



Г. Хаген

Синергетика

Г. Хаген

Синергетика
Синергетика
Синергетика

Hermann Haken

Synergetics

An Introduction

Nonequilibrium Phase Transitions
and Self-Organization in Physics,
Chemistry and Biology

Second Enlarged Edition
With 152 Figures

Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York
1978

Г. Хакен

Синергетика

Перевод с английского

канд. физ.-мат. наук В. И. Емельянова

под редакцией

д-ра физ.-мат. наук, проф. Ю. Л. Климонтовича

и д-ра физ.-мат. наук С. М. Осовца



Издательство «Мир»

Москва 1980

Монография Г. Хакена, профессора Штутгартского университета (ФРГ), посвящена синергетике — новой дисциплине, возникшей на стыке нескольких наук (физики, химии, биологии, социологии и т. д.). В рамках синергетики изучается такое совместное действие отдельных частей какой-либо неупорядоченной системы, в результате которого происходит самоорганизация — возникают макроскопические пространственные, временные или пространственно-временные структуры, причем рассматриваются как детерминированные, так и стохастические процессы. Изучается и обратное явление — переход от упорядоченного состояния к хаосу.

В книге даны основы математического описания коллективных процессов в различных системах с приложениями к задачам физики, химии, биологии.

Книга будет интересна широкому кругу специалистов — прежде всего физикам, химикам, биологам, а также аспирантам и студентам старших курсов.

Редакция литературы по физике

1704020000

© by Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1977 and 1978. All rights reserved. Authorized translation from English language edition published by Springer-Verlag Berlin—Heidelberg — New York

X $\frac{20402-053}{041(01)-80}$ 53—80

© Перевод на русский язык, «Мир», 1980

Предисловие редакторов перевода

Со времени открытия второго закона термодинамики встал вопрос о том, как можно согласовать вывод о возрастании со временем энтропии в замкнутых системах (возрастание неопределенности, хаоса) с процессами самоорганизации в живой и неживой природе, происходящими в открытых системах. Долгое время казалось, например, что существует противоречие между выводом второго закона термодинамики и выводами эволюционной теории Дарвина, согласно которой в живой природе благодаря принципу отбора непрерывно происходит процесс самоорганизации.

По современным представлениям, в формировании которых существенную роль сыграла кибернетика, процесс самоорганизации представляет собой автоматический процесс, при котором, если говорить о биологических системах, выживают комбинации, выгодные с точки зрения адаптации всего вида и отдельных организмов.

Кибернетика играет существенную роль в понимании общих принципов процессов самоорганизации и дает методы конструирования различных типов самоорганизующихся систем. Однако при этом остается открытым вопрос о физических процессах, происходящих в ходе самоорганизации в самых различных физических, химических, метеорологических, биологических и других системах. Эти процессы как правило очень сложны, но тем не менее установление общих закономерностей процессов самоорганизации оказывается возможным.

Если говорить о систематизации накопленного материала, то образованию структур при необратимых процессах посвящена, например, книга профессора В. Эбелинга [1], недавно вышедшая на русском языке. В этом году выйдет перевод книги одного из основоположников теории термодинамических структур лауреата Нобелевской премии профессора И. Пригожина в соавторстве с Г. Николисом [2]. Теории возникновения пространственных и временных структур посвящены также вышедшие ранее книги П. Гленсдорфа и И. Пригожина [3], А. М. Жа-

ботинского [4], Ю. М. Романовского, Н. В. Степановой и Д. С. Чернавского [5]. Недавно вышла книга Ю. М. Свирежева и Д. О. Логофета [6], посвященная проблемам устойчивости биологических сообществ.

На важность проблемы спонтанного возникновения структур и интерес к этим вопросам указывает и тот факт, что последний Сольвеевский конгресс, состоявшийся в ноябре 1978 г. в Брюсселе, был целиком посвящен теме «Порядок и флуктуации в равновесной и неравновесной статистической механике».

Во всех рассматриваемых системах процесс самоорганизации идет обязательно с участием большого числа объектов (атомов, молекул или более сложных образований) и, следовательно, определяется совокупным, кооперативным действием. Чтобы подчеркнуть это обстоятельство, профессор Г. Хакен (Штутгартский университет, ФРГ) ввел специальный термин «синергетика». Это название происходит от греческого «synergieia», что означает совместное, или кооперативное, действие. Впервые этот термин был введен, и именно в этом смысле, великим английским физиологом Шеррингтоном около ста лет тому назад в ходе исследований мышечных систем и управления ими со стороны спинного мозга.

