) следует распределение Больцмана:

$$f_n = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_n}{kT_{\omega_0}}\right), \quad \sum_n f_n = 1. \quad (9.13)$$

Распределение по n является, таким образом, экспоненциальным.

Рассмотрим еще следствия полученного в этом разделе управляющего уравнения. Заметим, что уравнение для среднего значения $\langle n \rangle$ отличается от уравнения (9.6) и имеет теперь вид:

$$\frac{d\langle n \rangle}{dt} = \frac{1}{2} [(g_{n+1} - r_{n-1}) - (r_n - g_n)]. \quad (9.14)$$

Чтобы выявить физический смысл этого различия, рассмотрим приближение больших n , когда можно перейти к непрерывной переменной. Оставляя основные вклады, приходим к следующему уравнению:

$$\frac{d\langle n \rangle}{dt} = \left\langle \frac{dD_n}{dn} \right\rangle - (\langle r_n \rangle - \langle g_n \rangle) \equiv \left\langle \frac{dD_n}{dn} \right\rangle - \langle A_n \rangle. \quad (9.15)$$

Мы видим, что по сравнению с уравнением (9.6) теперь появился дополнительный член, который определяется диффузией. Для линейного одношагового процесса, когда коэффициенты диффузии и трения определяются формулами (8.7), из (9.15) следует уравнение баланса средней энергии квантовых атомов-осцилляторов в равновесном электромагнитном поле:

$$\frac{d\langle E \rangle}{dt} = \gamma(\omega_0)(kT_{\omega_0} - \langle E \rangle). \quad (9.16)$$

Оно существенно отличается от уравнения (9.9) тем, что описывает процесс релаксации к равновесному значению средней энергии.

Рассмотрим, наконец, соответствующее уравнение Фоккера–Планка. Оно в отличие от уравнения (9.10) имеет канонический вид:

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial n} \left(D_n \frac{\partial f_n}{\partial n} \right) + \frac{\partial}{\partial n} \left(A_n f_n \right). \quad (9.17)$$

Вследствие этого равновесное решение снова полностью определяется отношением флуктуационного и диссипативного факторов:

$$f_n = C \exp\left(-\int_0^n \frac{A_{n'}}{D_{n'}} dn'\right). \quad (9.18)$$

Для линейного одношагового процесса, когда локальные коэффициенты диффузии и трения определяются формулами (8.7), из уравнения (9.17) следует уравнение Фоккера–Планка (8.9) для функции распределения значений энергии, а из (9.18) следует распределение Больцмана (8.10).

В следующих разделах мы проиллюстрируем различие альтернативных способов описания стохастических процессов на ряде конкретных примеров. Прежде, однако, рассмотрим возможность перехода от уравнения Фоккера–Планка для распределения $f(r, v; t)$ в про-

странстве координат и скоростей к уравнению Эйнштейна–Смолуховского для более простого распределения $f(r, t)$. Эта задача, как мы увидим, в большой мере аналогична задаче перехода от кинетического уравнения к уравнениям газовой динамики. Аналогичны и принципиальные трудности, возникающие при таком переходе [27, 28]. Для их преодоления и в теории броуновского движения оказывается необходимым и возможным переход к описанию неравновесных процессов на основе обобщенных кинетических уравнений. Он особенно эффективен при описании броуновского движения в нелинейных активных средах.

Использование обобщенных кинетических уравнений позволяет, в частности, установить область применимости уравнений реакционно-диффузионного типа, к которым относится и знаменитое уравнение Гинзбурга–Ландау. Выход за рамки этих уравнений позволяет, в частности, получить информацию о высших моментах, которая существенна вблизи критических точек, а также построить более последовательную теорию неравновесных крупномасштабных (кинетических, гидродинамических, реакционно-диффузионных) флуктуаций.

10. Пространственная диффузия. Уравнение Эйнштейна–Смолуховского

До сих пор в уравнениях Ланжевена и в кинетических уравнениях среда, в которой совершается броуновское движение, считалась, фактически, неограниченной. Введем теперь, наряду с внутренними параметрами D, γ , также и внешний параметр — характерный размер системы L . При этом возникает и новый временной параметр — время диффузии:

$$\tau_D = \frac{L^2}{D_r}. \quad (10.1)$$

Здесь введено обозначение D_r для коэффициента пространственной диффузии. Ранее при описании броуновского движения использовался коэффициент диффузии в пространстве скоростей $D \equiv D_v$. В уравнениях же (6.9), (6.14) смысл коэффициента D зависит от интерпретации обобщенных координат x .

При использовании уравнений Ланжевена (2.2) время корреляции источника $\tau_{\text{cor}} = 0$. Отличны от нуля теперь два временных параметра $\tau_{\text{rel}} = 1/\gamma$ и τ_D . Если время диффузии много больше времени релаксации, то естественно ожидать, что вместо уравнения Фоккера–Планка для функции распределения $f(r, v, t)$ можно перейти к уравнению для более простой функции $f(r, t)$ — к уравнению Эйнштейна–Смолуховского. Это возможно сделать двумя способами, но лишь при постоянном γ !

10.1. Пространственная диффузия. Метод Ланжевена

Вернемся к уравнениям Ланжевена (2.2) для броуновской частицы. Предположим, что внешнее поле отсутствует ($U = 0$) и выполняется неравенство $\tau_D \gg \tau_{\text{rel}}$, т.е. процесс диффузии является медленным. При описании медленных процессов в уравнениях Ланжевена представляется естественным пренебречь производной скорости dv/dt по сравнению с γv . Исключая скорость, приходим к уравнению Ланжевена для координаты

$$\frac{dr}{dt} = \frac{y(t)}{\gamma} \equiv y_r(t). \quad (10.2)$$

Здесь введено обозначение $\mathbf{y}_r(t)$ для ланжевеновского источника, определяющего изменение положения броуновской частицы за счет толчков атомов среды. Моменты этого источника определяются выражениями

$$\langle \mathbf{y}_r(t) \rangle = 0, \quad \langle \mathbf{y}_r(t) \mathbf{y}_r(t') \rangle = 3 \cdot 2 D_r \delta(t - t'),$$

$$D_{(r)} = \frac{D}{\gamma^2} = \frac{kT}{M\gamma}. \quad (10.3)$$

Последняя формула устанавливает связь коэффициентов диффузии в обычном пространстве и в пространстве скоростей.

От уравнения Ланжевена (10.2) можно перейти к соответствующему уравнению для функции распределения $f(r, t)$. Поступим так же, как и в разделе 3 при выводе уравнения Фоккера–Планка (3.13). В результате и получаем искомое уравнение для функции $f(r, t)$ — уравнение Эйнштейна–Смолуховского:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D_{(r)} \Delta_r f, \quad \int f(\mathbf{r}, t) \frac{d\mathbf{r}}{V} = 1, \quad n(\mathbf{r}, t) = Nf(\mathbf{r}, t). \quad (10.4)$$

Естественно, что оно совпадает с известным уравнением диффузии. Мы ввели также обозначение для плотности числа броуновских частиц. Аналитическое решение этого уравнения хорошо известно. Приведем лишь выражения для моментов смещения броуновской частицы $r - r_0$:

$$\langle \mathbf{r} - \mathbf{r}_0 \rangle = 0, \quad \langle (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^2 \rangle = 3 \cdot 2 D_{(r)} (t - t_0). \quad (10.5)$$

Из второго равенства следует, что средний квадрат смещения броуновской частицы растет пропорционально времени — формула Эйнштейна.

10.2. Диффузия броуновской частицы во внешнем поле

С учетом внешнего поля при описании медленных процессов в уравнении (10.2) появится дополнительный член и оно примет вид

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = -\frac{1}{M\gamma} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{y}_r(t). \quad (10.6)$$

Моменты источника Ланжевена определяются прежними формулами (10.3). Переход к кинетическому уравнению производится по прежней схеме. В результате приходим к более общему уравнению Эйнштейна–Смолуховского

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D_{(r)} \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{r}^2} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{\mathbf{F}(\mathbf{r})}{M\gamma} f \right),$$

$$D_{(r)} = \frac{kT}{M\gamma}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}. \quad (10.7)$$

Его называют также уравнением Крамерса. Равновесным решением является распределение Больцмана

$$f(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-\frac{U(\mathbf{r})}{kT}\right) \left(\int \exp\left(-\frac{U(\mathbf{r}')}{kT}\right) d\mathbf{r}' \right). \quad (10.8)$$

Итак, мы получили уравнение для функции распределения $f(r, t)$ в двух случаях: 1) свободные броуновские частицы; 2) частицы во внешнем поле. В обоих случаях исходным служило уравнение Ланжевена, в котором условием $dv/dt \ll \gamma v$ выделялось медленное движение.

Это условие в зависимости от вида потенциала $U(r)$ может иметь существенно различный смысл. Рассмотрим этот вопрос более подробно.

Напомним, что при свободном движении условием служило неравенство

$$\tau_D = \frac{L^2}{D_{(r)}} \gg \tau_{\text{rel}} = \frac{1}{\gamma}. \quad (10.9)$$

Оно содержит характерный размер системы L и поэтому всегда выполняется для достаточно больших систем.

При наличии внешнего поля $U(r)$ ситуация существенно меняется, если поле таково, что ограничивает движение частиц. Обозначим характерный размер области через r_0 . Рассмотрим два существенных для дальнейшего примера.

1) *Гармонический осциллятор*: $F = -M\omega_0^2 r$ — упругая сила. Равновесное решение (10.8) при этом совпадает с распределением Гаусса. Таким образом,

$$U(\mathbf{r}) = \frac{M\omega_0^2 \mathbf{r}^2}{2}, \quad \mathbf{r}_0^2 \sim \langle \mathbf{r}^2 \rangle = \frac{kT}{M\omega_0^2}. \quad (10.10)$$

Роль L играет величина r_0 , поэтому неравенство (10.9) принимает теперь вид

$$\tau_D = \frac{\gamma}{\omega_0^2} \gg \frac{1}{\gamma} \quad \text{и, следовательно,} \quad \gamma \gg \omega_0. \quad (10.11)$$

Мы видим, что для связанной броуновской частицы — гармонического осциллятора — уравнение Крамерса (10.7) справедливо лишь при сильном затухании, т.е. для передемпфированного осциллятора. Такой случай интересен, несомненно, для многих практических приложений, например, при броуновском движении звеньев полимерных молекул. Практически интересен, однако, и обратный случай, когда затухание осциллятора мало.

2) *Броуновская частица — бистабильный элемент*. Упругая сила является нелинейной и потенциал задается выражением:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{M\omega_0^2 \mathbf{r}^2}{2} \left(-a + \frac{b}{2} r^2 \right), \quad a = a_f - 1, \quad b > 0. \quad (10.12)$$

Коэффициент a_f характеризует действие эффективного поля, например поля Лоренца в диэлектрике [33, 37]. При достаточно большом его значении, когда $a > 0$, коэффициент упругости становится отрицательным, а состояние системы — бистабильным. Для однообразия терминологии будем называть a_f , как и в автоколебательных — открытых активных системах, коэффициентом обратной связи.

Обратная связь, как правило, является свойством среды, в которой совершается броуновское движение. Коэффициент же нелинейности b может иметь разную природу. В связи с этим выделим два возможных случая.

а) Нелинейность является свойством отдельного элемента системы — отдельной броуновской частицы, а не состояния среды. Тогда в равновесном состоянии решение уравнения (10.7) представляется в виде распределения Больцмана (10.8) с потенциалом (10.12). При $a < 0$ распределение Больцмана имеет один максимум при $x = 0$. Поведение распределения при больших x определяется членом с коэффициентом b . При $a > 0$

состояние является бистабильным и распределение имеет два максимума.

б) Не только коэффициент обратной связи, но и коэффициент b определяются характеристиками среды. Тогда при отсутствии обратной связи, т.е. при $a_f = 0$, должно иметь место распределение Больцмана для гармонического осциллятора. Это означает, что при $a_f = 0$ система имеет наибольшую возможную симметрию или, иными словами, находится в наиболее хаотическом состоянии.

Из условия существования распределения Больцмана в среде с нелинейной упругостью следует зависимость коэффициента диффузии от координат:

$$D_{(r)}(\mathbf{r}) = D_{(r)}(1 + b\mathbf{r}^2), \quad D_{(r)} = \frac{kT}{M\gamma}. \quad (10.13)$$

С учетом этого равновесное (но при любом значении a_f) распределение можно представить в виде:

$$f(\mathbf{r}) = C \exp\left(-\frac{U_{\text{eff}}(\mathbf{r})}{kT}\right),$$

$$U_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \frac{M\omega_0^2}{2} \left[\mathbf{r}^2 - \frac{a_f}{b} \ln(1 + b\mathbf{r}^2) \right]. \quad (10.14)$$

Здесь введен эффективный потенциал, который учитывает понижение симметрии термостата по мере увеличения коэффициента a_f . Это изменение может происходить как, например, при изменении плотности, так и температуры.

Таким путем мы приходим к уравнению Эйнштейна–Смолуховского с переменным коэффициентом пространственной диффузии:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left[D_{(r)}(\mathbf{r}) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \right] - \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{F(\mathbf{r})}{M\gamma} f \right],$$

$$F(r) = -M\omega_0^2 r(1 - a_f + br^2). \quad (10.15)$$

При $a_f = 0$ из этого уравнения следует уравнение Эйнштейна–Смолуховского для линейного осциллятора. Ниже будут рассмотрены примеры применения более общего уравнения (10.15).

Изменение симметрии термостата можно учесть и другим путем. Именно, коэффициент диффузии остается прежним, но сила $F(r)$ заменяется на соответствующую эффективную силу:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{F}_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = -\frac{\partial U_{\text{eff}}}{\partial \mathbf{r}} = -M\omega_0^2 \mathbf{r} \left(1 - \frac{a_f}{1 + b\mathbf{r}^2} \right). \quad (10.16)$$

В результате приходим к следующему уравнению Эйнштейна–Смолуховского:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D_{(r)} \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{r}^2} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left[\frac{F_{\text{eff}}}{M\gamma} f \right], \quad D_{(r)} = \frac{kT}{M\gamma}. \quad (10.17)$$

В равновесном состоянии это уравнение также имеет решение (10.14).

Итак, при наличии нелинейного потенциала (10.12) возможно разное воздействие термостата (окружающей среды) на броуновские частицы. В первом случае можно условно говорить о *линейном термостате*, так как нелинейность потенциала заложена в структуре отдель-

ной броуновской частицы. Роль окружающей среды сводится к изменению характерной частоты: $\omega_0^2 \rightarrow \omega_0^2(1 - a_f)$. Значение $a_f = 1$ соответствует точке бифуркации — появлению "мягкой моды". Во втором случае можно условно говорить о *нелинейном термостате*, так как нелинейность силы, действующей на броуновскую частицу, определяется окружающей средой.

10.3. Сравнение стационарных распределений для линейного и нелинейного термостата

Этим двум разным случаям отвечают различные уравнения Эйнштейна–Смолуховского и, как следствие, разные стационарные распределения — распределение Больцмана с потенциалом (10.12) и распределение (10.14). Лишь второе из них при $a_f = 0$ совпадает с распределением Больцмана при броуновском движении гармонических осцилляторов. Различие этих распределений проявляется, в частности, в поведении при больших значениях r , т.е. на "хвостах" распределений.

