Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 3 — 1974

УДК 621.391.822.2

Н. А. КРУПЕННИКОВ, Р. Л. СТРАТОНОВИЧ

О НЕЛИНЕЙНОЙ ФЛУКТУАЦИОННО-ДИССИПАЦИОННОЙ ТЕРМОДИНАМИКЕ

Получены формулы, по которым в произвольной n-индексной флуктуационно-диссипационной термодинамике невозмущенные моменты и кумулянты выражаются через коммутационную функцию, содержащую n—1 пар скобок Пуассона.

Введение

В настоящее время довольно полно разработана линейная (двухиндексная) [1—3] и квадратичная (трехиндексная) [4] квантовая и неквантовая флуктуационно-диссипационная термодинамика. Ряд результатов получен по кубической (четырехиндексной) теории [5]. Результаты же по общей n-индексной флуктуационно-диссипационной термодинамике почти отсутствуют.

Известно [1, 6], что n-индексная адмиттансная (точнее моноадмиттансная) функция

$$G_{\alpha_n \ldots \alpha_1}(t_n, \ldots, t_1) \equiv \frac{\delta^{n-1} \langle F_{\alpha_n}(t_n) \rangle}{\delta h_{\alpha_{n-1}}(t_{n-1}) \ldots \delta h_{\alpha_1}(t_1)} \tag{1}$$

выражается через коммутационную функцию

$$V_{\alpha_n \ldots \alpha_1}(t_n, \ldots, t_1) = \langle \{\{\ldots\{\{F_{\alpha_n}(t_n),\ F_{\alpha_{n-1}}\},\ F_{\alpha_{n-2}}(t_{n-2})\}, \ldots\},\ F_{\alpha_1}(t_1)\}\rangle \tag{2}$$

по формуле (при $t_n \geqslant \max(t_{n-1}, \ldots, t_1)$).

$$G_{\alpha_n \ldots \alpha_1}(t_n, \ldots, t_1) = P_{n-1} V_{\alpha_n \ldots \sigma_1}(t_n, \ldots, t_1)\, \eta(t_n - t_{n-1})\, \eta(t_{n-1} - t_{n-1}) \ldots \tag{3}$$

Здесь F_α, $\alpha = 1, \ldots, n$ — внутренние термодинамические параметры; h_α — сопряженные с ними внешние силы, входящие в возмущенный гамильтониан

$$\mathcal{H}_{\text{воз}} = \mathcal{H} - \sum_\alpha h_\alpha(t) F_\alpha;$$

$\{A, B\}$ — скобки Пуассона, квантовые $\left(\{A, B\} = \frac{i}{\hbar}[AB - BA]\right)$ или классические $\left(\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial q} - \frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial B}{\partial p}\right)$; P_{n-1} обозначает сумму по всем

$(n-1)!$ перестановкам индексов $1, 2, \ldots, n-1$; $\eta(z)=1$ при $z \geqslant 0$, $\eta(z)=0$ при $z<0$ — ступенчатая функция.

Из (3) видно, что задание функции (1) определяет функцию (2) в одной области $t_n \geqslant t_{n-1} \geqslant \ldots \geqslant t_1$, т. е. определяет ее частично. В двух- и трехиндексной теории (но не в более сложных) вследствие симметрии, которой обладает V, этого оказывается достаточно, чтобы полностью определить эту функцию.

В настоящей работе показана фундаментальная роль коммутационной функции в произвольной n-индексной термодинамике.

Доказывается, что n-идексная функция V определяет все прочие n-индексные функции, т. е. если она известна, то по стандартным универсальным формулам можно найти другие функции. Вопрос же о том, как лучше находить функцию V, мы в этой работе не рассматриваем.

Вспомогательные рекуррентные формулы

В дальнейшем пару (α_i, t_i) мы будем для краткости обозначать одним индексом i, стоящим вверху так, что функция (2) запишется: $V^{n \ldots 1}$, аналогично же и для других функций.