Начиная с 1973 г. в ФРГ каждые 2 года проводятся симпозиумы по синергетике и издаются сборники докладов [7].

Предлагаемая читателю книга представляет собой первую попытку изложения широкого круга вопросов, объединенных общим названием «синергетика». Автор старался сделать изложение большого по объему и очень многообразного по содержанию материала по возможности доступным для широкого круга читателей различных специальностей (физиков, химиков, биологов). Более трудный материал, который требует для понимания значительной физической и математической подготовки, выделен в отдельные параграфы. Они отмечены звездочкой. Эти параграфы содержат и оригинальный материал, который несомненно будет полезен специалистам в соответствующих областях. Достижению поставленной автором цели способствует большое количество иллюстраций.

Сказанное, однако, не означает, что книга представляет собой «легкое чтение». Для ее прочтения потребуется и значительное время, и терпение, и немалые усилия. Однако читатель, дошедший до конца книги, сможет убедиться, что он получил представление, и при этом не поверхностное, а очень глубокое и основательное, о чрезвычайно интересной и важной области знания. Он, конечно же, почувствует, что значительные усилия затрачены им не зря.

У подготовленного читателя при первом знакомстве с содержанием книги может возникнуть сомнение в целесообраз-

ности введения нового термина «синергетика». Действительно, читая названия глав: «Вероятность», «Информация», «Случай», «Необходимость»..., он сталкивается с хорошо известными и многократно описанными понятиями. Однако по мере чтения эти сомнения будут рассеиваться, поскольку станет ясно, что выбор материала и характер изложения служат единой цели — выявлению общих закономерностей процесса самоорганизации в системах самой различной природы.

Литература, приведенная в конце книги, может быть дополнена работами, которые вышли уже после написания этой книги, а также работами, которые помогут получить читателю более полное представление об отдельных затронутых здесь вопросах.

После прочтения первых глав (гл. 1—6) полезно ознакомиться с книгой Р. Л. Стратоновича [8], в основу которой положен текст лекций, прочитанных автором на физическом факультете Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова.

Главы 7, 8 посвящены в значительной степени теории фазовых переходов в равновесных системах, а также так называемых неравновесных фазовых переходов. Более полное представление о современном состоянии теории фазовых переходов в равновесных системах можно получить из книг [9—11].

Неравновесные фазовые переходы могут протекать лишь в открытых системах. Примерами могут служить переходы через порог генерации в классических и квантовых автоколебательных системах. Это могут быть физические системы (ламповый генератор, молекулярный генератор, лазер), химические системы (автоколебательные и автоволновые процессы при химических реакциях), биологические системы (переход в режим ритмической активности нейронных ансамблей, биологические часы) и т. д.

В последние годы было обращено внимание на аналогию между равновесными и неравновесными фазовыми переходами. Так, например, зависимость интенсивности флуктуаций поля у порога генерации от превышения над порогом подобна зависимости флуктуаций параметра порядка от разности температур $|T - T_c|$ (T_c — критическая температура) в теории фазовых переходов, развитой Ландау [12]. Г. Хакен был одним из первых, кто обратил внимание на эту аналогию.

При использовании такой аналогии следует, конечно, иметь в виду, что физическая природа этих переходов существенно различна [13]. Действительно, например, в квантовом оптическом генераторе при установлении когерентного состояния существенную роль играет диссипативная нелинейность. Напротив, при фазовых переходах второго рода существенна недиссипативная нелинейность. В силу этого различия переход через

порог генерации возможен лишь в открытой системе, поэтому является обязательно неравновесным процессом. Существенны и различия в характере флуктуаций вблизи порога генерации и в критической области при фазовых переходах второго рода [13].

В настоящее время известны вещества, в которых одновременно могут быть достаточно велики как диссипативные, так и недиссипативные нелинейности. Примерами могут служить сегнетоэлектрические лазерные кристаллы, растворы оптически активных молекулярных примесей в жидких кристаллах и т. д.

Представляет, естественно, интерес проведение исследований взаимного влияния равновесных и неравновесных фазовых переходов. Они могут представлять интерес и в связи с проблемой самоорганизации. Некоторые результаты подобного рода исследований приведены в работах [13—15].