Действительно, для линейного термостата убывание распределения на больших r определяется нелинейным фактором $\exp(-br^4)$, т.е. значительно быстрее, чем для распределения Больцмана с потенциалом гармонического осциллятора (10.10). Напротив, для распределения (10.14) с ростом a_f , т.е. по мере уменьшения симметрии, распределение на больших расстояниях падает значительно медленней, чем распределение Больцмана для линейного осциллятора.

Рассмотрим другие характеристики для одномерного движения (r заменяем на x).

1. Положения максимумов распределений совпадают

$$x_{\text{max}} = 0 \quad \text{при } a_f < 1,$$

$$x_{\text{max}} = \pm \left(\frac{a_f - 1}{b} \right)^{1/2} \quad \text{при } a_f > 1. \quad (10.18)$$

2. Отношения значений функций распределения при $x = x_{\text{max}}$ и $x = 0$ показывают, что относительная глубина ямы для симметричного бистабильного потенциала меньше в случае нелинейного термостата. По этой причине преодоление барьера при коллективной нелинейности облегчается. Об этом свидетельствует и расчет соответствующих значений дисперсий. Так, в области применимости приближения Гаусса отношение дисперсий определяется выражением

$$\langle (\delta x)^2 \rangle_{\text{NL}} \left[\langle (\delta x)^2 \rangle_{\text{L}} \right]^{-1} = a_f, \quad a_f > 1. \quad (10.19)$$

Мы видим, что форма уравнения Эйнштейна–Смолуховского существенно зависит от характера взаимодействия броуновской частицы со средой. В случае "линейного термостата", когда нелинейность определяется структурой броуновской частицы, изменение симметрии движения не сказывается на структуре уравнения Эйнштейна–Смолуховского. Если же нелинейность формируется взаимодействием с термостатом, то ситуация существенно меняется. В этом случае структура уравнения Эйнштейна–Смолуховского зависит от значения коэффициента обратной связи.

Исходным для получения уравнения Эйнштейна–Смолуховского служило уравнение Ланжевена (10.6). Оно в свою очередь следовало из более общей системы уравнений Ланжевена для координат и скорости броу-

новской частицы — уравнений (2.2). Основой для этого служило условие медленности либо процесса пространственной диффузии свободной частицы ($\tau_D \gg \gamma^{-1}$), либо условие сильного затухания ($\gamma \gg \omega_0$). Первое условие всегда выполняется для больших систем, так как время диффузии пропорционально квадрату характерного размера системы L . Второе условие определяется соотношением внутренних параметров и реализуется далеко не всегда. Как же быть, если неравенство $\gamma \gg \omega_0$ не выполняется?

Имеются и другие существенные вопросы. Так, например, как описать пространственную диффузию, когда коэффициент трения зависит от скорости и тем самым имеется и диссипативная нелинейность? Приведенные вопросы составляют отдельные элементы общей проблемы соотношения кинетического и гидродинамического описания броуновского движения. Сделаем первый шаг в этом направлении. Рассмотрим для простейшего случая возможность гидродинамического описания броуновского движения. Это облегчит поиск решения для более сложных ситуаций.

11. Гидродинамическое описание броуновского движения

Вернемся к кинетическому уравнению Фоккера–Планка (2.6) для функции распределения $f(r, v, t)$. В него через коэффициент диффузии $D_{(v)}$ входит температура термостата. Используем известную схему перехода от кинетического уравнения Больцмана к уравнениям газовой динамики.

При кинетическом описании броуновского движения мы имеем фактически дело с двухкомпонентной сплошной средой. Одна из компонент — среда, представляющая термостат. Она может быть и неравновесной. Второй компонентой сплошной среды при использовании метода Эйлера является в рассматриваемом примере среда из невзаимодействующих броуновских частиц. Естественно, что возможен и более общий случай, когда принимается во внимание и взаимодействие броуновских частиц [3].

Итак, рассматриваем двухкомпонентную сплошную среду — термостат с температурой T и сплошная среда из невзаимодействующих частиц. Термостат предполагаем "линейным" в указанном выше смысле. Тогда броуновское движение описывается кинетическим уравнением (2.6).

Введем гидродинамические функции для броуновских частиц: $\rho_B(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{u}_B(\mathbf{r}, t)$, $T_B(\mathbf{r}, t)$. Ниже индекс "B" оставляем только у температуры, чтобы отличить ее от температуры термостата. Для функции ρ получаем уравнение непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}} = 0. \quad (11.1)$$

Вторым является уравнение для плотности импульса броуновских частиц

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial r_j} = -\frac{\partial p}{\partial r_i} - \frac{\partial \pi_{ij}}{\partial r_j} + \frac{\rho}{m} F_i(r) - \gamma \rho u_i, \quad (11.2)$$

$$p = \frac{\rho}{m} kT_B.$$

Здесь введено обозначение p для давления броуновских частиц. π_{ij} неизвестный пока "тензор вязких напряже-

ний". Наконец, имеем уравнение для плотности кинетической энергии

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho \mathbf{u}^2}{2} + \frac{3}{2} \frac{\rho}{m} kT_B \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial r_i} \left[u_i \left(\frac{\rho \mathbf{u}^2}{2} + \frac{3}{2} \frac{\rho}{m} kT_B + \rho \right) + \pi_{ij} u_j + S_i \right] = \\ & = 3\gamma \rho \left[\frac{kT}{m} - \left(\frac{\mathbf{u}^2}{3} - \frac{kT_B}{m} \right) \right] + \rho \mathbf{F} \mathbf{u}. \end{aligned} \quad (11.3)$$

Здесь введено обозначение S_i для неизвестных пока компонент "вектора теплового потока". Последний член в правой части уравнения (11.2) и первый член в правой части уравнения (11.3) — моменты "интеграла столкновений" в уравнении Фоккера–Планка.

Функция распределения $f(\mathbf{r}, t)$ в уравнении Эйнштейна–Смолуховского связана с плотностью броуновских частиц равенством: $\rho(\mathbf{r}, t) = m n f$. Таким образом, чтобы найти искомое уравнение, надо из системы уравнений гидродинамики броуновских частиц исключить все "лишние" функции \mathbf{u} , T_B , π_{ij} , S_i . Это возможно сделать лишь методом теории возмущений. Она основана на предположении, что диффузионный процесс, который описывается уравнением Эйнштейна, является самым медленным во времени и самым плавным по координатам. Для свободной диффузии первое условие выражается неравенством $\tau_D \gg \gamma^{-1}$, а второе — малостью соответствующего числа Кнудсена $\text{Kn} = (v_T/\gamma)/L$. Тем самым предполагаются малыми градиенты гидродинамических функций.

Из последнего уравнения в нулевом приближении по этим параметрам следует равенство температуры броуновских частиц и термостата:

$$T_B = T. \quad (11.4)$$

В уравнении (11.2) в правой части для свободных броуновских частиц (т.е. при $\mathbf{F} = 0$) основными являются первый и последний члены правой части. В результате, с учетом равенства (11.4) приходим к уравнению:

$$\rho \mathbf{u} = -\frac{kT}{\gamma m} \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{r}} = -D_{(r)} \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{r}}. \quad (11.5)$$

Подстановка этого выражения для плотности импульса в уравнение непрерывности (11.1) и приводит к уравнению Эйнштейна для функции $\rho(r, t)$ и, следовательно, для функции распределения $f(r, t)$.

При наличии внешней силы при условии медленности процесса (для осциллятора это неравенство $\gamma \gg \omega_0$) и малости числа Кнудсена поступаем аналогичным образом. При этом равенство (11.4) остается прежним, так как поправка к нему пропорциональна градиенту и, следовательно, мала. В уравнении же для плотности импульса появляется дополнительный член. Он пропорционален градиенту потенциала и мал лишь при условии достаточной гладкости потенциала. Для осциллятора это эквивалентно неравенству $\gamma \gg \omega_0$. Тогда уравнение (11.5) принимает вид:

$$\rho \mathbf{u} = -D_{(r)} \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\rho}{M\gamma} \mathbf{F}(\mathbf{r}). \quad (11.6)$$

Подстановка этого выражения для плотности импульса в уравнение непрерывности (11.1) и приводит к уравнению Эйнштейна–Смолуховского (10.7).

Подведем итоги.

Исходным при выводе уравнения Эйнштейна–Смолуховского в этом разделе служило кинетическое уравнение Фоккера–Планка (2.6) для функции распределения броуновских частиц в шестимерном пространстве координат и скоростей — функции $f(r, v, t)$. Тем самым система невзаимодействующих броуновских частиц представляется, как сплошная среда. Ее взаимодействие с термостатом характеризуется двумя факторами — коэффициентами трения γ и диффузии D .

Переход к уравнению Эйнштейна–Смолуховского был осуществлен в два этапа. Сначала был произведен переход к уравнениям для гидродинамических характеристик броуновского движения. При этом система уравнений (11.1)–(11.3) не является замкнутой, так как получена без каких-либо упрощений.

Чтобы свести ее к замкнутому уравнению (11.7) — уравнению диффузии, были сделаны существенные ограничения — гладкость потенциала (в частности, условие $\gamma \gg \omega_0$) и малость числа Кнудсена. Эти условия в сочетании с условием постоянства величин γ, D — линейности броуновского движения, сильно ограничивают область применимости уравнения Эйнштейна–Смолуховского.

В связи с этим и в теории броуновского движения возникает задача построения обобщенного кинетического уравнения для единого описания броуновского движения как на кинетических, так и на гидродинамических и диффузионных масштабах [28].

Теперь мы покажем, как можно использовать общие результаты термодинамики необратимых процессов в теории нелинейного броуновского движения.

12. Эволюция свободной энергии и энтропии при броуновском движении. Функционалы Ляпунова A_F, A_S

12.1. Управляющее уравнение. Н-теорема

Обозначим через $f_0(x, t)$ стационарное решение управляющего уравнения (5.9). Представим его в форме канонического распределения Гиббса. При этом возможны разные определения эффективной функции Гамильтона.

Роль эффективной температуры может играть интенсивность источника Ланжевена, которая определяет и коэффициент диффузии. Однако при использовании управляющего уравнения в общем виде (5.9) нет явной информации о структуре стационарного решения и нелинейного (в общем случае) коэффициента диффузии. Как следствие, нет возможности для конкретного определения эффективной температуры.

Каков же выход? Имеются две возможности для определения неравновесной свободной энергии стационарного состояния и эффективной температуры.

Во-первых, можно, формально, предположить, что эффективная температура равна единице, и представить стационарное распределение в виде:

$$f_0(x) = \exp(F_{\text{eff}} - H_{\text{eff}}(x)), \quad F_{\text{eff}} = - \int \exp(-H_{\text{eff}}(x)) dx. \quad (12.1)$$

Такое представление эквивалентно тому, что эффективная температура включена в определение свободной энергии и функции Гамильтона.

Вторая возможность состоит в определении эффективной функции Гамильтона равенством

$$f_0(x) = \exp(-H_{\text{eff}}) (T_{\text{eff}} = 1, \quad F_{\text{eff}} = 0). \quad (12.2)$$

Такое определение наиболее естественно, когда вся информация берется непосредственно из эксперимента, например, содержится во временных реализациях $x(t, a)$. Оно служило исходным в [17, 38] при формулировке критерия открытой системы в форме S-теоремы.

Вернемся к управляющему уравнению (5.9) и представим его стационарное решение в виде (12.1). Тем самым вводится свободная энергия неравновесного, но стационарного состояния. Она связана "термодинамическим равенством" со средней эффективной энергией и соответствующей энтропией

$$F_{\text{eff}} = \int H_{\text{eff}}(x) f_0(x) dx - \int \ln f_0(x) f_0(x) dx. \quad (12.3)$$

Соответствующим выражением определяем неравновесную свободную энергию для процесса временной эволюции

$$F(t) = \int H_{\text{eff}}(x) f(x, t) dx - \int \ln f(x, t) f(x, t) dx. \quad (12.4)$$

Разность введенных таким образом неравновесных свободных энергий приводится к виду

$$A_F = F(t) - F_0 = \int \ln \frac{f(x, t)}{f_0(x)} f(x, t) dx \geq 0. \quad (12.5)$$

Мы видим, что свободная энергия минимальна в стационарном состоянии. Покажем теперь, что в процессе временной эволюции к стационарному состоянию, который описывается управляющим уравнением (5.9), свободная энергия убывает монотонно. Это означает, что A_F является функционалом Ляпунова.

Дифференцируем по времени выражение (12.5) и используем управляющее уравнение (5.9). С учетом условия нормировки приходим к следующему выражению:

$$\begin{aligned} \frac{dA_F}{dt} &= \int \ln \frac{f(x, t)}{f_0(x)} (W_{xx'} f(x', t) - W_{x'x} f(x, t)) dx dx' = \\ &= \int W_{xx'} f_0(x') \left(\frac{f(x, t)}{f_0(x')} \ln \frac{f(x, t)}{f_0(x)} - \frac{f(x', t)}{f_0(x')} \ln \frac{f(x', t)}{f_0(x')} \right). \end{aligned} \quad (12.6)$$

Чтобы сделать заключение о знаке подинтегрального выражения, воспользуемся равенством

$$\int W_{xx'} f_0(x') \left(\frac{f(x, t)}{f_0(x)} - \frac{f(x', t)}{f_0(x')} \right) dx dx' = 0. \quad (12.7)$$

Здесь учтено, что $f_0(x)$ есть стационарное решение и, следовательно, имеет место равенство:

$$W_{xx'} f_0(x') - W_{x'x} f_0(x) = 0. \quad (12.8)$$

С учетом условия (12.7) выражение (12.6) можно записать в виде

$$\frac{dA_F}{dt} = \int W_{xx'} f_0(x') \left(-a' \ln \frac{a}{a'} - a + a' \right) \leq 0. \quad (12.9)$$

Здесь введены обозначения

$$a = \frac{f(x, t)}{f_0(x)}, \quad a' = \frac{f(x', t)}{f_0(x')} \quad (12.10)$$

и использовано неравенство $\ln(a/a') \geq 1 - (a/a')^{-1}$.

Два неравенства (12.5) и (12.9) показывают, что введенная нами разность неравновесных свободных энергий A_F является функционалом Ляпунова. В процессе эволюции достигается стационарное состояние, которое по этому критерию является устойчивым.

В работе [11] приведенный результат трактуется, как *возрастание энтропии*. В связи с этим напомним следующее.

Разность свободных энергий и соответствующий функционал Ляпунова могут служить мерой удаленности текущего состояния от равновесного. Этой информации, однако, недостаточно для заключения о том, является ли рассматриваемая временная эволюция процессом самоорганизации. Для этого надо вместо A_F ввести функционал Ляпунова, определяемый разностью энтропий:

$$A_S = S_0 - \tilde{S}(t) = \int \ln \frac{\tilde{f}(x, t)}{f_0(x)} \tilde{f}(x, t) dx \geq 0, \quad \frac{dA_S}{dt} \leq 0. \quad (12.11)$$

Здесь $\tilde{f}(x, t)$ — перенормированное распределение. Перенормировка определяется условием постоянства в процессе эволюции средней эффективной функции Гамильтона $H_{\text{эфф}}$. Функционал Ляпунова A_S служит мерой относительной степени упорядоченности состояний в процессе эволюции к стационарному состоянию. Неравенства (12.11) выражают Н-теорему для процессов, которые описываются управляющим уравнением (5.9).