Рассмотрим функцию, содержащую $n-k$ пар скобок

$$Q^{(n \ldots k+1)k \ldots 1} = \langle \{ \ldots \{F^n, F^{n-1}\}, \ldots F^{k+1}\} F^k \ldots F' \rangle \tag{4}$$

и назовем ее функцией Q $(n-k)$-того порядка. Покажем, что функция l-ого порядка выражается через функции более высокого порядка.

Воспользуемся вытекающей из равенства (1) работы [5] формулой

$$\langle \{D, B\} \rangle = L(p_B) \langle DB \rangle, \tag{5}$$

где $L(p) = \begin{cases} \dfrac{e^{i\beta\hbar p}-1}{i\hbar} & \text{в квантовом случае} \\ \beta p & \text{в классическом случае} \end{cases}$

$$(\beta = 1/T).$$

Применяя (5), при

$$B = F^k \ldots F^1, \; D = \{ \ldots \{F^n, F^{n-1}\}, \ldots F^{k+1}\} \tag{6}$$

имеем

$$Q^{(n \ldots k+1)k \ldots 1} = L^{-1}(p_k + \ldots + p_1) \langle \{\{ \ldots \{F^n, F^{n-1}\}, \ldots F^{k+1}\}, F^k \ldots F'\} \rangle, \tag{7}$$

так как $p_B B = (p_k + \ldots + p_1) F^k \ldots F'$.

Используем многократно дистрибутивное свойство

$$\{A, BC\} = \{A, B\} C + B \{A, C\} \tag{8}$$

скобок Пуассона. Это приведет (7) к виду

$$Q^{(*)k \ldots 1} = L^{-1}(p_1 + \ldots + p_1) \sum_{j_1=1}^{k} \langle \{\ldots\} F^k \ldots F^{j_1+1} \{D, F^{j_1}\} F^{j_1-1} \ldots F' \rangle, \tag{9}$$

где использованы обозначения (6); звездочка (*) заменяет неизменный набор индексов $n \ldots k+1$.

Чтобы в (9) перенести $D' = \{D, F^{j_r}\}$ налево, используем коммутатор

$$D'B - BD' = [D', B] = \hbar/i \{D', B\}$$

и будем иметь

$$F^k \dots F^{j_1+1} D' F^{j_1-1} \dots F' = D' F^k \dots F^{j_1+1} F^{j_1-1} \dots F' +$$
$$+ i\hbar \{D', F^k \dots F^{j_1+1}\} F^{j_1-1} \dots F'.$$

Снова используя равенство (8), получаем

$$F^k \dots F^{j_1+1} D' F^{j_1-1} \dots F^1 = D' F^k \dots F^{j_1+1} F^{j_1-1} \dots F^1 +$$
$$+ i\hbar \sum_{j_2=j_1+1}^{k} F^k \dots F^{j_2+1} \{D', F^{j_2}\} F^{j_2-1} \dots F^{j_1+1} F^{j_1-1} \dots F^1. \quad (10)$$

В членах суммы по j_2 можно перенести $\{D, F^m\}$ налево, применяя формулу (10) при замене D на $\{D, F^m\}$. Поступая аналогично с сомножителем $\{\{D, F^m\}, F^{m'}\}$ и т. д., получим результирующую формулу

$$Q^{(*)k\dots 1} = L^{-1} (p_k + \dots + p_1) \sum_{s=1}^{k} (i\hbar)^{s-1} \sum_{j_1 < \dots} \dots \sum_{< j_s} Q^{(*j_1 \dots j_s) m_{k-s} \dots m_1}, \quad (11)$$

где $m_{k-s} \dots m_1$ представляет собой убывающий набор индексов, получаемый вычеркиванием индексов $j_s, \dots, j_1$ из набора $k, \dots, 1$.