Исследование химических и биохимических систем проводится теми же методами, которые использовались при анализе физических проблем в предыдущих разделах. Химические реакции здесь трактуются с глобальной точки зрения — и как чисто детерминированные и как стохастические процессы. При этом автор стремится последовательно проводить анализ таких систем с позиций синергетики, сформулированных ранее. Хорошим дополнением к этому материалу могли бы быть соответствующие разделы сборника [7].

Глава 10, посвященная проблемам биологии, весьма ограничена как по объему, так и по кругу затронутых вопросов. Здесь, также с позиций синергетики, кратко рассмотрены проблемы динамики популяций, эволюции и морфогенеза. В качестве дополнительной литературы и здесь можно рекомендовать сборник [7], а также книгу [16], в которой изложено современное состояние важнейших вопросов теории эволюции. К биологическому разделу синергетики безусловно относятся и исследования нейродинамики, которые выпали из поля зрения автора. Однако в сборнике [7] имеются работы, посвященные этой проблеме. Ее современное состояние довольно полно представлено в [17].

В книгу включена глава «Хаос». Содержание этой главы представляет особый интерес, поэтому рассмотрим ее несколько более подробно. Дело в том, что во всех предшествующих главах в конечном счете ставилась задача показать, каким образом осуществляется процесс самоорганизации — образования упорядоченных структур в неупорядоченных, стохастических системах. Конечно, идеи и методы синергетики должны относиться и к анализу обратных процессов, а именно процессов перехода динамических систем в стохастический режим. Классический

пример этого — переход от ламинарного течения жидкости к турбулентному с увеличением числа Рейнольдса.

В 1944 г. Л. Д. Ландау высказал предположение, что переход к турбулентному течению может осуществляться в виде бесконечной последовательности дискретных переходов, каждый раз с новыми составляющими, причем в каждом из таких переходов к движению добавляются все новые частоты. Математический пример движения такого рода был построен Хопфом в 1948 г. Долгое время представления о таких дискретных переходах или, как их теперь называют, бифуркациях Ландау — Хопфа, не находили экспериментального подтверждения: уже развитый турбулентный поток не содержит дискретного спектра частот.

В 1958 г. на модели симметрично нагреваемой вращающейся жидкости Э. Лоренц получил несколько иную картину начала развития турбулентности. Жидкость совершает несколько переходов к различным периодическим режимам с последующим переходом в апериодический режим. Мак-Лохлин и Мартин нашли такую последовательность событий при численном моделировании явления конвекции. При этом оказалось, что последний переход происходит скачком.

Решающий шаг в этом направлении сделали Рюэль и Такенс в 1971 г. Они показали, что скачкообразный переход к апериодическому (стохастическому) движению после нескольких периодических режимов представляет собой общее свойство нелинейных гидродинамических уравнений и, более того, что подобными свойствами обладают и другие динамические системы, которые описываются обыкновенными дифференциальными уравнениями с сильно выраженной нелинейностью. Исходя из абстрактных топологических соображений, Рюэль и Такенс показали, что после того как система проходит через несколько многопериодических режимов, она переходит в качественно иной режим, характеризующийся полной неупорядоченностью с быстро затухающей автокорреляционной функцией. Таким образом, оказывается, что для неконсервативных динамических систем, описываемых нелинейными дифференциальными уравнениями выше чем второго порядка, типично порождение режима с большим числом периодических функций широкого спектра частот. При некоторых условиях такой спектр переходит в непрерывный, и тогда говорят о потере регулярности и переходе системы в стохастический режим, который характеризуется отсутствием автокорреляции составляющих гармоник.

Чрезвычайно важно здесь то, что такие режимы осуществляются без введения случайных функций в начальные условия или наложения случайных воздействий извне. Все это находится в явном противоречии с привычными представлениями

о том, что стохастические режимы присущи системам с огромным числом степеней свободы, составленным из множества элементов. Оказывается, что переход в стохастический режим может осуществляться уже в системах, описываемых уравнением третьего порядка, т. е. всего с полутора степенями свободы¹⁾.

Значение этих результатов для самых различных отраслей науки, по нашему мнению, трудно переоценить. Мы обращаем внимание читателей, интересующихся этими проблемами, на источники, в которых они освещены значительно более полно, чем в предлагаемой книге. Это прежде всего — прекрасные статьи А. С. Молина [18] и М. И. Рабиновича [19], а также соответствующие работы М. И. Рабиновича, Я. Г. Синяя и др. в сборнике [20].