12.2. Уравнение Фоккера–Планка. Н-теорема

Обратимся теперь к уравнению Фоккера–Планка (6.9), которое следует либо из управляющего уравнения (5.9), либо из эквивалентного ему уравнения (6.2). Стационарное решение определяется тогда выражением (6.16) при $v = 0$. Его можно представить в виде (12.1)

$$f_0(x) = \exp(F_{\text{эфф}} - H_{\text{эфф}}(x)), \quad H_{\text{эфф}}(x) = \int_0^x \frac{A(x')}{D(x')} dx'. \quad (12.12)$$

Снова вводим функционал A_F . Он определяется формулой (12.5). Его временную производную находим с помощью уравнения (6.9)

$$\frac{dA_F}{dt} = - \int D(x) f(x, t) \left(\frac{\partial}{\partial x} \ln \frac{f(x, t)}{f_0(x)} \right)^2 dx \leq 0. \quad (12.13)$$

Мы видим, что и для уравнения Фоккера–Планка неравновесная свободная энергия монотонно уменьшается в процессе временной эволюции к стационарному распре-

делению (12.12). Разумеется, что и здесь функционал A_F служит относительной характеристикой удаленности от стационарного состояния, но не мерой относительной степени упорядоченности различных состояний и, следовательно, не может служить критерием самоорганизации. Для получения такого критерия надо снова произвести перенормировку к заданному значению средней эффективной энергии.

12.3. Уравнение Эйнштейна–Смолуховского. Н-теорема

Вернемся к уравнению Эйнштейна–Смолуховского (10.17). Действие нелинейного термостата на броуновскую частицу осуществляется через эффективную силу. Стационарное решение в термостате совпадает с равновесным и определяется выражением (10.14). При нулевом значении коэффициента обратной связи α_f оно совпадает с распределением Больцмана для гармонического осциллятора.

Функционал Ляпунова A_F определяется выражением, которое аналогично (12.5)

$$A_F = F(t) - F_0 = \int \ln \frac{f(\mathbf{r}, t)}{f_0(\mathbf{r})} f(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \geq 0. \quad (12.14)$$

Временную производную определяем с помощью уравнения (10.17)

$$\frac{dA_F}{dt} = - \int D(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \ln \frac{f(\mathbf{r}, t)}{f_0(\mathbf{r})} \right)^2 d\mathbf{r} \leq 0. \quad (12.15)$$

Функционал Ляпунова A_F и здесь служит лишь мерой удаленности от равновесного состояния. Для получения меры относительной степени упорядоченности следует также использовать функционал, который определяется разностью энтропий.

Итак, возможно обобщение термодинамического понятия "свободная энергия" на широкий класс уравнений, описывающих броуновское движение в нелинейных средах. Несмотря на определенную искусственность такого определения, функционалы Ляпунова A_F весьма полезны для решения многих задач. Некоторые из них будут рассмотрены в следующих разделах.

13. Броуновское движение в автоколебательных системах. Генератор Ван-дер-Поля

Цель настоящего раздела — проиллюстрировать эффективность изложенной теории на конкретных примерах. Отобранные примеры представляют и самостоятельный интерес. На них прослеживается и отличие представленных выше разных способов описания броуновского движения.

Начнем с теории броуновского движения в генераторе Ван-дер-Поля.

Генератор Ван-дер-Поля являет собой классический пример электрической автоколебательной системы. Он содержит линейный электрический колебательный контур, включенный через усилитель в цепь обратной связи.

Без учета флуктуаций процесс в генераторе может быть описан системой нелинейных динамических диссипативных уравнений для заряда и тока. Учет электронной структуры потока электрического заряда учитыва-

ется введением в динамические уравнения соответствующей случайной э.д.с. — \mathcal{E} — источника Ланжевена.

Рассмотрим генератор с мягким возбуждением, когда линейная составляющая коэффициента трения меняет знак при достаточно большом значении коэффициента обратной связи. С учетом электромеханической аналогии имеем следующую систему уравнений Ланжевена:

$$\frac{dx}{dt} = v, \quad \frac{dv}{dt} + (-\alpha + \beta v^2)v + \omega_0^2 x + \frac{1}{2} \frac{dD}{dv} = \sqrt{D(v)}y(t). \quad (13.1)$$

Здесь $\alpha = \alpha_f - \gamma$, α_f — коэффициент обратной связи, а γ и β — коэффициенты линейного и нелинейного трения.

Уравнения (13.1) аналогичны уравнениям Ланжевена (3.16) для броуновской частицы в среде с нелинейным трением. Теперь, однако, постоянная составляющая трения может менять знак. Следуя методу раздела 3, перейдем к соответствующему уравнению Фоккера–Планка в кинетической форме:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial r} - \omega_0^2 r \frac{\partial f}{\partial v} = \frac{\partial}{\partial v} \left(D(v) \frac{\partial f}{\partial v} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left[(-\alpha + \beta v^2) v f \right]. \quad (13.2)$$

Оно аналогично уравнению (3.15).

Точное решение уравнений, описывающих автоколебания, не удастся найти даже в динамическом режиме, когда справедливы уравнения (13.1) без источника Ланжевена. Решение соответствующих уравнений Ланжевена и Фоккера–Планка представляет собой еще значительно более сложную задачу. Уравнения могут быть значительно упрощены, когда все диссипативные параметры много меньше частоты колебаний, т.е. справедливы неравенства:

$$|\alpha|, \alpha_f, \delta \langle v^2 \rangle \ll \omega_0. \quad (13.3)$$

Это означает, другими словами, что все времена релаксации являются большими по сравнению с периодом колебаний. Тогда путем усреднения по периоду колебаний $2\pi/\omega_0$ можно значительно упростить рассматриваемые уравнения. Математические аспекты соответствующей теории возмущений разработаны в работах А.А. Андропова, Н.М. Крылова и Н.Н. Боголюбова.

Теории флуктуаций в генераторах посвящено много работ, например, [5–9, 20–22]. Как правило, расчет флуктуаций проводится при условии постоянства коэффициента диффузии. Такое ограничение является слишком сильным, когда обратная связь устроена так, что при ее выключении в контуре остаются лишь тепловые флуктуации.

Предположим, что обратная связь устроена именно так. Тогда при $\alpha_f = 0$ коэффициент нелинейной диффузии $D(v)$ можно найти способом, изложенным в разделе 3. Равновесным решением при отсутствии обратной связи является распределение Максвелла–Больцмана:

$$f(x, v, \alpha_f = 0) = C \exp\left(-\frac{H(x, v)}{kT}\right), \quad H(x, v) = \frac{Mv^2}{2} + \frac{M\omega_0^2}{2}. \quad (13.4)$$

Здесь введено обозначение для функции Гамильтона линейного колебательного контура. По электромехани-

ческой аналогии массе отвечает индуктивность L , координате x — заряд и т.д.

Для определения функции $D(v)$ подставляем это распределение в уравнение (13.2) при $\alpha_f = 0$. Оно удовлетворяет уравнению при условии

$$D(v) = (\gamma + \beta v^2) \frac{kT}{M} = \gamma(v) \frac{kT}{M}. \quad (13.5)$$

Естественно, что мы снова пришли к соотношению Эйнштейна (3.4).

Пусть теперь коэффициент обратной связи отличен от нуля. Тогда из условия равенства нулю "интеграла столкновений" в уравнении (13.2) находим выражение для f , которое обращает в нуль его правую часть. Представляем его снова в форме канонического распределения Гиббса:

$$f(x, v, \alpha_f) = \exp\left(-\frac{H_{\text{eff}}}{kT}\right), \quad H_{\text{eff}} = H(x, v) - \frac{\alpha_f}{\beta} \ln\left(1 + \frac{\beta}{\gamma} \frac{mv^2}{2}\right). \quad (13.6)$$

При $\alpha_f = 0$ эффективная функция Гамильтона совпадает с (13.4).

Заметим, что это стационарное решение не удовлетворяет, однако, уравнению (13.2), поскольку при его подстановке левая часть уравнения не обращается в нуль. Это лишний раз указывает на сложность определения стационарного распределения для неусредненного уравнения Фоккера–Планка. Это удастся сделать лишь приближенно.

Один из способов упрощения, как мы уже отметили, возможен при выполнении условий (13.3). В первом приближении он сводится к усреднению по периоду колебаний. Рассмотрим другие возможности, которые основаны на использовании более простых модельных уравнений при описании броуновского движения в генераторе Ван-дер-Поля.

Одна из таких моделей будет рассмотрена в следующем разделе. Здесь же перейдем к более грубому описанию путем переопределения скорости броуновской частицы в неравновесном состоянии при $\alpha_f \neq 0$:

$$v \rightarrow v_{\text{eff}} = \frac{\partial H_{\text{eff}}}{\partial Mv} = v - \alpha_f \frac{1}{\gamma + \beta v^2} v. \quad (13.7)$$

Тогда вместо (13.2) приходим к новому уравнению:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial H_{\text{eff}}}{\partial mv} \frac{\partial f}{\partial r} - \omega_0^2 r \frac{\partial f}{\partial v} = \frac{\partial}{\partial v} \left(D(v) \frac{\partial f}{\partial v} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left[(-\alpha + \beta v^2) v f \right]. \quad (13.8)$$

Его стационарное решение имеет вид (13.6).

Благодаря новому определению скорости по формуле (13.7) меняется уровень описания броуновского движения в генераторе. Рождение предельного цикла теперь явно не описывается. Однако его появление отражается распределением (13.6). При достаточно большом значении параметра обратной связи распределение по скорости становится бистабильным. При этом максимумы распределения связаны с энергией колебания в режиме генерации.

Рассмотренное упрощение описания оказывается эффективным и в более общем случае при одновремен-

ном наличии как диссипативной, так и недиссипативной нелинейности. Напомним, что случай недиссипативной нелинейности уже рассматривался в разделе 10 при описании броуновского движения в бистабильных элементах. При комбинации нелинейностей двух типов возникает много новых режимов броуновского движения, поскольку в таких системах могут одновременно происходить как равновесные, так и неравновесные "фазовые переходы".

При этом равновесные фазовые переходы могут, в частности, существенно влиять на скорости химических реакций. В таком случае можно говорить о новом типе химического катализа, когда изменение скорости реакции осуществляется путем изменения величины коэффициента обратной связи α_f .

Вернемся к решению (13.6) и рассмотрим на основе критерия S-теоремы [19, 39, 40] вопрос об относительной степени упорядоченности стационарных состояний, отвечающих различным значениям параметра обратной связи α_f .

За "начало отсчета" относительной степени упорядоченности естественно принять равновесное состояние с распределением (13.4), отвечающее значению $\alpha_f = 0$. Для перенормировки равновесного состояния к заданному значению средней кинетической энергии колебаний в состоянии с $\alpha_f > 0$ используем равенство

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} k \tilde{T}(\alpha_f) &\equiv \int \frac{Mv^2}{2} C_0 \exp\left(-\frac{H(x,v)}{k \tilde{T}(\alpha_f)}\right) dx dv = \\ &= \int \frac{Mv^2}{2} C \exp\left(-\frac{H_{\text{eff}}(x,v)}{kT}\right) dx dv. \end{aligned} \quad (13.9)$$

Оно позволяет найти значение эффективной температуры в зависимости от значений параметра α_f :

$$\tilde{T} = \tilde{T}(\alpha_f),$$

при "начальном условии"

$$\tilde{T}(\alpha_f)|_{\alpha_f=0} = T. \quad (13.10)$$

Поскольку при одинаковых значениях средней энергии максимум энтропии отвечает равновесному состоянию, то степень упорядоченности всех состояний с $\alpha_f > 0$ будет больше, чем в состоянии равновесия. На основе равенства (13.9) может быть дан и ответ на вопрос о том, происходит ли увеличение степени упорядоченности по мере увеличения значения α_f монотонно?

Количественное различие относительной степени упорядоченности разных состояний определяется по разности энтропий перенормированного равновесного состояния и энтропии состояния с $\alpha_f > 0$. Мы еще вернемся к этому вопросу.

14. Генератор Ван-дер-Поля. Симметризованная нелинейность

Для описания процесса генерации в ряде случаев (например, в теории твердотельных лазеров) используются уравнения для x и v , в которые диссипативная нелинейность входит симметрично [17, 21]:

$$\frac{dx}{dt} + \frac{1}{2}(-\alpha + \beta E)x = v, \quad \frac{dv}{dt} + \frac{1}{2}(-\alpha + \beta E)v + \omega_0^2 x = 0. \quad (14.1)$$

Здесь использовано обозначение для энергии колебаний

$$E = \frac{M}{2}(v^2 + \omega_0^2 x^2) \equiv H(x, v). \quad (14.2)$$

Из уравнений (14.1) следует точное (без усреднения по периоду колебаний) уравнение для энергии E

$$\frac{dE}{dt} = (\alpha - \beta E)E, \quad \alpha = \alpha_f - \gamma. \quad (14.3)$$

Можно записать решение приведенных уравнений по заданным значениям E_0 ϕ_0 — энергии и фазы (ниже полагаем $M = 1$)

$$x(t) = \omega_0^{-1} \sqrt{2E(t)} \cos(\omega_0 t + \phi_0), \quad (14.4)$$

$$v(t) = -\sqrt{2E(t)} \sin(\omega_0 t + \phi_0),$$

$$E(t) = E_0 \frac{\alpha}{\beta} \left[E_0 - \left(E_0 - \frac{\alpha}{\beta} \right) e^{-\alpha t} \right]^{-1},$$

$$E(t) = \frac{E_0}{1 + E_0 \beta t} \quad \text{при } \alpha = 0. \quad (14.5)$$

Характер временной эволюции существенно зависит от знака параметра α . При $\alpha < 0$ система переходит в состояние покоя с $E = 0$, а при $\alpha > 0$ устанавливается стационарное колебание с частотой ω и с энергией предельного цикла $E = \alpha/\beta$. Таким образом, значение $\alpha = 0$ есть точка бифуркации.

Из этой формулы следует также зависимость времени релаксации от степени близости к точке бифуркации. При конечном удалении от точки бифуркации приближение к одному из двух стационарных состояний происходит по экспоненциальному закону с временем релаксации $\tau_{\text{rel}} \sim |\alpha|^{-1}$. По мере приближения к точке бифуркации он сменяется степенной зависимостью. В пределе $\alpha = 0$ $E(t) \propto 1/t$ и зависимость от E_0 исчезает.

Для описания флуктуационных движений в приведенные уравнения надо ввести источники Ланжевена и установить вид соответствующего уравнения Фоккера–Планка. Как и выше, отдаем предпочтение кинетической форме уравнения Фоккера–Планка.

Будем использовать уже известные нам результаты, которые были установлены для описания броуновского движения при нелинейном трении. По аналогии с (13.1) уравнение Ланжевена для энергии запишем в виде:

$$\frac{dE}{dt} + (-\alpha + \beta E)E - \frac{1}{2} \frac{d}{dE} (D(E)E) = \sqrt{D(E)E} y(t). \quad (14.6)$$

Моменты источника Ланжевена $y(t)$ определяются формулами

$$\langle y(t) \rangle = 0, \quad \langle y(t)y(t') \rangle = 2\delta(t - t'). \quad (14.7)$$

Имеется лишь одно отличие — при определении коэффициента диффузии выделен множитель E , который остается и при постоянной диффузии, так как возникает в результате перехода от x, v к полярным координатам.