В неквантовом пределе приведенные формулы упрощаются, и уже из (9) мы имеем

$$Q^{(*)k\dots 1} = T (p_k + \dots + p_1)^{-1} \sum_{j=1}^{k} Q^{(*j) k \dots j+1, j-1 \dots 1}.$$

Этот результат удобно записать при помощи символа $P_{(k\dots 1)}$, обозначающего сумму по k циклическим перестановкам индексов $k \dots 1$. Именно:

$$Q^{(*)k\dots 1} = T (p_k + \dots + p_1)^{-1} P_{(k\dots 1)} Q^{(*k) k-1 \dots 1}. \quad (12)$$

Отсюда видно, что функция (4) l-ого порядка в неквантовом случае выражается через функцию $(l+1)$-ого порядка, тогда как в квантовом случае согласно (11) она выражается через функции всех высших порядков.

Моменты и кумулянты, выражающиеся через V

Будем многократно применять (11) или (12), подставляя в правую часть то же самое равенство, но взятое для функций более высоких порядков. В результате любая функция (4) выразится через функцию V. Если в качестве исходной взять функцию (4) при $k=n-1$, т. е. момент $\langle F^n \dots F^1 \rangle$, то получим, что *и в квантовом, и в неквантовом случае момент выражается через коммутационную функцию* V. Особенно простая формула согласно (12) имеет место в неквантовом случае:

$$\langle F^n \dots F' \rangle = T^{h-1} (p_{n-1} + \dots + p_1)^{-1} P_{(n-1,\dots,1)} \dots (p_2 + p_1)^{-1} P_{(2,1)} p_1^{-1} V^{n\dots 1}$$

или

$$\langle F^n \dots F' \rangle = T^{n-1} P_{n-1} (p_{n-1} + \dots + p_1)^{-1} \dots (p_2 + p_1)^{-1} p_1^{-1} V^{n\dots 1}, \quad (13)$$

поскольку $P_{(i\dots 1)} P_{(i-1\dots 1)} \dots P_{(21)} = P_i$.

Чтобы записать вытекающую из (11) формулу для квантового случая, обозначим через E_1 непустое подмножество из набора индексов $E=(n-1, ..., 1)$, через E_2 — непустое подмножество из $E-E_1$ и т. д. Следовательно,

$$E_1+E_2+\ldots+E_u=E \tag{14}$$

разбиение набора E. Через u обозначено число указанных подмножеств.

Пусть s_1 — число индексов из E_1, s_2 — число элементов E_2 и т. д. (так что $s_1+\ldots+s_u=n$). Расположим каждый набор E_i в порядке возрастания индексов. Тогда вследствие (11) в квантовом случае будем иметь такую формулу:

$$\langle F^n \ldots F^1\rangle = \sum (i\hbar)^{n-u} L^{-1}\Big(\sum_{\alpha\in E} p_\alpha\Big) L^{-1}\Big(\sum_{\alpha\in E_2+\ldots+E_u} p_\alpha\Big)\ldots$$
$$\ldots L^{-1}\Big(\sum_{\alpha\in E_u} p_\alpha\Big) V^{nE_1\ldots E_u}. \tag{15}$$

Сумма Σ здесь берется по всевозможным разбиениям (14).

Наличие в (13) симметризующей суммы $P_{(n-1)}$ и свойства симметрии функции $V^{n\ldots 1}$ обеспечивают выполнение требуемых свойств симметрии неквантового момента.

До сих пор мы предполагали, что с операторами L можно обращаться как с обычными числами, обращать их, заменяя на L^{-1}. Это действительно так, если берется спектральное представление и не рассматриваются места, где аргументная частота обращается в нуль. Если же пользоваться временным представлением, то следует вводить константы интегрирования. Так, при рассмотрении входящего в (10) оператора $(p_2+p_1)^{-1}$ следует добавить «константу интегрирования» $C(t_2-t_1)$. Она, будучи константой относительно t_2+t_1, является тем не менее функцией от t_2-t_1, а также (если $n>3$) может зависеть от t_4-t_3, t_5-t_3, ... Аналогично и для других операторов.