Первоначально перевод был сделан по 1-му изданию книги. В последующем профессор Г. Хакен внес в книгу ряд улучшений и для русского издания написал дополнительные параграфы и главу, которые вошли и во 2-е издание книги «Синергетика» на английском языке, вышедшей в 1978 г. В настоящую книгу включено и предисловие автора ко 2-му изданию. Пользуемся случаем, чтобы поблагодарить профессора Г. Хакена за внимание к русскому переводу его книги.

*Ю. Л. Климонтович
С. М. Осовец*

ЛИТЕРАТУРА

1. *Эбелинг В.* Образование структур при необратимых процессах. Пер. с нем. — М.: Мир, 1979.
2. *Николис Г., Пригожин И.* Самоорганизация в неравновесных системах. Пер. с англ. — М.: Мир, 1979.
3. *Гленсдорф П., Пригожин И.* Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. Пер. с англ. — М.: Мир, 1973.
4. *Жаботинский А. М.* Концентрационные автоколебания. — М.: Наука, 1974.
5. *Романовский Ю. М., Степанова Н. В., Чернавский Д. С.* Математические модели в биологии. — М.: Наука, 1975.
6. *Свирижев Ю. М., Логофет Д. О.* Устойчивость биологических сообществ. — М.: Наука, 1978.
7. *Synergetics. A Workshop/Ed. H. Haken.* — Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1977. (К настоящему времени выпущены уже пять таких

¹⁾ Краеугольным камнем представлений о переходе динамической системы в стохастический режим является введенное Рюэлем и Такенсом понятие «странного аттрактора». Странный аттрактор — это особая точка в многомерном фазовом пространстве, к которой интегральные кривые могут подойти сколько угодно близко, но никогда не могут входить в нее. При этом интегральные кривые всегда остаются внутри некоторого конечного многомерного фазового объема. Наличие странного аттрактора есть критерий существования стохастического режима в рассматриваемой динамической системе.

- сборников. Последний из них — Dynamics of Synergetic Systems/Ed. H. Haken. — Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1980.)
8. Стратонович Р. Л. Теория информации. — М.: Советское радио, 1975.
 9. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Статистическая физика. — М.: Наука, 1976.
 10. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика. В 2-х томах. Т. I. Пер. с англ. — М.: Мир, 1978.
 11. Паташинский А. З., Покровский В. Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. — М.: Наука, 1975.
 12. Ахманов С. А., Пахалов В. Б., Чиркин А. С. Формирование пространственной когерентности лазерного излучения при прохождении через порог лазерной генерации. — Письма в ЖЭТФ, 1976, т. 23, с. 391; Квантовая электроника, 1977, т. 4, с. 1298.
 13. Климонтович Ю. Л. Кинетическая теория электромагнитных процессов. — М.: Наука, 1980.
 14. Емельянов В. И., Климонтович Ю. Л. Фазовый переход в системе двухуровневых атомов, индуцированный лазерным излучением. — Письма в ЖЭТФ, 1978, т. 27, с. 7.
 15. Михайлов А. С. Неравновесный фазовый переход в биологическом сообществе. — ДАН СССР, 1978, т. 243, с. 786.
 16. Моран П. Статистические процессы эволюционной теории. — М.: Наука, 1973.
 17. Holden A. V. Models of the Stochastic Activity of Neurons. Lecture Notes in Biomathematics. Vol. 12. — Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1976.
 18. Мокин А. С. О природе турбулентности. — УФН, 1978, т. 125, вып. 1.
 19. Рабинович М. И. Стохастические автоколебания и турбулентность — УФН, 1978, т. 125, вып. 1.
 20. Нелинейные волны: Сб. статей/Под ред. акад. А. В. Гапонова-Грехова. — М.: Наука, 1979. — (Обзорные и оригинальные статьи по материалам лекций, прочитанных на Всесоюзной школе по нелинейным волнам, Горький, 1977). [В марте 1980 г. в Горьком состоялся первый Всесоюзный семинар, посвященный проблеме «Автостохастические явления и системы».]

Предисловие автора к русскому изданию

Синергетика — новая быстро развивающаяся область исследований — находится на стыке нескольких наук.