К уравнению для функции распределения $f(E, t)$ переходим по схеме, изложенной в разделе 3. Это приводит к уравнению:

$$\frac{\partial f(E, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial E} \left(D(E)E \frac{\partial f}{\partial E} \right) + \frac{\partial}{\partial E} [(-\alpha + \beta E)E f]. \quad (14.8)$$

Запишем соответствующее уравнение для средней энергии:

$$\frac{d\langle E \rangle}{dt} + \langle (-\alpha + \beta E)E \rangle = \left\langle \frac{dD(E)E}{dE} \right\rangle. \quad (14.9)$$

Оно, естественно, не является замкнутым.

В уравнении (14.8) функцию $D(E)$ определяем из условия, что при отсутствии обратной связи решение совпадает с распределением Больцмана. Это приводит к следующему выражению:

$$D(E) = D \left(1 + \frac{\beta}{\gamma} E \right), \quad D = \gamma kT. \quad (14.10)$$

Стационарное решение уравнения (14.8) также представим в виде канонического распределения Гиббса с эффективной функцией Гамильтона

$$f_0(E) = C \exp \left(-\frac{H_{\text{eff}}(E, \alpha_f)}{kT} \right), \\ H_{\text{eff}} = E - \frac{\alpha_f}{\beta} \ln \left(1 + \frac{\beta E}{\gamma} \right). \quad (14.11)$$

При α_f оно совпадает с распределением Больцмана.

Диффузия $D(E)$ отражает факт "атомарной структуры" переноса заряда. Часто используется приближение заданного шума: $D(E) = D$. В этом приближении соотношение Эйнштейна $D = \gamma kT$ не имеет места, поэтому стационарное распределение принимает вид:

$$f(E, a) = \exp \frac{F - H_{\text{eff}}}{D/\gamma}, \quad H_{\text{eff}}(E) = -\alpha E + \frac{1}{2} - \beta E^2. \quad (14.12)$$

Величины F и D/γ — эффективные свободная энергия и температура.

Сравним приведенные стационарные распределения, отвечающие различным определениям источника Ланжевена и, соответственно, различным определениям коэффициента диффузии.

Зависимость коэффициента диффузии от энергии приводит к более медленному убыванию функции распределения при больших значениях энергии. Таким образом, "хвосты" распределений существенно различны. Однако положения максимумов распределений одинаковы:

$$E_{\text{max}} = \frac{\alpha}{\beta} \quad \text{при } \alpha > 0, \\ E_{\text{max}} = 0 \quad \text{при } \alpha < 0. \quad (14.13)$$

Полезно сопоставить оба распределения для области, когда справедливо приближение Гаусса. Заметим, что распределение (14.12) можно для области развитой генерации переписать в виде:

$$f_{(3)} = \sqrt{\frac{\beta}{2\pi D}} \exp \left[-\frac{(E - \alpha/\beta)^2}{2D/\beta} \right], \quad \varepsilon = \frac{D\beta}{\alpha^2} \ll 1. \quad (14.14)$$

Здесь введен безразмерный параметр ε . В области развитой генерации он мал.

Выражение для относительной дисперсии энергии имеет вид:

$$\langle (\delta E)^2 \rangle \langle E \rangle^{-2} = D\beta\alpha^{-2} = \varepsilon \ll 1. \quad (14.15)$$

Чтобы привести (14.11) к виду распределения Гаусса, проведем под знаком \exp разложение по разности $E - E_{\text{max}}$ и ограничимся первыми двумя производными. Мы придем в результате к распределению вида (14.14). Теперь, однако, относительная дисперсия определяется иным выражением:

$$\langle (\delta E)^2 \rangle \langle E \rangle^{-2} = D\beta\alpha^{-2} \left(\frac{\gamma + \alpha}{\gamma} \right) \equiv \varepsilon \frac{\gamma + \alpha}{\gamma} \ll 1. \quad (14.16)$$

Напомним, что для естественных флуктуаций коэффициент $D = \gamma kT$.

Из приведенных формул следует, что даже в приближении Гаусса учет зависимости коэффициента диффузии от энергии приводит к заметному изменению относительной дисперсии. Выражение (14.16) совпадает с предыдущим лишь при дополнительном условии $\alpha \ll \gamma$. Таким образом, область применимости формул (14.14), (14.15) определяется двумя неравенствами:

$$\varepsilon = D\beta\alpha^{-2} \ll 1, \quad \alpha \ll \gamma. \quad (14.17)$$

Это означает, что мы находимся в области развитой генерации, но все же недалеко от порога генерации.

Аналогичное двойное неравенство определяет область применимости теории фазовых переходов, развитой Ландау [41, 42]. Эта теория справедлива лишь при выполнении неравенств, аналогичных (14.17). Ниже мы еще вернемся к этому вопросу.

15. Совместное действие естественного и внешнего шума

С практической точки зрения наиболее интересен случай, когда имеет место одновременное действие как естественного шума (через функцию $D(E)$), так и внешнего шума. Покажем на примере, что даже при сильном внешнем шумовом воздействии учет естественного шума оказывается необходимым [18].

Вернемся к уравнению Ланжевена (14.6). Пусть теперь значение параметра обратной связи флуктуирует под действием внешнего источника

$$\alpha_f \rightarrow \alpha_f + \sqrt{\sigma} y(t). \quad (15.1)$$

Здесь σ — интенсивность параметрического шума. Моменты случайной функции $y(t)$ определяются прежними формулами (14.7). С учетом этого имеем следующее уравнение Ланжевена:

$$\frac{dE}{dt} + (-\alpha + \beta E)E - \frac{1}{2} \frac{d}{dE} \left(\sqrt{D(E)E} + \sqrt{(\sigma)E} \right)^2 = \\ = \left(\sqrt{D(E)E} + \sqrt{(\sigma)E} \right) y(t). \quad (15.2)$$

Следуя методу раздела 3, находим соответствующее уравнение Фоккера-Планка:

$$\frac{\partial f(E, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial E} \left[\left(\sqrt{D(E)E} + \sqrt{(\sigma)E} \right)^2 \frac{\partial f}{\partial E} \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial E} \left[(-\alpha + \beta E)E f \right]. \quad (15.3)$$

Стационарное решение полученного уравнения представим в виде

$$f(E) = C \exp \int_0^E \frac{\alpha - \beta E'}{(\sqrt{D(E')} + \sqrt{\sigma E'})^2} dE',$$

$$D(E) = D \left(1 + \frac{\beta}{\gamma} E \right). \quad (15.4)$$

Если внешний шум отсутствует ($\sigma = 0$), то это распределение совпадает с (14.12). В противоположном случае, когда отсутствует источник естественных флуктуаций ($D = 0$), выражение (15.4) принимает вид:

$$f(E) = C \exp \int_0^E \frac{\alpha - \beta E'}{\sigma E'} dE', \quad \int_0^\infty f(E) dE = 1. \quad (15.5)$$

Мы видим, что в этом случае интеграл в экспоненте содержит логарифмическую расходимость при малых значениях E . В общем же выражении благодаря наличию естественного шума знаменатель при $E = 0$ конечен и расходимость отсутствует. Это и показывает, что учет, быть может и малого, естественного шума приводит к качественному изменению характера распределения и к физически корректному результату. Тем самым снимается известная трудность при расчете флуктуаций в генераторе с флуктуирующими параметрами.

16. Симметризованный генератор. Распределение координаты и скорости

Установим теперь более общее уравнение Фоккера–Планка для функции распределения $f(x, v, t)$. Для этого вводим соответствующие источники Ланжевена в динамические уравнения (14.1). Напомним, что энергия E выражается через переменные x и v равенством (14.2). Для перехода к уравнению Фоккера–Планка используем снова способ, описанный в разделе 3. В результате приходим к уравнению

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x, v, t)}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} - \omega_0^2 x \frac{\partial f}{\partial x} = \\ = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial v} \left(D(E) \frac{\partial f}{\partial v} \right) + \frac{1}{\omega_0^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(D(E) \frac{\partial f}{\partial x} \right) \right] + \\ + \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial}{\partial v} [(-\alpha + \beta E)vf] + \frac{\partial}{\partial x} [(-\alpha + \beta E)xf] \right\}. \end{aligned} \quad (16.1)$$

Чтобы перейти от него к прежнему уравнению (14.8), надо использовать соотношение между функциями распределения $f(E, t)$, $f(x, v, t)$.

Нелинейный коэффициент диффузии находим из условия существования распределения Гиббса для осциллятора, когда коэффициент $\alpha_f = 0$. Он определяется выражением, аналогичным (14.11),

$$D(E) = D \left(1 + \frac{\beta}{\gamma} E \right), \quad E = \frac{1}{2} (v^2 + \omega_0^2 x^2). \quad (16.2)$$

Стационарное решение уравнения (16.1) имеет вид

$$f_0(x, v, \alpha_f) = C \exp \left(- \frac{H_{\text{eff}}(x, v)}{kT} \right),$$

$$H_{\text{eff}} = E - \frac{\alpha_f}{\beta} \ln \left(1 + \frac{\beta}{\gamma} E \right). \quad (16.3)$$

В равновесном состоянии (при $\alpha_f = 0$) оно совпадает с каноническим распределением Гиббса.

17. Н-теорема для генератора Ван-дер-Поля

Представим распределение (16.3) в форме

$$f_0(x, v, \alpha_f) = \exp \frac{F_{\text{eff}} - H_{\text{eff}}(x, v, \alpha_f)}{kT}. \quad (17.1)$$

Здесь T — не эффективная, а истинная температура термостата. Вводим снова функционал, определяемый разностью неравновесных свободных энергий состояния в момент t и стационарного состояния:

$$A_F(t) = F(t) - F_{\text{eff}} = kT \int \ln \frac{f(x, v, t)}{f_0(x, v, \alpha_f)} f(x, v, t) dx dv \geq 0. \quad (17.2)$$

Находим с помощью уравнения Фоккера–Планка (16.1) производную введенного функционала. Она определяется выражением, аналогичным (12.13). Таким образом, A_F есть функционал Ляпунова.

Приведем соответствующие результаты для более простого уравнения (14.8). Они понадобятся нам ниже при оценке максимально допустимого шага дискретного времени при численном решении уравнения Фоккера–Планка. Функционал Ляпунова удовлетворяет двум неравенствам

$$A_F = F(t) - F(T, \alpha_f) = kT \int_0^\infty \ln \frac{f(E, t)}{f_0(E, \alpha_f)} f(E, t) \geq 0, \quad (17.3)$$

$$\frac{dA_F}{dt} = -kT \int_0^\infty D(E) E f \left(\frac{\partial}{\partial E} \ln \frac{f(E, t)}{f_0(E, \alpha_f)} \right)^2 dE \equiv -\sigma_F \leq 0. \quad (17.4)$$

Здесь введены обозначения σ_F для аналога производства энтропии. Стационарное решение f_0 определяется выражением (14.11).

Введенный таким образом функционал Ляпунова определяется разностью неравновесных свободных энергий. Мы уже отмечали, что функционал A_F может служить мерой удаленности от стационарного состояния. Эта информация, однако, недостаточна в общем случае для ответа на вопрос о том, является ли рассматриваемая временная эволюция процессом самоорганизации. Для этого надо ввести соответствующий функционал, который определяется разностью энтропий стационарного и текущего неравновесных состояний.

При описании процесса эволюции с помощью функции распределения $f(E, t)$ для введения функционала A_S надо перейти к перенормированному распределению $\tilde{f}(E, t)$. Перенормировка осуществляется на основе условия неизменности средней эффективной функции Гамильтона (14.11) в процессе временной эволюции к стационарному состоянию. Это условие выражается следующим равенством:

$$\int_0^\infty H_{\text{eff}}(E, \alpha_f) \tilde{f}(E, t) dE = \int_0^\infty H_{\text{eff}}(E, \alpha_f) f_0(E, \alpha_f) dE. \quad (17.5)$$

Естественно, что в процессе временной эволюции к стационарному состоянию по уравнению Фоккера–

Планка (14.8) это условие не выполняется. Чтобы удовлетворить ему, надо ввести температуру \tilde{T} , которая является функционалом от распределения $\tilde{f}(E, t)$:

$$\tilde{T}\{f\} = \int \frac{(-\alpha + \beta E)^2 E}{\gamma + \beta E} \tilde{f} dE \left\{ \int \frac{d}{dE} [(-\alpha + \beta E) E] \tilde{f} dE \right\}^{-1}. \quad (17.6)$$

Перенормированное распределение удовлетворяет нелинейному по \tilde{f} уравнению:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial E} \left(\tilde{D}(E) E \frac{\partial \tilde{f}}{\partial E} \right) + \frac{\partial}{\partial E} [(-\alpha + \beta E) E \tilde{f}], \\ \tilde{D}(E) &= k \tilde{T}\{\tilde{f}\} (\gamma + \beta E). \end{aligned} \quad (17.7)$$

В стационарном состоянии решение этого уравнения совпадает с (14.11), а температура \tilde{T} — с температурой термостата T .

После перенормировки можно ввести функционал, определяемый разностью энтропий:

$$A_S = S_0 - \tilde{S}(t) = k \int_0^\infty \ln \frac{\tilde{f}(E, t)}{f_0(E, \alpha_f)} \tilde{f}(E, t) dE \geq 0. \quad (17.8)$$

С помощью уравнения (17.7) можно убедиться, что в процессе временной эволюции к стационарному состоянию этот функционал монотонно уменьшается:

$$\frac{dA_S}{dt} = -k \int_0^\infty \tilde{D}(E) E f \left(\frac{\partial}{\partial E} \ln \frac{\tilde{f}(E, t)}{f_0(E, \alpha_f)} \right)^2 dE \equiv -\sigma \leq 0. \quad (17.9)$$

Полученные два неравенства показывают, что разность неравновесных энтропий определяет именно функционал Ляпунова. Они также показывают, что стационарное состояние при любых значениях параметра обратной связи является устойчивым.

Таким образом, для уравнения (17.7) доказана именно Н-теорема, аналогичная Н-теореме Больцмана для разреженного газа. При этом возникает, однако, естественный вопрос.

Ведь для уравнения Больцмана функционал Ляпунова A_S является естественной характеристикой. Это обусловлено тем, что сохранение средней энергии в процессе эволюции есть свойство уравнения Больцмана. Здесь же ситуация существенно иная. Для выполнения условия (17.5) пришлось изменить структуру исходного уравнения (14.8). Оно заменено на уравнение (17.7). Тем самым Н-теорема доказана для другой системы. Какова же ее ценность для исходной задачи? Быть может, ограничиться соответствующими результатами для функционала A_F ? Для таких вопросов есть, конечно, основание. Однако функционал Ляпунова A_S для рассматриваемого примера основан все же на исходном уравнении, так как в него входит его стационарное решение f_0 . Поэтому анализ относительной степени упорядоченности на основе Н-теоремы, несомненно, полезен. Мы продемонстрируем это в явном виде в следующем разделе на примере эволюции стационарных состояний в ходе изменения параметра обратной связи.