Сказанное затрудняет вычисление моментов по формуле (10). Указанных осложнений не возникает, если вычислять не моменты, а кумулянты эргодических внутренних термодинамических параметров F_α. Условие эргодичности понимается в этом смысле, что все кумулянты исчезают, если хотя бы одна разность t_j-t_l аргументных времен стремится по модулю к бесконечности.

Правая часть (10) будет определять кумулянт, если все константы вышеуказанного вида брать нулевыми.

Когда функция является «эргодической», т. е. обладает указанным свойством, ее спектр расположен в $(n-1)$-мерной гиперповерхности $\omega_1+\ldots+\omega_n=0$ n-мерного пространства частот $(\omega_1, \ldots, \omega_n)$. Функция является «неэргодической», если имеет спектральные составляющие, сосредоточенные в гиперповерхности меньшей размерности. Оператор $L(\omega_i+\ldots+\omega_1)$, $i<n$ дает неэргодические функции — «константы» интегрирования, сосредоточенные в $(n-2)$-мерной гиперповерхности, определяемой уравнениями $\omega_i+\ldots\omega_1=0$; $\omega_n+\ldots+\omega_{i+1}=0$. Если взять эргодическую составляющую от $<F^n\ldots F^1>$, то получим соответствующий кумулянт $k^{n\ldots 1}$. Поэтому из (13) будем иметь

$$k^{n\ldots 1} = \text{Э. С. } T^{n-1} P_{n-1}(p_{n-1}+\ldots+p_1)^{-1}\ldots(p_2+p_1)^{-1} p_1^1 \; V^{n\ldots 1} \tag{16}$$

и аналогично для (15).

Здесь Э. С. означает, что оставлены только эргодические составляющие, т. е. что «константы» интегрирования опущены. Функция V предполагается эргодической.

Отбрасывание «констант» интегрирования не препятствует вычислению моментов (хотя последние и содержат «константы», принявшие конкретный вид). Для этого нужно воспользоваться известными формулами [7], по которым моменты выражаются через кумулянты

$$\langle F^n \dots F^1 \rangle = k^{n \dots 1} + \sum\sum k^{r_1 \dots r_{\nu_1}} k^{r_{\nu_1+1} \dots r_{\nu_1+\nu_2}} \dots$$

(первая сумма по различным разбиениям $\nu_1 + \nu_2 + \dots = h$, вторая — по перестановкам индексов; $\nu_1, \nu_2 \dots < n$).

Стоящий в правой части типичный член $k^{r_1 \dots r_{\nu_1}} k^{r_{\nu_1+1} \dots r_{\nu_1+\nu_2}} \dots$ имеет спектр, сосредоточенный в гиперповерхности $\omega_{r_1} + \dots + \omega_{r_{\nu_1}} = 0$, $\omega_{r_{\nu_1}+1} + \dots + \omega_{r_{\nu_1+\nu_2}} = 0, \dots$ Таким образом, функции — «константы» интегрирования конкретизируются как младшие кумулянты, вычисляемые в свою очередь по формулам типа (16) при меньших n.

Из того, что моменты $<F^n \dots F^1>$ выражаются через V, вытекает то, что и все прочие n-индексные функции выражаются через V. В самом деле, в квантовом случае все n-индексные функции по определенным стандартным формулам выражаются через моменты, а следовательно, и через V. Формулы же для неквантового случая получаются из квантовых формул, в которые входят V, обычным предельным переходом $\hbar \to 0$.

Применение полученных результатов к проблеме квантования марковских процессов

Адмиттансная функция n-ного порядка (n-ная вариация отклика системы по возмущающей силе, см. формулу (1)) в квантовом и неквантовом случаях имеет один и тот же вид. В самом деле, она может быть вычислена варьированием решения релаксационного уравнения, которое явно не зависит от постоянной Планка $\hbar$. А так как адмиттансная функция согласно теории Кубо (см. [1]) совпадает с функцией $V^{nml \dots k}$ в области $t_n \geqslant t_m \geqslant t_l \geqslant \dots \geqslant t_k$, то, следовательно, и функция V в этой области одна и та жа в квантовом и неквантовом случаях. Естественно предположить, что указанное свойство имеет место во всей области определения [8]. Это обстоятельство позволяет получить любой квантовый момент по формуле (16), исходя из функций V, вычисленных с помощью классической теории. Если при этом функции V вычисляются с помощью марковской классической теории, то полученные по формуле (15) квантовые моменты будут описывать процесс, который естественно назвать марковским квантовым процессом.