Я рад, что эта книга выходит в русском переводе. Воспользовавшись такой возможностью, я включил в нее ряд наиболее интересных последних результатов. Добавлена целая глава о хаосе, в которой рассматривается нерегулярное движение, вызываемое действием детерминированных сил. Явления такого типа встречаются в совершенно различных областях, начиная с физики и кончая биологией. Кроме того, включен раздел, где проведено аналитическое рассмотрение модели морфогенеза с использованием концепции параметра порядка, развитой в этой книге. Среди других дополнений — полное описание процесса генерации ультракоротких лазерных импульсов. И, конечно же, были исправлены небольшие ошибки и опечатки, имевшиеся в 1-м издании.

С особенным чувством удовольствия и благодарности я воспринимаю тот факт, что в подготовке русского издания принимает участие профессор Климонтович, один из ведущих ученых в области кинетической теории.

Г. Хакен

Предисловие к 2-му изданию

Публикация 2-го издания книги мотивируется рядом причин. Прежде всего, первое издание было распродано менее чем за один год. Оно нашло себе прекрасных критиков и вызвало оживленные отклики среди профессоров и студентов, приветствовавших синергетику — этот новый подход, находящийся на стыке различных наук. О положительной оценке книги можно судить, например, по тому, что в настоящее время она переводится также на русский и японский языки.

Я воспользовался этой возможностью, чтобы включить во 2-е издание некоторые из наиболее интересных новых результатов. Так, добавлена целая новая глава, посвященная интереснейшей и быстро развивающейся области исследования — хаосу, т. е. нерегулярному движению, вызванному детерминированными силами. Этот тип явлений обнаружен к настоящему времени в совершенно различных областях исследований, простирающихся от физики до биологии. Кроме того, включен раздел, посвященный аналитическому рассмотрению модели морфогенеза на основе концепции параметра порядка, развитой в этой книге. К другим дополнениям относится теперь уже полное описание возникновения ультракоротких лазерных импульсов. Были исправлены также небольшие опечатки или ошибки, замеченные в 1-м издании.

Мне хотелось бы поблагодарить всех тех, кто помогал мне в работе над дополнениями к 2-му изданию.

Герман Хакен

Штутгарт, июль, 1978

Предисловие

Одно из самых поразительных явлений и наиболее интригующая из проблем, с которыми сталкиваются ученые, — это спонтанное образование высокоупорядоченных структур из зародышей или даже из хаоса. В повседневной жизни мы встречаемся с подобными явлениями, когда наблюдаем развитие растений и животных. Рассматривая их в гораздо больших масштабах времени, ученые приходят к проблемам эволюции и в конце концов к вопросу о происхождении живой материи. Наряду с попытками понять или в некотором смысле объяснить эти чрезвычайно сложные биологические явления естественно возникает также и вопрос о возможности обнаружения процессов самоорганизации в гораздо более простых системах неживого мира.

В последние годы накопилось много примеров физических и химических систем, в которых из хаотических состояний возникают высокоупорядоченные пространственные, временные или пространственно-временные структуры. Как и в живых организмах, такие системы могут функционировать лишь за счет подвода к ним потока энергии (и вещества). В отличие от машин, сконструированных человеком, которые рассчитаны на определенный тип функционирования, вышеупомянутые структуры образуются спонтанно: они самоорганизуются. Для многих специалистов оказалось неожиданным то, что большое число таких систем проявляет поразительные аналогии в поведении при переходе от неупорядоченного состояния к упорядоченному. Это — сильный аргумент в пользу того, что функционирование таких систем подчиняется одним и тем же фундаментальным принципам. В нашей книге мы хотим рассмотреть эти принципы и основные концепции, а также представить необходимый для описания математический аппарат.

Книга рассчитана на тех студентов, изучающих физику, химию и биологию, которые хотели бы познакомиться с этими принципами и методами. Там, где это было возможно, я пы-

гался использовать элементарные математические методы. Поэтому для расчетов будет достаточно знать курс высшей математики, который читают в университетах и институтах. Много важных математических результатов в наше время похоронено под сложной терминологией. По возможности я попытался избежать этого недостатка хотя, конечно, пришлось использовать некоторое число технических терминов. Они разъясняются при их введении. Между прочим, многие методы можно использовать не только для описания самоорганизующихся систем, но и в других проблемах. Для полноты изложения включен ряд глав, требующих от читателя большого терпения и более глубокой математической подготовки. Эти главы отмечены звездочкой. Некоторые из них содержат результаты, полученные совсем недавно, так что они могут оказаться полезными и для исследователей.