18. Самоорганизация в генераторе Ван-дер-Поля. S-теорема

В работах [17, 39, 40] критерий относительной степени упорядоченности состояний открытых систем был сформулирован в виде S-теоремы. Здесь для иллюстрации конкретизируем его на примере эволюции стационарных состояний генератора Ван-дер-Поля в ходе изменения параметра обратной связи, который естественно принять здесь за управляющий параметр.

Вернемся к стационарному решению (14.11) и запишем его для трех выделенных состояний.

1. Параметр $\alpha_f = 0$. $f_{(1)}$ — распределение Больцмана

$$f_{(1)} = \frac{1}{kT} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right). \quad (18.1)$$

2. Порог генерации. Этому состоянию отвечает значение $\alpha_f = \gamma$. Предполагаем, что параметр нелинейности является малым, и производим разложение по параметру $kT\beta/\gamma$. В результате получаем выражение

$$f_{(2)} = \sqrt{\frac{2\beta}{\pi\gamma kT}} \exp\left(-\frac{\beta E^2}{2\gamma kT}\right). \quad (18.2)$$

3. Режим развитой генерации. Приходим к распределению Гаусса

$$f_{(3)} = \sqrt{\frac{1}{2\pi \langle (\delta E)^2 \rangle}} \exp\left[-\frac{(E - \alpha\beta^{-1})^2}{2 \langle (\delta E)^2 \rangle}\right]. \quad (18.3)$$

Относительная дисперсия энергии определяется формулой (14.16). С помощью приведенных распределений находим средние значения энергии:

$$\langle E \rangle_{(1)} = kT, \quad \langle E \rangle_{(2)} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\gamma kT}{\beta}, \quad \langle E \rangle_{(3)} = \frac{\alpha}{\beta}. \quad (18.4)$$

Найдем также и соответствующие значения энтропии

$$\begin{aligned} S_{(1)} &= \ln kT + 1, \quad S_{(2)} = \ln \left(\frac{\pi\gamma kT}{2\beta} \right)^{1/2} + \frac{1}{2}, \\ S_{(3)} &= \ln \sqrt{\frac{2\pi kT}{\beta}} (\gamma + \alpha) + \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (18.5)$$

Рассмотрим следствия полученных формул.

Замечаем прежде всего, что при принятом условии $\beta kT/\gamma \ll 1$ по мере перехода в область развитой генерации энтропия возрастает:

$$S_{(1)} < S_{(2)} < S_{(3)}. \quad (18.6)$$

Возрастает, тем самым, мера неупорядоченности по мере развития генерации. Однако физическая интуиция подсказывает обратное — по мере развития генерации степень упорядоченности возрастает. В чем же дело?

Для ответа на вопрос сравним значения средней энергии для трех выделенных состояний. Из формул (18.4) следуют неравенства

$$\langle E \rangle_{(1)} < \langle E \rangle_{(2)} < \langle E \rangle_{(3)}. \quad (18.7)$$

Мы видим, что по мере развития генерации возрастает не только энтропия, но и средняя энергия. Согласно

же S-теореме для сравнения степени упорядоченности различных состояний надо использовать значения энтропии, отнесенные к одинаковым значениям средней энергии. Для этого надо произвести соответствующую перенормировку.

В рассматриваемом примере за состояние "физического хаоса" естественно выбрать состояние "1", отвечающее равновесному состоянию. Поскольку при этом функция распределения имеет вид (18.1), то эффективная функция Гамильтона совпадает с энергией E , т.е.

$$H_{\text{эф}}(E, \alpha_f) = E. \quad (18.8)$$

Таким образом, перенормировка проводится при заданном значении средней энергии.

Напомним в связи с этим равенство (13.9), которое служило дополнительным условием для перенормировки распределения по скоростям при использовании критерия "S-теорема". Это уравнение с учетом равенства (18.8) принимает теперь следующий вид:

$$k\tilde{T}(\alpha_f) = \int_0^{\infty} E\tilde{f}_0(E, \alpha_f = 0) dE = \int_0^{\infty} E f(E, \alpha_f) dE. \quad (18.9)$$

Оно позволяет найти значение эффективной температуры в зависимости от управляющего параметра α_f :

$$\tilde{T} = \tilde{T}(\alpha_f)$$

при "начальном условии"

$$\tilde{T}(\alpha_f)|_{\alpha_f=0} = T. \quad (18.10)$$

Используем это уравнение. За основу берем состояния "1" и производим попарное сравнение: состояния "1" с "2" при $\langle E \rangle_{(1)} = \langle E \rangle_{(2)}$, а затем "1" с "3" при условии $\langle E \rangle_{(1)} = \langle E \rangle_{(3)}$. Соответствующие перенормированные температура и разность энтропий определяются следующими выражениями:

$$k\tilde{T}_{(1)} = \left(\frac{2}{\pi} \frac{\gamma kT}{\beta}\right)^{1/2} > kT, \quad \tilde{S}_{(1)} - S_{(2)} = \ln \frac{2}{\pi} + \frac{1}{2} > 0. \quad (18.11)$$

Аналогичные результаты для второй пары:

$$k\tilde{T}_{(1)} = \frac{\alpha}{\beta} > \sqrt{\frac{2}{\pi} \frac{\gamma kT}{\beta}} > kT, \quad (18.12)$$

$$\tilde{S}_{(1)} - S_{(3)} = \ln \sqrt{\frac{1}{2\pi\varepsilon} \frac{\gamma + \alpha}{\gamma}} > \ln \frac{2}{\pi} + \frac{1}{2} > 0, \quad \varepsilon = \frac{\beta\gamma kT}{\alpha^2} \ll 1. \quad (18.13)$$

Напомним, что ε — характерный малый параметр для области развитой генерации.

Из приведенных результатов для трех выделенных состояний следует, что эффективная температура (18.9) монотонно возрастает, а энтропия монотонно уменьшается по мере увеличения параметра обратной связи α_f . Тем самым, добавляемое в состояние "1" неупорядоченное движение при подогреве до температуры \tilde{T} переходит в состояниях "2", "3" в более упорядоченное движение, так как энтропии этих состояний при той же средней энергии меньше. Это и дает основание сделать вывод, что процесс развития генерации представляет

пример процесса самоорганизации. Более того, эти результаты служат и подтверждением правильности выбора параметра обратной связи в качестве управляющего параметра.

Отметим, что критерий относительной упорядоченности "S-теорема" был введен именно на примере генератора Ван-дер-Поля [39].

Энтропия Шеннона — "S-информация"

Вернемся к формулам (18.5), определяющим значения энтропии (или информации) Шеннона

$$S \equiv I = - \int \ln f(E) f(E) dE \quad (18.14)$$

для трех выделенных стационарных состояний генератора Ван-дер-Поля. Для сопоставления с приведенными результатами по критерию S-теоремы сравним разности энтропий Шеннона, например, для состояний "3" и "2" — состояний развитой генерации и на пороге генерации.

Из формул (18.5) следует, что

$$S_{(3)} - S_{(2)} \equiv I_{(3)} - I_{(2)} = \ln \left(2 \frac{\gamma + \alpha}{\gamma}\right) > 0. \quad (18.15)$$

Таким образом, энтропия и информация по мере развития генерации возрастают. Если этот результат трактовать как увеличение неупорядоченности, то мы приходим в противоречие как с физической интуицией, так и с результатами расчета по критерию S-теоремы.

Есть, однако, и другая возможность толкования этого результата, которая является более естественной с точки зрения теории информации. Именно, в процессе развития генерации увеличивается информация о системе. В данном примере состояние развитой генерации является более информативным. Однако придание ясного физического содержания такой трактовке затруднительно.

19. Генератор с инерционной нелинейностью

Динамическое движение в генераторе Ван-дер-Поля является двухмерным, так как описывается системой двух обыкновенных уравнений первого порядка — уравнениями (13.1) без источника Ланжевена. В таких системах имеются лишь *простые аттракторы* — состояние покоя и предельный цикл.

В трехмерных системах могут существовать и так называемые *странные аттракторы*. Так называются области фазового пространства, в которых все траектории динамически неустойчивы, т.е. имеет место экспоненциальное расхождение траекторий. Следствием этого является положительность K-энтропии (энтропии Колмогорова–Крылова–Синяя).

Естественно желание исследовать процессы в более сложных генераторах, динамические процессы в которых описываются, по меньшей мере, тремя дифференциальными уравнениями первого порядка. К их числу относятся так называемые генераторы с инерционной нелинейностью. Такого рода генератор был впервые предложен К.Ф. Теодорчиком [23, 43].

В генераторе Теодорчика в колебательный контур введено термосопротивление, благодаря которому и возникает инерционная нелинейность. Это приводит к

появлению новых режимов колебаний. Однако в нем нет странных аттракторов. Для генерации сложных движений в работе [44] был предложен модифицированный генератор с инерционной нелинейностью. В нем инерционный преобразователь входит в цепь обратной связи. При этом характер движения в генераторе существенно зависит от степени асимметрии нелинейной характеристики этого преобразователя. Наиболее полный "спектр" бифуркаций наблюдается в таком генераторе при использовании полупериодного детектора.

Странный аттрактор впервые был фактически обнаружен в классической работе Э. Лоренца [45]. Однако как математический объект он был введен в работе Д. Рюэля и Ф. Такенса [46].

В связи с открытием странного аттрактора (Лоренц, 1963) интересно отметить следующее. "Странные" нерегулярные решения нелинейных уравнений того же типа, что и уравнения Лоренца, были обнаружены независимо А. Грасюком и А. Ораевским в 1964 г. [47] при исследовании колебаний в молекулярном генераторе. Этому, однако, не было уделено внимание, так как для молекулярных генераторов такого рода сложные нерегулярные движения не представлялись интересными. Напротив, появление сложных — хаотических режимов для Лоренца было весьма существенным, поскольку пролиvalo свет на причины практической невозможности долгосрочного прогноза погоды. Современное состояние проблемы определения пределов предсказуемости в системах со сложным поведением отражено в работах [48].

Генератор с инерционной нелинейностью Анищенко–Астахова оказался весьма удобным прибором для экспериментального исследования сложных, "хаотических", движений в относительно простых динамических системах. В нем было обнаружено, что по мере увеличения величины обратной связи (при фиксированном значении параметра инерционности) после возникновения предельного цикла наблюдается последовательность удвоения периода колебаний по схеме Фейгенбаума [49]. За критической точкой Фейгенбаума возникает странный аттрактор со сложным чередованием областей хаоса и порядка. При этом было продемонстрировано хорошее соответствие результатов физического и численного экспериментов. В последующие годы проводилось тщательное исследование флуктуационных процессов, "броуновского движения", в таких генераторах, обусловленного как естественными, так и внешними шумами.

Для количественной оценки относительной степени упорядоченности был использован критерий "S-теорема" [50]. Расчет энтропии проводился по описанной выше схеме. Перенормировка функции распределения осуществлялась при заданной интенсивности колебаний (аналог условия (18.9)). Исследовалась область значений параметра обратной связи до критической точки Фейгенбаума.

Результаты расчета показали, что по мере приближения к критической точке перехода в область странного аттрактора, т.е. в процессе удвоения периода колебаний, перенормированная на заданное значение интенсивности колебаний энтропия уменьшалась. Это свидетельствует о возрастании степени упорядоченности. Иными словами, последовательность удвоения периода можно рассматривать как процесс самоорганизации. Более детальные исследования показывают, что в районах

точек бифуркации уменьшение энтропии происходит немонотонно.

Существенно для дальнейшего, что как каскад бифуркаций удвоения периода колебаний, так и основные закономерности в характере бифуркаций в области странного аттрактора можно описать на основе так называемого *логистического уравнения*

$$x_{n+1} = \alpha(1 - x_n)x_n, \quad 0 \leq \alpha \leq 4, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (19.1)$$

которое представляет одномерный процесс в дискретном времени с единичным шагом. Его называют также *уравнением последования*, поскольку оно может описывать последовательность положений следов траектории рассматриваемого процесса на секущей плоскости.

Таким образом, одномерное уравнение в дискретном времени моделирует существенные свойства системы трех дифференциальных уравнений. Это оказывается возможным благодаря тому, что размерность фазового пространства, заполняемого траекторией, близка к двум с малой дробной частью.

Логистические уравнения были впервые введены для исследования поведения биологических объектов. Мы увидим, что использование такого рода уравнений открывает путь для построения двухмерных и одномерных моделей сложного движения. При этом возможность сложного движения будет обусловлена не выходом траектории с плоскости в трехмерное пространство, как в генераторе с инерционной нелинейностью, а более сложной структурой нелинейности.

Вернемся к логистическому уравнению. При значениях параметра α в пределах $3 \leq \alpha \leq 4$ оно описывает очень сложное движение, отвечающее состоянию так называемого *динамического хаоса*. Его можно характеризовать соответствующими функциями распределения. Наиболее хаотическое состояние достигается при $\alpha = 4$. В общем случае функции распределения $f(x, \alpha)$ могут быть найдены лишь путем численного эксперимента.

Для состояния наибольшего хаоса ($\alpha = 4$) это распределение было установлено аналитически в работе Улама и Неймана. Оно имеет вид

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \sqrt{x(1-x)}, \quad \int_0^1 f(x) dx = 1. \quad (19.2)$$

Его вывод можно найти в [17, 51, 52].

Итак, на основе логистического уравнения (19.1) возможно моделирование сложных движений, которые описываются, например, динамическими уравнениями генератора с инерционной нелинейностью. Возникает, естественно, вопрос описания броуновского движения в таких системах. При этом, как и выше, важен учет не только естественных источников шума, отражающих "атомарную" структуру отдельных элементов генератора, но и внешних шумов, с помощью которых возможно управление сложным процессом генерации.

Такого рода задачи весьма сложны, так как в нелинейных системах, как мы видели, сами характеристики естественного шума зависят от нелинейных свойств системы. В связи с этим полезно сначала наметить путь решения более простой задачи. Именно, рассмотрим вопрос о структуре уравнения Ланжевена, которое при пренебрежении шумами совпадает с логистическим уравнением (19.1).

Мы увидим, что на этом пути открывается и новая возможность построения иерархии математических моделей генераторов, в которых возможны последовательности бифуркаций значений энергии предельного цикла. Именно с этой задачи мы и начнем исследование стохастических процессов в системах со сложным поведением.

20. Ветвления значений энергии предельного цикла. Генераторы с мультистабильными стационарными состояниями

Выше было отмечено, что переход к "динамическому хаосу" в генераторе с инерционной нелинейностью может быть качественно описан на основе логистического уравнения.

Здесь мы покажем, что на основе этого же уравнения может быть построена модель обобщенного генератора Ван-дер-Поля, в котором по мере увеличения параметра обратной связи возможен каскад бифуркаций значений энергии предельного цикла.