С и м м е т р и я ф у н к ц и й V и е е о т ы с к а н и е. Согласно изложенному достаточно найти функцию V в неквантовом случае. Проблема отыскания функций V облегчается свойствами симметрии этой функции. Эти свойства можно разбить на две группы: первичные свойства, вытекающие из вида коммутатора, например:

$$V^{nk} = -V^{kn}; \; V^{nkm} + V^{kmn} + V^{mnk} = 0 \text{ и т. д.},$$

и вторичные свойства симметрии, возникающие вследствие свойств реальных физических систем. Например, в термодинамических системах дополнительные свойства симметрии возникают как следствие близости термодинамического процесса к гауссовскому. Симметрия уменьшает число независимых, парциальных (т. е. заданных в одной временной области $t_m \geqslant t_n \geqslant \ldots \geqslant t_k$) функций, составляющих V, и позволяет определить их через функции

$$\langle F^n F^{n-1} \ldots F' \rangle; \quad \frac{\delta \langle F^n \ldots F^2 \rangle}{\delta h'}; \ldots ; \frac{\delta^n \langle F^n \rangle}{\delta h^{n-1} \ldots \delta h'},$$

вычисляемые с помощью марковского кинетического уравнения.

В качестве примера применения описанного метода квантования марковского процесса рассмотрим четырехиндексный случай. В четырехиндексной теории (см. [5]) существует шесть независимых функций. Используем близость процесса к гауссовскому, обеспеченную существованием в термодинамике малого параметра, что позволяет уменьшить число независимых функций до трех. Действительно, представим оператор F^n в виде

$$F^n = (\gamma^n_i a_i + \gamma^n_{\bar i} a^+_{\bar i}) + (\mu^n_{ij} a_i a_j + \mu^n_{i \bar j} a_i a^+_{\bar j} + \mu^n_{\bar i \bar j} a^+_{\bar i} a^+_{\bar j}) +$$
$$+ (\varepsilon^n_{ijk} a_i a_j a_k + \varepsilon^n_{ij\bar k} a_i a_j a^+_{\bar k} + \varepsilon^n_{i \bar j \bar k} a_i a^+_{\bar j} a^+_{\bar k} + \varepsilon^n_{\bar i \bar j \bar k} a^+_i a^+_{\bar i} a^+_{\bar k}) + \ldots$$

Здесь a^+ и a — оператор рождения и уничтожения.

Предполагается, что остальные члены меньше ε. Рассмотрим функцию

$$V^{nmlk} = \langle [[[F^n, F^m], F^l], F^k] \rangle. \tag{17}$$

Предположим, что

$$\varepsilon \gg \mu^2, \tag{18}$$

тогда, учитывая лишь члены порядка ε (т. е. пренебрегая членами порядка μ^2, $\mu\varepsilon$, ε^2 и т. д.), нетрудно преобразовать (17):