Для понимания материала, относящегося к физическим, химическим и биологическим системам, не требуется слишком уж специальных знаний. Соответствующие главы расположены так, что читатель, специализирующийся в одной из этих дисциплин, может прочитать лишь «свою» главу. Однако я очень рекомендую прочитать и другие главы, просто для того, чтобы почувствовать, как далеко проходит аналогия между всеми этими системами. Я назвал новую дисциплину «синергетикой». В ней исследуется совместное действие многих подсистем (преимущественно одинаковых или же несколько различных видов), в результате которого на макроскопическом уровне возникает структура и соответствующее функционирование. С другой стороны, для нахождения общих принципов, управляющих самоорганизующимися системами, необходимо кооперирование многих различных дисциплин.

Мне хотелось бы выразить благодарность д-ру Лочу из издательства «Шпрингер», который предложил мне написать расширенный вариант моей статьи «Кооперативные явления в сильно неравновесных системах и в нефизических системах», опубликованной в журнале *Review of Modern Physics* (1975). В процессе работы над «расширением» статьи возникла совершенно новая книга. В мои намерения входило сделать эту область понятной читателям, изучающим физику, химию и биологию. В некотором отношении эта книга и предшествующая ей статья дополняют друг друга.

Мне доставляет удовольствие поблагодарить моих коллег и друзей, в особенности проф. В. Вейдлиха, за те многочисленные плодотворные обсуждения, которые проводились с ними в течение ряда лет. В написании этой книги огромную помощь мне оказали мой секретарь г-жа Ю. Функе и д-р А. Вундерлин, и я хочу выразить им глубокую признательность. Д-р Вундерлин

очень тщательно проверил формулы и вывод многих из них, подготовил много рисунков и сделал ряд ценных предложений, способствовавших улучшению текста рукописи. Несмотря на загруженность работой, г-жа Ю. Функе приготовила большинство рисунков и безупречно перепечатала несколько вариантов рукописи, включая и формулы. Ее старание и энтузиазм снова и снова укрепляли меня в желании закончить книгу.

Штутгарт, ноябрь, 1976

Герман Хакен

Цель

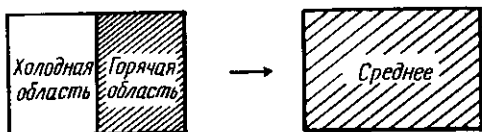
ПОЧЕМУ СЛЕДУЕТ ПРОЧЕСТЬ ЭТУ КНИГУ

1.1. Порядок и беспорядок. Несколько типичных примеров

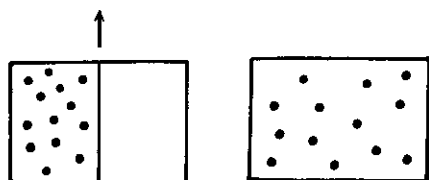
Начнем с некоторых наблюдений из повседневной жизни. Когда мы приводим холодное тело в контакт с нагретым телом, обмен теплом происходит так, что в конце концов температуры обоих тел выравниваются (фиг. 1.1). Система становится совершенно однородной, по крайней мере в макроскопическом смысле. Обратный процесс, однако, в природе никогда не наблюдается. Таким образом, процесс идет в одном направлении.

Если в сосуде, часть которого заполнена газом, убрать перегородку, газ заполнит все пространство (фиг. 1.2). Противоположный процесс не происходит: газ сам по себе не сконцентрируется в половине объема сосуда. Если капнуть чернила в воду, то капля будет расходиться до тех пор, пока чернила полностью не перемешаются с водой (фиг. 1.3). Обратный процесс не наблюдался никогда. И еще один пример. Когда самолет в небе выписывает дымом слова, буквы постепенно размываются и исчезают (фиг. 1.4). Во всех этих случаях системы эволюционируют к единственному конечному состоянию, называемому состоянием теплового равновесия. Первоначальные структуры исчезают, заменяясь однородными системами. При анализе этих явлений на микроскопическом уровне, т. е. при рассмотрении движения атомов или молекул, обнаруживается, что беспорядок увеличился.