Введем безразмерные переменные. Выбор масштабов при этом не является, конечно, однозначным. Для генератора естественным временным интервалом является период колебаний $T = 2\pi/\omega_0$. Тогда безразмерные переменные можно ввести следующим образом:

$$\begin{aligned} t' &= \omega_0 t, & \alpha' &= \alpha \omega_0^{-1}, & E' &= \beta E \omega_0^{-1}, \\ D' &= \beta D \omega_0^{-2} = \gamma' k T', \end{aligned} \quad (20.1a)$$

Во втором случае за масштаб времени принимаем время релаксации $1/\gamma$:

$$\begin{aligned} t' &= \gamma t, & \alpha' &= \alpha \gamma^{-1}, & E' &= \beta E \gamma^{-1}, \\ D' &= D \beta \gamma^{-2} = k T \beta \gamma^{-1} = k T'. \end{aligned} \quad (20.1b)$$

Вид уравнения для энергии E' не зависит явно от выбора масштабов при переходе к безразмерным переменным (знак ' опускаем):

$$\frac{dE}{dt} = (\alpha - E)E. \quad (20.2)$$

Различие становится, однако, существенным при замене дифференциального уравнения соответствующим разностным уравнением. Основной временной масштаб будет определять в этом случае единичный шаг в дискретном времени. Различие существенно и при учете флуктуаций.

Обобщим уравнение (20.2) таким образом, чтобы по мере увеличения параметра обратной связи возникла последовательность ветвлений значений энергии предельного цикла. Для этого заменим дифференциальное уравнение (20.2) соответствующим уравнением в дискретном времени с единичным шагом $\Delta = 1$ (для переменных (20.1a) шаг отвечает периоду колебаний, а для (20.1b) — времени релаксации $1/\gamma$). В результате приходим к логистическому уравнению:

$$\begin{aligned} E_{n+1} &= (\alpha + 1)E_n - E_n^2 \equiv F(E_n), & 0 &\leq \alpha + 1 \leq 4, \\ 0 &\leq E \leq 4. \end{aligned} \quad (20.3)$$

После k -й итерации оно принимает вид:

$$E_{n+k} = F^{(k)}(E_n). \quad (20.4)$$

Вернемся от него к дифференциальному уравнению. Используем для этого определение последовательности производных:

$$\frac{E_{n+k} - E_n}{k} \longleftrightarrow \frac{dE}{dt}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (20.5)$$

В результате приходим к последовательности дифференциальных уравнений:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{1}{k} (F^{(k)}(E) - E), \quad k = 1, 2, \dots \quad (20.6)$$

Рассмотрим первые уравнения этой последовательности. При $k = 1$ мы возвращаемся к исходному уравнению (20.2). При $k = 2$ получаем новое уравнение:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{1}{2} (\alpha - E)E[E^2 - (\alpha + 2)E + \alpha + 2]. \quad (20.7)$$

Здесь возможны четыре стационарных состояния:

$$\begin{aligned} E_1 &= 0 \quad \text{при } \alpha \leq 0; & E_2 &= \alpha \quad \text{при } 0 \leq \alpha \leq 2, \\ E_{3,4} &= \frac{\alpha + 2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\alpha + 2}{2}\right)^2 - (\alpha + 2)} \quad \text{при } \alpha \geq 2. \end{aligned} \quad (20.8)$$

Таким образом, при $\alpha = 2$ происходит ветвление значений энергии предельного цикла. Возникает, тем самым, бистабильное состояние. В общем случае в области значений α до критической точки Фейгенбаума число стационарных состояний равно 2^k . При этом возможные значения энергии предельного цикла совпадают со значениями энергии в неподвижных точках логистического уравнения (20.3).

Соответствующим образом обобщаются и уравнения (14.1) для функций $x(t)$, $v(t)$. Для этого в них надо сделать подстановку:

$$\alpha - E \rightarrow \frac{1}{k} \frac{F^{(k)}(E) - E}{E}. \quad (20.9)$$

Решение уравнений для $x(t)$, $v(t)$ дается по-прежнему формулами (14.4), но для $E(t)$ надо использовать решение уравнения (20.6).

Рассмотрим теперь соответствующие уравнения Ланжевена и Фоккера–Планка. Они могут быть записаны по аналогии с уравнениями (14.6), (14.8). Первое из них имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &= \frac{1}{k} (F^{(k)}(E) - E) + \frac{1}{2} \frac{d}{dE} (D_{(k)}(E)E) + \\ &+ \sqrt{D_{(k)}(E)E} y(t). \end{aligned} \quad (20.10)$$

Моменты источника $y(t)$ определяются прежними формулами (14.7). Соответствующее уравнение Фоккера–Планка можно представить в форме:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial E} \left(D_{(k)}(E)E \frac{\partial f}{\partial E} \right) + \frac{\partial}{\partial E} \left[-\frac{1}{k} (F^{(k)}(E) - E) f \right]. \quad (20.11)$$

Нелинейный коэффициент диффузии находим снова из условия, что при отсутствии обратной связи, т.е. при $\alpha_f = 0$, система находится в состоянии равновесия с распределением Больцмана (18.1). С учетом этого получаем следующее выражение:

$$D_{(k)}(E) = \frac{1}{k} \left(E - F^{(k)}(E) \right) \Big|_{\alpha_f=0}, \quad D_{(1)}(E) = kT'(\gamma' + E). \quad (20.12)$$

В размерных переменных (см. (20.1а, б)) выражение для $D_{(1)}$ совпадает с (14.10). Соответственно этому уравнение (20.11) при $k = 1$ совпадает с уравнением Фоккера–Планка (14.8).

Стационарное решение уравнения (20.11) имеет вид

$$f_0(E, \alpha_f) = C \exp \left(\frac{1}{k} \int_0^E \frac{F^{(k)}(E') - E'}{D_{(k)}(E')} dE' \right). \quad (20.13)$$

Естественно, что с увеличением номера итерации структура распределения усложняется, так как растет число максимумов распределения. Их положения определяются корнями уравнения

$$E_{\max} = F^{(k)}(E_{\max}) \quad (20.14)$$

и, следовательно, совпадают с положениями стационарных точек логистического уравнения (20.4).

Проиллюстрируем сказанное на простейшем примере, когда $k = 2$, а коэффициент диффузии постоянен, т.е. $D_{(k)} = D = \text{const}$. Последнее означает, что шум представляется внешним (заданным). При этом, однако, шум не является параметрическим, поэтому здесь нет трудностей, которые были в разделе 15.

Напомним, что в динамическом режиме при $k = 2$ значение $\alpha = 2$ есть точка бифуркации, в которой происходит ветвление энергии предельного цикла (см. решение (20.8)).

Для наглядности выделим три частных случая:

1. Область ниже точки ветвления ($\alpha = 2$). В приближении Гаусса в рассматриваемом случае стационарное решение (20.13) принимает вид

$$f_0(E) = \sqrt{\frac{1}{2\pi D} \frac{2-\alpha}{2}} \exp \left[-\frac{1}{2D} \frac{2-\alpha}{2} (E-\alpha)^2 \right], \quad 0 \leq \alpha < 2. \quad (20.15)$$

Здесь и ниже в условиях нормировки нижний предел $E = 0$ заменен на $E = -\infty$. Это оправдано при условии $\varepsilon = D\beta/\alpha^2 \ll 1$. Из этого распределения следует, что при приближении к точке ветвления — критической точке, дисперсия флуктуаций энергии растет, как $2/(2-\alpha)$, т.е. по закону Кюри для рассматриваемого неравновесного фазового перехода.

2. Критическая точка $\alpha = 2$. Распределение (20.13) принимает вид

$$f_0(E) = \frac{1}{\Gamma(1/4)} \sqrt{\frac{2}{D}} \exp \left[-\frac{(E-\alpha)^4}{8D} \right], \quad \alpha = 2. \quad (20.16)$$

Относительная дисперсия здесь пропорциональна не ε , а $\sqrt{\varepsilon}$.

3. Область выше точки ветвления ($\alpha > 2$). Распределение при этом имеет два максимума. Парциальные распределения Гаусса имеют вид:

$$f_{1,2} = \sqrt{\frac{\alpha-2}{2\pi D}} \exp \left[-\frac{\alpha-2}{2D} (E-E_{1,2})^2 \right], \quad E_{1,2} = 2 \pm \sqrt{\alpha-2}. \quad (20.17)$$

При приближении к точке ветвления сверху относительная дисперсия также возрастает по закону Кюри, но с фактором $1/(\alpha-2)$.

В заключение настоящего раздела покажем, что описанный переход через критическую точку является по критерию "S-теорема" процессом самоорганизации.

При использовании для состояний ниже и выше критической точки приближений Гаусса имеет место скачок энтропии. Обозначим значение энтропии ниже критической точки через S_- , а выше — через S_+ . Тогда разность энтропий в приближении Гаусса равна

$$S_- - S_+ = \ln \sqrt{2} > 0. \quad (20.18)$$

Таким образом, при переходе через критическую точку по мере увеличения α_f энтропия уменьшается. Поскольку вблизи критической точки, когда $|\alpha-2| \ll 2$, средние энергии совпадают ($\langle E \rangle_- = \langle E \rangle_+$), то согласно S-теореме разность энтропий может служить количественной мерой увеличения степени упорядоченности при переходе через критическую точку. Это и показывает, что переход в область бистабильности по энергии представляет пример процесса самоорганизации.

Роль *параметра порядка* в рассматриваемом неравновесном фазовом переходе играет разность средних энергий двух ветвей:

$$\eta = \langle E_1 \rangle - \langle E_2 \rangle = 2\sqrt{\alpha-2}, \quad \alpha \geq \alpha_{\text{cr}} = 2. \quad (20.19)$$

Отсюда следует, что в критической точке параметр порядка равен нулю.

Приведенные результаты получены в приближении Гаусса. По этой причине они вполне аналогичны соответствующим результатам теории фазовых переходов второго рода, предложенной Ландау.

21. Генераторы в дискретном времени. Бифуркации энергии предельного цикла и частоты колебаний

Напомним, что на основе логистического уравнения (20.3) можно описать в дискретном времени переход к состоянию динамического хаоса через последовательность удвоения периода. Напротив, на основе совокупности дифференциальных уравнений (20.6) можно описать последовательность ветвлений энергии предельного цикла. При статистическом описании для стационарного распределения (20.13) этому каскаду бифуркаций соответствует появление новых максимумов при значениях E_{\max} , которые совпадают с положениями неподвижных точек логистического уравнения на k -шаге итерационного процесса.

При достаточно больших значениях числа k в стационарном распределении (20.13) для области значений α_f , в которой по логистическому уравнению существует динамический хаос, можно ожидать соответствующего хаотического поведения в расположении максимумов стационарного распределения.

Найдем теперь обобщенное логистическое уравнение, которое единым образом описывает комбинации двух каскадов бифуркаций: ветвлений значений энергии предельного цикла и бифуркации удвоения периода [17, 53, 54].

Вернемся для этого к логистическому уравнению (20.4). Заменой E_{n+k} на E_{n+1} приведем его к виду

$$E_{n+1} = F^{(k)}(E_n), \quad k = 1, 2, \dots \quad (21.1)$$

В результате получается семейство логистических уравнений. При $k = 1$ мы возвращаемся к исходному уравнению (20.3). Его решение хорошо известно. Последовательность бифуркаций удвоения периода начинается в точке $\alpha = 2$ и завершается в критической точке при $\alpha_{cr} = 2, 58$. При значении $\alpha = \sqrt{8}$ появляется край наиболее широкого окна упорядоченности. Значению $\alpha = 3$ отвечает состояние наиболее развитого "динамического хаоса".

При значении $k = 2$ бифуркационная картина существенно меняется. В точке $\alpha = 2$ теперь происходит ветвление энергии предельного цикла — возникает бистабильность. В зависимости от начальных условий система попадает либо на верхнюю, либо на нижнюю ветви. Процесс удвоения периода начинается теперь лишь в точке $\alpha = \sqrt{6}$, когда для логистического уравнения происходит уже учетверение периода. В точке $\alpha = 2, 6785$ происходит фазовый переход "хаос – хаос". В результате возникает состояние "динамического хаоса", присущее логистическому уравнению.

Для сравнения напомним, что дифференциальное уравнение (20.6) при $k = 2$ описывает лишь процесс ветвления значений энергии. Бифуркаций удвоения периода здесь нет.

Рассмотрим, наконец, случай $k = 3$.

Для дифференциального уравнения (20.6) предельный цикл с $E = \alpha$ теперь устойчив до значения $\alpha = \sqrt{8}$. В этой точке возникают три стационарных состояния с разными энергиями. Существенно меняется и характер бифуркационной диаграммы обобщенного логистического уравнения (21.1). Сравнение бифуркационных диаграмм, соответственно, при $k = 1$ и $k = 3$ показывает различие состояний в пределах наиболее широкого окна упорядоченности. Именно, при $k = 1$ видны состояния, отвечающие всем трем значениям энергии, а при $k = 3$ — только наибольшему значению энергии. Это означает, что при $k = 3$ лишь одно из трех состояний имеет достаточную для наблюдения область притяжения траекторий.

Можно показать, в какой мере это различие фиксируется разными критериями упорядоченности. Оказывается, что при $k = 1$ и $k = 3$ значения энтропии Шеннона для состояний в окне прозрачности заметно отличаются. В то же время значения показателя Ляпунова для тех же состояний практически неразличимы.

Покажем теперь возможность использования функционала Ляпунова A_F броуновского движения в генераторе Ван-дер-Поля для оценки возможности перехода от непрерывного времени к дискретному.

22. Критерий устойчивости решения уравнения Фоккера–Планка при переходе к дискретному времени на основе Н-теоремы

Вернемся к уравнению Фоккера–Планка (14.8) для функции распределения значений энергии колебаний. Оно описывает, в частности, процесс временной эволюции к стационарному состоянию. Для численных расчетов его следует заменить соответствующим уравнением в дискретном времени с некоторым шагом Δ . Соответ-

ствующую функцию распределения обозначим через $f(E, n)$. Тогда вместо (14.8) получим уравнение

$$\frac{f(E, n + \Delta) - f(E, n)}{\Delta} = \frac{\partial}{\partial E} \left(D(E) E \frac{\partial f}{\partial E}(E, n) \right) + \frac{\partial}{\partial E} [(-\alpha + \beta E) E f(E, n)]. \quad (22.1)$$

Заметим, что формально стационарные решения уравнений (14.8), (22.1), соответственно в непрерывном и дискретном времени, совпадают и определяются выражением (14.11). Возникает, однако, следующий вопрос: являются ли эти стационарные решения устойчивыми? Для ответа на него надо исследовать поведение малых отклонений от стационарного решения $f_0(E, \alpha_f)$:

$$f_1(E, t) = f(E, t) - f_0(E), \quad f_1(E, n) = f(E, n) - f_0(E). \quad (22.2)$$

Сначала дадим ответ на этот вопрос для уравнения в непрерывном времени. Используем для этого "Н-теорему". В теории броуновского движения она выражается двумя неравенствами (17.3), (17.4) для функционала Ляпунова A_F , который определяется разностью неравновесных свободных энергий текущего и стационарного состояний.

Подставим $f = f_0 + f_1$ в выражение (17.3) для разности свободных энергий и произведем разложение по f_1 . Оставляем основной вклад. Тогда для производной функционала Ляпунова A_F получим выражение

$$\frac{d}{dt} (F - F_0) = \frac{kT}{2} \frac{d}{dt} \int_{f_0}^1 f_1^2 dE \leq 0. \quad (22.3)$$

Отсюда следует, что функция f_1 убывает со временем и, следовательно, стационарное решение уравнения Фоккера–Планка (14.8) устойчиво.