$$V^{nmlk} = \varepsilon^n_{ij\bar k} (\gamma^m_k \gamma^l_{\bar j} \gamma^k_{\bar j} + \gamma^m_k \gamma^l_{\bar i} \gamma^k_{\bar j}) - \varepsilon^n_{i \bar j \bar k} (\gamma^m_j \gamma^l_k \gamma^k_{\bar i} + \gamma^m_k \gamma^l_j \gamma^k_{\bar i} +$$
$$+ \gamma^m_j \gamma^l_{\bar i} \gamma^k_k + \gamma^m_k \gamma^l_{\bar i} \gamma^k_j) + \varepsilon^n_{\bar i j \bar k} (\gamma^m_{\bar i} \gamma^l_k \gamma^k_{\bar j} + \gamma^m_{\bar j} \gamma^l_k \gamma^k_{\bar i} + \gamma^m_{\bar i} \gamma^l_{\bar j} \gamma^k_k +$$
$$+ \gamma^m_{\bar j} \gamma^l_{\bar i} \gamma^k_k) - \varepsilon^n_{i \bar j \bar k} (\gamma^m_{\bar i} \gamma^l_k \gamma^k_j + \gamma^m_{\bar i} \gamma^l_j \gamma^k_k) + \varepsilon^n_{ijk} (\gamma^m_{\bar i} \gamma^l_{\bar j} \gamma^k_{\bar k} + \gamma^m_{\bar i} \gamma^l_{\bar k} \gamma^k_{\bar j} +$$
$$+ \gamma^m_{\bar j} \gamma^l_{\bar i} \gamma^k_{\bar k} + \gamma^m_{\bar j} \gamma^l_{\bar k} \gamma^k_{\bar i} + \gamma^m_{\bar k} \gamma^l_{\bar i} \gamma^k_{\bar j} + \gamma^m_{\bar k} \gamma^l_{\bar j} \gamma^k_{\bar i}) + \varepsilon^n_{\bar i \bar j \bar k} (\gamma^m_i \gamma^l_j \gamma^k_k +$$
$$+ \gamma^m_i \gamma^l_k \gamma^k_j + \gamma^m_j \gamma^l_i \gamma^k_k + \gamma^m_j \gamma^l_k \gamma^k_j + \gamma^m_k \gamma^l_i \gamma^k_j + \gamma^m_k \gamma^l_j \gamma^k_i) - \text{перестановкой}$$

индексов n и m.

Отсюда видно, что функция V^{nmlk} симметрична по последним двум индексам, и независимыми оказываются только три функции. Эта симметрия сохраняется и в неквантовом случае. В качестве независимых (базисных) можно взять такие (парциальные) функции:

$$V_1^{4321}, \; V_2^{1234}, \; V_3^{4132} \quad (t_4 \geqslant t_3 \geqslant t_2 \geqslant t_1).$$

Функции V_1 и V_2 можно найти по формуле Кубо через адмиттансную функцию, взятую в прямом и обращенном времени. Чтобы найти V_3, требуется дополнительная информация. Воспользовавшись формулой (13), для четырехиндексного случая можно выразить V_3 через четвертый *неквантовый* момент (см. [9]):

$$V^{4132} = -\frac{1}{p_2 + p_1} \left(p_4 p_3 p_2 p_1 \langle F^4 F^3 F^2 F^1 \rangle + p_3 V_1^{4321} + p_2 V_2^{1234}\right)$$

$$(t_4 \geqslant t_3 \geqslant t_2 \geqslant t_1).$$

Здесь $p_i \equiv \frac{\partial}{\partial t_i}$ — оператор дифференцирования по времени t_i. Неквантовый четырехиндексный момент, входящий в эту формулу, может быть выражен через характеристики марковского оператора.

Полученные таким образом функции V можно использовать для отыскания квантовых моментов и их производных.

ЛИТЕРАТУРА

1. Вопросы квантовой теории необратимых процессов. Сборник переводов. М., 1961.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М., 1964.
3. Callen H., Welton T. Plys. Rev., **83**, 34—40, 1951.
4. Ефремов Г. Ф. ЖЭТФ, **55**, 2322, 1968.
5. Стратонович Р. Л. ЖЭТФ, **58**, 1612, 1971.
6. Garrido M., Garcon I. J. Math. Phys, **61**, 103, 1970.
7. Стратонович Р. Л. Избранные вопросы теории флуктуаций в радиотехнике. М., 1961.
8. Стратонович Р. Л., Крупенников Н. А. Термодинамика необратимых процессов и ее применение. Материалы I Всесоюзной конференции. Черновцы, 1972, стр. 135—141.

Поступила в редакцию
17.5 1972 г.

Кафедра
общей физики для мехмата