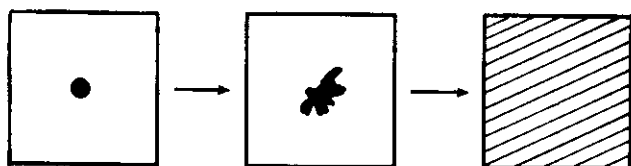
Завершим эти примеры рассмотрением деградации энергии. Представим себе, что у движущегося автомобиля остановился двигатель. Сначала автомобиль продолжает движение. С точки зрения физика, он имеет одну степень свободы (движение происходит в одном направлении), обладающую определенной кинетической энергией. Эта кинетическая энергия вследствие трения превращается в тепло (нагревая колеса и т. п.). Так как тепло означает наличие хаотического движения многих частиц, энергия одной степени свободы (энергия движения автомобиля) распределилась по многим степеням свободы. С другой стороны, совершенно очевидно, что путем простого нагревания колес мы не сможем сдвинуть автомобиль с места.



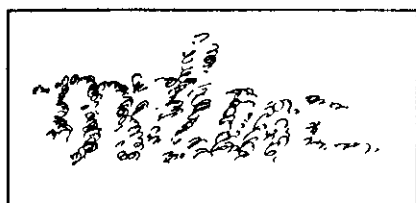
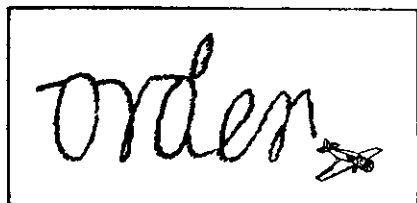
Фиг. 1.1. Необратимый обмен теплом.



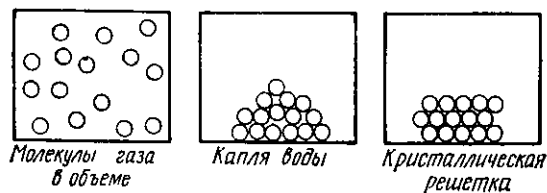
Фиг. 1.2. Необратимое расширение газа.



Фиг. 1.3. Расплавление капли чернил в воде.



Фиг. 1.4. Диффузия дымового облака.



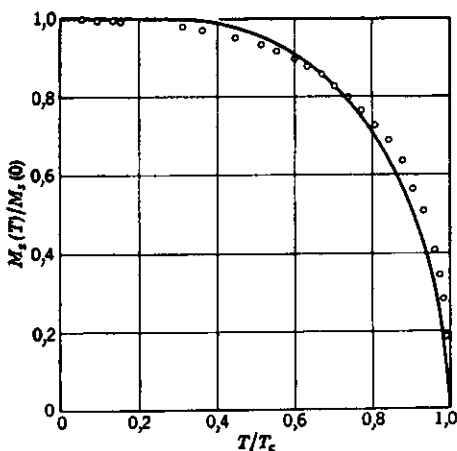
Фиг. 1.5. Вода в различных фазах.

Эти явления соответствующим образом описываются термодинамикой. В ней вводится величина, именуемая энтропией, которая является мерой степени беспорядка. Выведенные феноменологически законы термодинамики утверждают, что в замкнутой (т. е. изолированной от внешнего мира) системе энтропия всегда возрастает до своего максимального значения.

С другой стороны, когда мы воздействуем на систему извне, мы можем изменить степень ее упорядоченности. Рассмотрим,

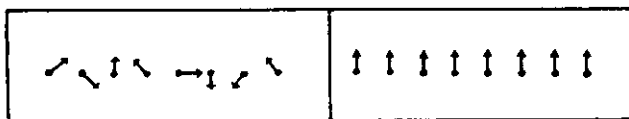
например, водяной пар (фиг. 1.5). При высоких температурах молекулы пара движутся свободно, без взаимной корреляции. При понижении температуры образуется капля жидкости, в которой расстояние между молекулами уже в среднем сохраняется. Их движение, таким образом, сильно скоррелировано. Наконец, при еще более низких температурах, в точке замерзания, вода превращается в кристаллы льда. Теперь молекулы расположены в определенном порядке. Такие переходы между различными агрегатными состояниями, называемыми также фазами, происходят весьма резко. Хотя молекулы каждый раз одни и те же, макроскопические свойства трех фаз существенно различны. И совершенно очевидно, что резко различаются их механические, оптические, электрические и тепловые свойства.