Рассмотрим аналогичную задачу для дискретного времени, когда уравнение Фоккера–Планка имеет вид (22.1).

Введем некоторый фактор q , который связывает функции f_1 в два соседних момента дискретного времени с шагом Δ ,

$$f_1(E, n + \Delta) = q f_1(E, n). \quad (22.4)$$

Используем теперь введенное в (17.4) определение "производства энтропии" $\sigma_F \geq 0$. При малых f_1 его можно представить в виде

$$\sigma_F = kT \int_0^\infty \frac{DE}{f_0} \left(\frac{\partial f_1}{\partial E} \right)^2 dE \geq 0. \quad (22.5)$$

Производную по времени в выражении (22.3) заменим на конечную разность:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (F - F_0) &= kT \int_{f_0}^{f_1} \frac{\partial f_1}{\partial t} dE \rightarrow \\ &\rightarrow kT \int \frac{f_1(E, n)}{f_0} \frac{f_1(E, n + \Delta) - f_1(E, n)}{\Delta} dE = \\ &= \frac{kT}{\Delta} (q - 1) \int \frac{f_1^2(E, n)}{f_0} dE = -\sigma_F \leq 0. \end{aligned} \quad (22.6)$$

Здесь принято во внимание определение (22.4) фактора q .

Условие устойчивости — условие уменьшения функции $|f_1|$ с ростом дискретного времени накладывает на фактор q требование $|q| < 1$. Из (22.6) следует, что для выполнения этого требования необходимо и достаточно выполнение неравенства [17]:

$$|q| = \left| 1 - \Delta \frac{\sigma_F}{kT \int_{f_0}^1 f_1^2 dE} \right| \leq 1. \quad (22.7)$$

Его можно записать в более компактной форме, если использовать выражение для функционала Ляпунова A_F ,

$$|q| = \left| 1 - \frac{1}{2} \Delta \frac{\sigma_F}{A_F} \right| \leq 1, \quad A_F = \frac{kT}{2} \int_{f_0}^1 f_1^2 dE. \quad (22.8)$$

Мы видим, что критерий устойчивости стационарного решения определяется общими характеристиками термодинамики неравновесных процессов аналогом "производства энтропии" в уравнении баланса разности свободных энергий и соответствующим функционалом Ляпунова A_F .

Из критерия (22.8) следует, что область устойчивости определяется неравенствами:

$$0 \leq \frac{1}{2} \Delta \frac{\sigma_F}{A_F} \leq 2, \quad \Delta_{\max} = 4 \frac{A_F}{\sigma_F}. \quad (22.9)$$

Отсюда видно, что при произвольном по форме, но малом отклонении распределения от стационарного всегда найдется достаточно малый шаг дискретного времени, при котором стационарное распределение устойчиво.

Для конкретизации полученного критерия устойчивости зададим форму неравновесного распределения. Будем предполагать, что оно может быть получено из стационарного распределения путем вариации параметра обратной связи — управляющего параметра. Это приводит к замене эффективной функции Гамильтона в распределении (14.11): $H_{\text{eff}} \rightarrow H_{\text{eff}} + \delta\alpha_f E$.

В случае, когда коэффициент диффузии постоянен (см. (14.12)) и отклонение $\delta\alpha_f$ мало, выражения для σ_F и A_F принимают вид

$$\sigma_F = \gamma(\delta\alpha_f)^2 \langle E \rangle, \quad A_F = (\delta\alpha_f)^2 \frac{\langle (\delta E)^2 \rangle}{2kT}. \quad (22.10)$$

Они выражаются, таким образом, через среднюю энергию и дисперсию энергии по стационарному распределению. В результате условие устойчивости принимает вид

$$0 \leq \Delta \gamma kT \langle E \rangle / \langle (\delta E)^2 \rangle \leq 2. \quad (22.11)$$

Таким образом, значение максимально допустимого шага

$$\Delta_{\max} = 2 \langle (\delta E)^2 \rangle / (\gamma kT \langle E \rangle) \quad (22.12)$$

выражается через среднюю энергию и дисперсию. Оно зависит, следовательно, от значения параметра обратной связи. Для режима развитой генерации эти результаты с помощью (14.15) приводятся к виду

$$0 \leq \Delta \alpha \leq 2, \quad \Delta_{\max} = 2\alpha^{-1}. \quad (22.13)$$

Эти условия не содержат температуру, так как отвечают пределу $T \rightarrow 0$. Соответствующее распределение следует из (14.14) и имеет вид

$$f_0(E, \alpha_f) = \delta(E - \alpha\beta^{-1}), \quad \langle E \rangle = \alpha\beta^{-1}. \quad (22.14)$$

Из (22.13) следует, в частности, что при единичном шаге, т.е. при $\Delta = 1$, стационарное решение устойчиво при условии

$$0 \leq \alpha \leq 2, \quad \alpha_{\max} = 2. \quad (22.15)$$

Оно совпадает с условием устойчивости предельного цикла, когда эволюция в дискретном времени описывается с помощью логистического уравнения (20.3). Это естественно, так как при $T = 0$ само логистическое уравнение следует из уравнения Фоккера–Планка (14.8) при переходе к дискретному времени.

Можно повторить все проведенные расчеты для более сложных уравнений. Именно, рассмотреть уравнение, Фоккера–Планка (20.11) для следующего уровня — с $k = 2$. Ему отвечает стационарное решение (20.13) при $k = 2$. Оно отражает ветвление энергии предельного цикла. Ветвление возникает как раз в точке $\alpha = 2$, т.е. на границе устойчивости (22.15).

Обобщая сказанное, можно поставить вопрос об устойчивости наиболее общего стационарного распределения (20.13) при произвольных значениях номера k . При этом области, в которых справедливы динамические распределения, будут сужаться. В связи с этим все большую роль будет играть исследование области устойчивости стационарных состояний при все больших значениях k на основе Н-теоремы.

Напомним, что конечные формулы (22.13)–(22.15) получены для области развитой генерации. Рассмотрим для иллюстрации другое выделенное состояние — порог генерации. Это позволит нам увидеть, сколь сильной может быть зависимость области устойчивости от величины параметра обратной связи — управляющего параметра.

Вернемся к распределению (18.2). Из него следует, что относительная дисперсия энергии порядка единицы, а среднее значение $\langle E \rangle \sim \sqrt{D/\beta}$. С учетом этого из формулы (22.12) находим максимальное значение допустимого шага дна на пороге генерации $(\Delta_{\max})_{\text{th}} \sim \sqrt{\beta D}$. С учетом (22.13) можем теперь оценить отношение максимально допустимых шагов на пороге и в режиме развитой генерации:

$$(\Delta_{\max})_{\text{th}} \Delta_{\max}^{-1} \sim \sqrt{\alpha^2 (\beta D)^{-1}} \sim \sqrt{\varepsilon^{-1}} \gg 1. \quad (22.16)$$

Здесь снова использован малый параметр теории развитой генерации ε .

Из полученного результата следует, что состояние развитой генерации теряет устойчивость при переходе к дискретному времени при меньших значениях Δ_{\max} , чем состояние на пороге генерации. Сопоставим этот результат с расчетом относительной степени упорядоченности тех же состояний на основе критерия "S-теорема". Из такого сопоставления следует, что более высокоорганизованное состояние при переходе к дискретному времени разрушается легче. Иными словами, оно имеет меньший "запас устойчивости", чем более хаотическое состояние на пороге генерации.

Возникает вопрос: хорошо это или плохо? На него нет однозначного ответа. Действительно, возможны ситуации, когда в результате потери устойчивости возникает более упорядоченное состояние. Тогда с точки зрения теории самоорганизации потеря устойчивости — это хорошо.

Если же, напротив, при потере устойчивости происходит переход в более хаотическое состояние, то, опять же с точки зрения теории самоорганизации, это плохо. Существенно при этом, что более организованное состояние развитой генерации разрушается легче — при меньших шагах дискретного времени. В этом отношении более высокоорганизованное состояние является и "более хрупким".

23. Броуновское движение в химически реагирующих системах. Частично ионизованная плазма

Рассмотрим теперь броуновское движение, когда в качестве "частиц" выступают флуктуации плотности электронов, ионов и атомов частично ионизованной плазмы. Роль химических реакций здесь играют процессы ионизации и рекомбинации.

Теория флуктуаций в плазме строится на основе системы кинетических уравнений для функций распределения электронов, ионов и атомов [33, 55–57]. При этом определяются соответствующие источники Ланжевена в кинетических уравнениях для распределений электронов, ионов и атомов.

Релаксация к стационарному (в открытых системах) состоянию происходит, как правило, в несколько этапов. Во многих случаях на первом этапе устанавливается локальное равновесие по поступательным степеням свободы, затем по внутренним степеням свободы. Последним устанавливается химическое равновесие.

Рассмотрим состояние плазмы после завершения двух первых этапов релаксации. Тогда (без учета флуктуаций) установление химического равновесия может быть описано на основе уравнений для средних плотностей числа электронов n_e , ионов n_i и атомов n_a . Выделим (для иллюстрации) лишь процесс ионизации электронным ударом. Обозначим через α и β соответствующие коэффициенты ионизации электронами и рекомбинацию электрона и иона в присутствии электрона. Тогда динамические уравнения можно записать в виде

$$\frac{dn_e}{dt} = \alpha n_e n_a - \beta n_e^2 n_a, \quad n_e = n_i, \quad n_e + n_a = n. \quad (23.1)$$

Второе уравнение учитывает равенство средних чисел электронов и ионов, а последнее — постоянство суммарного числа заряженных частиц, например, электронов и атомов. В равновесном состоянии имеет место так называемое соотношение (или формула) Саха

$$\frac{n_e n_i}{n_a} = \frac{\alpha}{\beta}, \quad \left[\frac{\alpha}{\beta} = \left(\frac{\mu k T}{(2\pi\hbar)^2} \right)^{3/2} \frac{1}{Z} \right]. \quad (23.2)$$

Для учета атомарной структуры "сплошной среды" определяем источники Ланжевена в кинетических уравнениях. Это позволяет найти и соответствующие источники Ланжевена в уравнениях для случайных функций, n_e , n_i , n_a . Интенсивность источника Ланжевена, которая играет роль коэффициента диффузии в соответствующем

уравнении Фоккера–Планка для функции распределения $f(n, t)$ определяется при этом выражением

$$D_{n_e} = \frac{1}{2V} (\alpha n_e n_a + \beta n_e^2 n_i). \quad (23.3)$$

Здесь использовано обозначение для объема V . Предполагается, что частицы равномерно распределены по пространству. При этом условия два уравнения в (23.1) остаются в силе и при учете флуктуаций. С учетом этого выражение (23.3) запишем в виде:

$$D_{n_e} = \frac{1}{2V} [\alpha n_e (n - n_e) + \beta n_e^3] = \frac{1}{2} (r_{n_e} + g_{n_e}). \quad (23.4)$$

Из динамического уравнения (23.1) следует выражение для коэффициента нелинейного трения. Его можно представить в форме:

$$A_{n_e} = -[\alpha n_e (n - n_e) - \beta n_e^3] \equiv r_{n_e} - g_{n_e}. \quad (23.5)$$

Чтобы установить соответствие со структурой управляющего уравнения для одношаговых процессов, введенного в разделе 9, здесь введены для рассматриваемой задачи коэффициенты генерации и рекомбинации. Это дает возможность по аналогии с (9.5) сразу записать соответствующее уравнение Фоккера–Планка для распределения $f(n_e, t)$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial n_e} \left(D_{n_e} \frac{\partial f}{\partial n_e} \right) + \frac{\partial}{\partial n_e} (A_{n_e} f), \quad \int f(n_e, t) dn_e = 1. \quad (23.6)$$

Равновесное решение этого уравнения определяется выражением:

$$f(n_e) = C \exp \left[- \int_0^{n_e} \frac{A(n'_e)}{D(n'_e)} dn'_e \right]. \quad (23.7)$$

Отсюда следует, что точка максимума распределения определяется решением уравнения

$$A(n_{\max}) = -[\alpha n_{\max} (n - n_{\max}) - \beta n_{\max}^3] = 0 \quad (23.8)$$

и, следовательно, удовлетворяет формуле Саха.

В приближении Гаусса дисперсия $\delta n_e = n_e - n_{\max}$ определяется выражением:

$$\langle (\delta n_e)^2 \rangle = \frac{n_e}{V} \frac{n - n_e}{(2n - n_e)}. \quad (23.9)$$

Оно обращается в нуль в двух предельных случаях: при нулевой степени ионизации (газ нейтральных частиц), когда $n_e = 0$; для полностью ионизованной плазмы, когда $n_e = n$. Это показывает, что введенный источник флуктуаций характеризует именно дискретность актов химического превращения.

При малых отклонениях от равновесия флуктуация δn удовлетворяет линейному уравнению Ланжевена с коэффициентом трения $\lambda = \alpha(2n - n_e)$. При этом выражение для коэффициента диффузии можно представить в стандартной форме флуктуационно-диссипационного соотношения:

$$D = \lambda \langle (\delta n_e)^2 \rangle, \quad \lambda = \alpha(2n - n_e). \quad (23.10)$$

Отсюда следует, что и коэффициент диффузии обращается в нуль в отмеченных выше двух предельных случаях.

Используя определения (23.4), (23.5) для коэффициентов генерации и рекомбинации, можно записать соответствующее управляющее уравнение. При этом из двух возможных определений вероятностей перехода (9.2) и (9.11) более естественным с точки зрения статистической теории является второе из них. Только в этом случае из управляющего уравнения следует кинетическая форма уравнения Фоккера–Планка (23.6).

При использовании управляющего уравнения более естественными переменными являются соответствующие числа частиц:

$$N_e = Vn_e, \quad N_i = Vn_i, \quad N_a = Vn_a, \quad N = Vn. \quad (23.11)$$

В этих переменных динамическое уравнение (23.1) принимает вид

$$\frac{dN_e}{dt} = \alpha_V N_e N_a - \beta_V N_e^2 N_i, \quad \alpha_V = \frac{\alpha}{V}, \quad \beta_V = \frac{\beta}{V^2}. \quad (23.12)$$

При наличии внешнего источника, например фотоионизации в заданном поле, возможно проследить за изменением степени упорядоченности частично ионизованной плазмы в зависимости, например, от интенсивности внешнего поля.

24. Процесс Мальтуса–Ферхюльста (Malthus–Verhulst)

Модель Мальтуса–Ферхюльста была предложена много лет тому назад для описания условий выживания популяции, например, бактерий [11, 15]. Пусть N — число особей в популяции. Если γ и α — скорости смерти и рождения особей, а $\beta(N-1)$ — скорость вымирания вследствие межвидовой борьбы, то при $N \gg 1$ процесс временной эволюции можно описать дифференциальным уравнением

$$\frac{dN}{dt} = (\alpha - \gamma - \beta N)N \equiv (g_N - r_N)N. \quad (24.1)$$

Здесь при определении коэффициентов g_N , r_N выделен общий множитель N . Уравнение (24.1) аналогично по структуре уравнению (14.3) для энергии колебаний в генераторе Ван-дер-Поля. При этом коэффициенту обратной связи α_f отвечает здесь коэффициент a , характеризующий скорость рождения особей.

Напомним в связи с этим, что при описании флуктуаций в генераторе нелинейный коэффициент диффузии (14.10) в уравнении Фоккера–Планка (14.8) был определен из условия, что при отсутствии обратной связи ($\alpha_f = 0$) стационарное распределение совпадает с равновесным распределением Больцмана. Если и теперь следовать этому принципу, то нелинейный коэффициент диффузии надо определить выражением:

$$D(N) = (\gamma + \beta N)T. \quad (24.2)$$

Здесь T — безразмерный коэффициент, который является аналогом температуры. Его можно принять за единицу.

Возможен, однако, и другой принцип определения коэффициента диффузии: через коэффициенты иониза-

ции и рекомбинации по формулам (9.5), (23.4) (23.5). Если следовать этому пути, то для уравнения (24.1)

$$g_N = aN, \quad r_N = (\gamma + \beta N), \quad D = (\gamma + \beta N) - \frac{1}{2}a. \quad (24.3)$$

При таком определении коэффициент диффузии зависит от "параметра обратной связи", по мере увеличения которого в системе происходит фазовый переход — возникает стационарное состояние с отличным от нуля числом N . Здесь определим коэффициент диффузии по той же схеме, что и для генератора Ван-дер-Поля, т.е. примем определение (24.2) с $T = 1$. Как и выше, предпочтению отдаем кинетической форме уравнения Фоккера–Планка:

$$\frac{\partial f(N, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial N} \left[(\gamma + \beta N)N \frac{\partial f}{\partial N} \right] + \frac{\partial}{\partial N} \left[(-a + \gamma + \beta N)Nf \right]. \quad (24.4)$$

При нулевом значении "параметра рождения" a стационарное распределение имеет вид

$$f_0(N) = \exp(-N), \quad \int f_0 dN = 1. \quad (24.5)$$

Так как приведенное описание справедливо при условии $N \gg 1$, то экспоненциальное убывание означает фактическое вымирание популяции.

Общее стационарное решение можно по аналогии с (14.11) представить в виде

$$f_0(N, \alpha) = C \exp(-H_{\text{eff}}(N, \alpha)), \quad H_{\text{eff}} = N - \frac{\alpha}{\beta} \ln \left(1 + \frac{\beta}{\gamma} N \right). \quad (24.6)$$

Здесь введена соответствующая эффективная функция Гамильтона. Максимум распределения определяется выражением:

$$N_{\text{max}} = (\alpha - \gamma)\beta^{-1}. \quad (24.7)$$

Оно выражает естественное условие, что для стационарного существования популяции необходима достаточно большая рождаемость: $a > \gamma$. Разложением по малому отклонению $\delta N = N - N_{\text{max}}$ можно перейти от (24.6) к распределению Гаусса. Это оправдано, если относительная дисперсия числа популяций мала (ср. с (14.16)):

$$\frac{\langle (\delta N)^2 \rangle}{N_{\text{max}}^2} = \frac{\gamma}{\alpha - \gamma} \frac{1}{N_{\text{max}}} \ll 1. \quad (24.8)$$

Для описания процессов с малым числом популяций необходимо использовать соответствующее управляющее уравнение. При этом снова можно принять аргументацию, которая склоняет чашу весов в сторону "кинетического представления" управляющего уравнения.

Нелинейная теория броуновского движения имеет очень много разнообразных приложений. Многие из них можно найти в работах, приведенных в списке литературы. Цель настоящей работы состояла в том, чтобы осветить некоторые новые принципиальные вопросы, которые существенны для дальнейшего развития теории. Естественно, не для всех из них нашлось здесь

место. Среди них — это прежде всего вопрос единого кинетического описания броуновского движения при наличии как диссипативной, так и недиссипативной нелинейности. Эта проблема кратко освещена в работах [27, 28].

Использование соответствующих обобщенных кинетических уравнений в теории броуновского движения позволит избежать необходимости применения теории возмущений при переходе от уравнения Фоккера–Планка к уравнению Эйнштейна–Смолуховского. Благодаря этому открывается возможность описания броуновского движения при одновременном существовании неравновесного и равновесного фазовых переходов. Простейшим примером такой системы может служить осциллятор Ван-дер-Поля–Дуффинга. Такая система содержит два управляющих параметра — параметр обратной связи в генераторе Ван-дер-Поля и "параметр эффективного поля" в осцилляторе Дуффинга. При изменении второго параметра возможен переход типа равновесного фазового перехода второго рода. При этом потенциал из параболического может стать, например, бистабильным.

В таких системах возникает ряд новых явлений, обусловленных взаимодействием равновесного и неравновесного фазовых переходов. Например, в известной задаче Крамерса о переходе через барьер возникает возможность управления характерным временем перехода путем изменения параметра обратной связи в генераторе Ван-дер-Поля. Для систем с химическими реакциями возможны разные каналы влияния неравновесных диссипативных процессов на скорости химических реакций. Можно говорить, таким образом, о кинетической теории катализа, когда интенсивность реакции изменяется при изменении, например, параметра обратной связи в генераторе Ван-дер-Поля.

Естественно, что все перечисленные вопросы являются весьма сложными. Автор выражает надежду, что настоящая работа будет стимулировать развитие нелинейной теории броуновского движения в этих направлениях.

Список литературы

1. *Броуновское движение* Ред. Давыдов Б И (М.: ОНТИ, 1936)
2. Леонтович М А *Статистическая физика* (М.: Наука, 1983)
3. Chandrasekhar S *Stochastic Problems in Physics and Astronomy*. перевод: *Rev. Mod. Phys.* **15** 823 (1943); (М.: ИЛ, 1947)
4. Лифшиц Е М, Питаевский Л П *Физическая кинетика* (М.: Наука, 1979)
5. Стратонович Р Л *Избранные вопросы теории флуктуаций в радиотехнике* (М.: Сов. радио, 1961)
6. Рытов С М *Введение в статистическую радиофизику* (М.: Наука, 1976)
7. Малахов А Н *Флуктуации в автоколебательных системах* (М.: Наука, 1968)
8. Тихонов В И *Статистическая радиотехника* (М.: Сов. радио, 1966)
9. Климонтович Ю Л *Статистическая физика* (М.: Наука, 1982; New York: Harwood Acad. Publ. 1986)
10. Кляцкин В И, Татарский В И Приближение диффузионного случайного процесса в некоторых нестационарных статистических задачах физики. *УФН* **110** 499 (1973)
11. Van Kampen N G *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. (Amsterdam: North-Holland, 1981; М.: Высшая школа, 1990)
12. Risken H *The Fokker Planck Equation* (Heidelberg: Springer-Verlag, 1984)
13. Haken H *Advanced Synergetics* (Heidelberg: Springer-Verlag, (1983); перевод: (М.: Мир, 1985)
14. Gardiner C W *Handbook of Stochastic Methods In Physics, Chemistry and Natural Sciences* (Heidelberg: Springer-Verlag, 1983; М.: Мир, 1986)
15. Horstemke W, Lefever R *Noise-Induced Transitions* (Heidelberg: Springer-Verlag, 1984); (М.: Мир, 1987)
16. Зельдович Я Б, Михайлов А С Флуктуационная кинетика реакций *УФН* **153** 469 (1987)
17. Климонтович Ю Л Турбулентное движение и структура хаоса (М.: Наука, 1990); англ. перевод: (Dordrecht, Netherlands: Kluwer Acad. Publ., 1991)
18. Klimontovich Yu L Ito, Stratonovich, kinetic forms of stochastic equations *Physica A* **163** 515 (1990)
19. Klimontovich Yu L Alternative description of stochastic processes in Nonlinear systems. "Kinetic form" of master and Fokker-Planck equations. *Physica A* **182** 121 (1992)
20. Климонтович Ю Л, Ковалев А С, Ланда П С Естественные флуктуации в лазерах. *УФН* **106** 279 (1972)
21. Lax M *Fluctuations and Coherence Phenomena in Classical and Quantum Optics* (New York: Gordon, 1968)
22. Ахманов С А, Дьяков Ю Е, Чиркин А С *Введение в статистическую радиофизику и оптику* (М.: Наука, 1981)
23. Ланда П С *Автоколебания в системах с конечным числом степеней свободы* (М.: Наука, 1980)
24. Стратонович Р Л *Нелинейная неравновесная термодинамика* (М.: Наука, 1985); англ. перевод: (Berlin: Heidelberg, Springer-Verlag, 1992)
25. Michailov A S Selected Topics in Fluctuational Kinetics of Reactions. *Phys. Rep.* **184** (5/6) 309 (1989)
26. Moss F *Stochastic Resonance from the Ice Ages to the Monkey's Ear* (University of Missouri at Saint Louis, 1992)
27. Климонтович Ю Л О необходимости и возможности единого описания кинетических и гидродинамических процессов. *ТМФ* **92** 312 (1992)
28. Klimontovich Yu L From the Hamiltonian Mechanics to a Continuous Media. Dissipative Structures. Criteria of Self-Organization. *Theor. and Math. Phys.* **96** (3) 385 (1993)
29. Понтрягин Л С, Андронов А А, Витт А А О статистическом рассмотрении динамических систем. *ЖЭТФ* **3** 3 (1933)
30. Hanggi P, Talkner P, Borkovec M Reaction-rate theory: fifty years after Kramers. *Rev. Mod. Phys.* **62** 251 (1990)
31. Климонтович Ю Л Вопросы статистической теории взаимодействия атомов с излучением. *УФН* **101** 577 (1970)
32. Haken H *Light*, v. 1 (Amsterdam; New York; Oxford; North-Holland, 1981)
33. Климонтович Ю Л *Кинетическая теория электромагнитных процессов*. (М.: Наука, 1980); англ. перевод: (Berlin; Heidelberg; Springer-Verlag, 1983)
34. Карлов Н В, Кириченко Н А, Лукьянчук *Лазерная термодинамика* (М.: Наука, 1992)
35. Einstein A Strahlung Emission und Absorption nach der Quantentheorie. *Verhandl. Dtsch. Phys. Ges.* **18** 318 (1916); перевод: Эйнштейн А. *Собрание научных трудов* (М.: Наука, 1966) т. 3, с. 386
36. Климонтович Ю Л Флуктуационно-диссипационные соотношения. Квантовое обобщение формулы Найквиста. *УФН* **151** 309 (1987)
37. Андреев А В, Емельянов В И, Ильинский Ю А Кооперативные явления в оптике (М.: Наука, 1987); (Bristol; and Philadelphia, Institute of Physics Publ. 1993)
38. Климонтович Ю Л Определение сравнительной степени упорядоченности состояний открытых систем на основе S-теоремы по экспериментальным данным. *Письма ЖТФ* **14** 631 (1988)
39. Климонтович Ю Л Уменьшение энтропии в процессе самоорганизации. S-теорема. *Письма ЖТФ* **7** 1412 (1983)
40. Klimontovich Yu L Criteria of Self-Organization. In *Chaos, Solotons and Fractals* (1994) (in press)
41. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Статистическая физика* (М.: Наука, 1976)
42. Паташинский А З, Покровский В Л *Флуктуационная теория фазовых переходов* (М.: Наука, 1982)

43. Анищенко В С *Сложные колебания в простых системах* (М.: Наука, 1988)
44. Анищенко В С, Астахов В В Экспериментальное исследование механизма возникновения и структуры странного аттрактора в генераторе с инерционной нелинейностью. *Радиотехн. и Электроника* **28** 1109 (1983)
45. Lorenz E Deterministic Nonperiodic Flow. *J. Atmos. Sci.* **20** 1675 (1963)
46. Ruelle D, Takens F On the Nature of Turbulence, *Commun. Math. Phys.* **20** 167 (1971)
47. Orayevskii A N Dynamical Stochasticity and Lasers. *Trudy FIAN* **171** 3 (1986)
48. *Limits of Predictability* (Ed. Kravtsov Yu A Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag: 1993)
49. Feigenbaum M Universality in the Behavior of a Nonlinear System *Usp. Fiz. Nauk* **141** 343 (1983)
50. Анищенко В С, Климонтович Ю Л Эволюция энтропии в генераторе с инерционной нелинейностью при переходе к стохастичности через каскад бифуркаций удвоения периода. *Письма ЖТФ* **10** 816 (1984)
51. Lichtenberg A, Liebermann M *Regular and Stochastic Dynamics* (Berlin; Heidelberg; New York: Springer-Verlag, 1982)
52. Неймарк Ю С, Ланда П С *Стохастические и хаотические колебания* (М.: Наука, 1987); перевод: (Dordrecht: Kluwer, 1992)
53. Klimontovich Yu L Sequences of Bifurcations of Limiting Cycle Energy and Period of Oscillations in Generators with Two Controlling Parameters: Amount of Feedback and Scale of Discrete Time. *Pis'ma v ZhTP* **13** 175 (1987)
54. Klimontovich Yu L, Chetverikov V I Bifurcations and Distributions of Energy in the Generalized Van der Pol Generator Associated with the Change of Feedback and Discrete Time Scale. *Pis'ma v ZhTP* **13** 977 (1987)
55. Klimontovich Yu L, Kremp D Quantum kinetic equations in systems with bound states. *Physica A* **109** 512 (1981)
56. Klimontovich Yu L, Kremp D, Kraeft W D Kinetic theory for chemically reacting gases and partially ionized plasmas. *Adv. Chem. Phys.* **58** 175 (1987)
57. Belyi V V, Klimontovich Yu L Kinetic Fluctuations in Partially Ionized Plasma and Chemically Reacting Gases. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **74** 1160 (1978)

NONLINEAR BROWNIAN MOTION

Yu L Klimontovich

*Department of Physics, M V Lomonosov State University, Moscow
Vorob'evy Gory, 119899, Moscow, Russia
Tel. (7-095) 939-3825. Fax: (7-095) 143-8547
E-mail: ylklim@hklm.phys.msu.su*

A survey is presented of problems of Brownian motion which are described by nonlinear Langevin and corresponding Fokker–Planck equations. The theory of Brownian motion today is one of the main divisions of the statistical theory of open systems. Fluctuations of any internal thermodynamic parameters, density, velocity and temperature in hydrodynamics, and distribution functions in the kinetic theory are actually regarded as "Brownian particles" engaged in unceasing irregular motion. The following general problems of nonlinear Brownian motion are considered: Brownian motion in a medium with nonlinear friction; the critical analysis of three forms of the corresponding Langevin and Fokker–Planck equations (Ito form, Stratonovich form, and Kinetic form); Smoluchowski equations and Master equations for different cases; two types of transition from Master equation to Fokker–Planck equation; The Master equations for one-step processes; the traditional and the nontraditional definition of transition probabilities; evolution of free energy and entropy in Brownian motion; Lyapunov functionals. In order to illustrate the efficiency of the general theory the following concrete examples are considered: Brownian motion in self-oscillatory systems; H-theorem for the Van der Pol oscillator; self-organization in the Van der Pol oscillator, S-theorem; oscillator with inertial nonlinearity; bifurcation of energy of limiting cycle; oscillator with multistable stationary states; oscillators in discrete time; bifurcations of energy of limiting cycle and period of oscillations; criterion of instability upon transition to discrete time, based on H-theorem; Brownian motion of quantum atom-oscillators in the equilibrium electromagnetic field; Brownian motion in chemically reacting systems; partially ionised plasma; Malthus–Verhulst process.

Bibliography — 59 references

Received 18 January 1994, revised 29 April 1994