Упорядочение другого типа происходит в ферромагнетиках (например, в магнитной стрелке компаса). При нагревании у ферромагнетика внезапно исчезает намагниченность. При понижении температуры намагниченность внезапно появляется снова (фиг. 1.6). На микроскопическом, атомном уровне это можно себе представить так: магнит состоит из большого числа элементарных (атомных) магнитов (называемых спинами). При высоких температурах «магнитики» распределены по направлениям хаотически (фиг. 1.7). Их магнитные моменты, складываясь, взаимно уничтожаются. В результате макроскопическая намагниченность оказывается равной нулю. При температурах ниже критической T_c элементарные магниты выстраиваются в



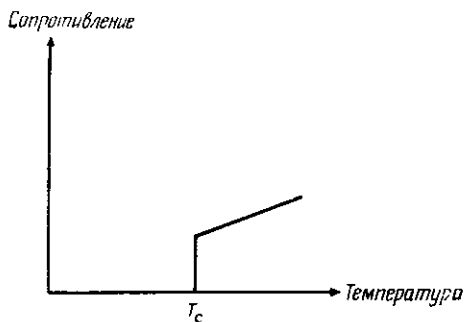
Фиг. 1.6. Намагниченность ферромагнетика как функция температуры; из книги [1.11].

определенном порядке, что приводит к появлению макроскопической намагниченности. Таким образом, упорядочение на микроскопическом уровне является причиной появления на макроскопическом уровне нового свойства материала. Переход из одной фазы в другую называется фазовым переходом. Столь же резкий переход наблюдается в сверхпроводниках. В некоторых



Фиг. 1.7. Элементарные магниты, хаотично распределенные по направлениям при $T > T_c$ (слева); справа — упорядоченное расположение элементарных магнитов при $T < T_c$.

металлах и сплавах ниже определенной температуры (фиг. 1.8) электрическое сопротивление внезапно и полностью исчезает. Это явление обусловлено определенным упорядочением электронов в металле. Есть еще много других примеров подобных фазовых переходов, между которыми часто обнаруживается поразительное сходство.



Фиг. 1.8. Сопротивление сверхпроводника как функция температуры (схематично).

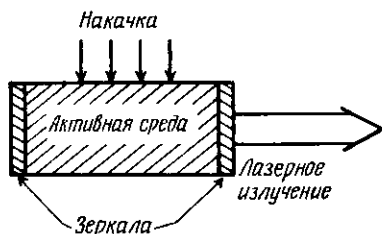
этом, помимо многого другого, происходит следующее. Переработка энергии, подводимой к системе в виде химической энергии, на микроскопическом уровне проходит много этапов, что в конце концов приводит к явлениям упорядочения на макроскопическом уровне: образованию макроскопических структур (морфогенез), движению с небольшим числом степеней свободы и т. д.

Возможность объяснения биологических явлений, особенно образования на макроскопическом уровне порядка из беспорядка, на основе термодинамических законов и физических явлений, уже упомянутых выше, кажется довольно нереальной.

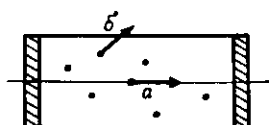
Эта область исследования весьма интересная, но она не дает ключа к объяснению каких-либо биологических процессов, где порядок и должное функционирование достигаются не понижением температуры, а постоянным подводом энергии и вещества к системе. При

этом, помимо многого другого, происходит следующее. Переработка энергии, подводимой к системе в виде химической энергии, на микроскопическом уровне проходит много этапов, что в конце концов приводит к явлениям упорядочения на макроскопическом уровне: образованию макроскопических структур (морфогенез), движению с небольшим числом степеней свободы и т. д.

Это привело ряд известных ученых к выводу о том, что такое объяснение невозможно. Не будем, однако, приходить в уныние от мнения некоторых авторитетов. Рассмотрим лучше проблему с другой точки зрения. Пример с автомобилем учит нас, что энергию многих степеней свободы можно сконцентрировать на одной степени свободы. Действительно, в двигателе автомобиля химическая энергия бензина сначала превращается в тепло, затем в рабочем цилиндре поршень выталкивается в одном определенном ему направлении, посредством чего энергия многих



Фиг. 1.9. Типичная схема лазера.



Фиг. 1.10. Фотоны, испущенные в аксиальном направлении (а), имеют гораздо большее время жизни t_0 в резонаторе, чем все другие фотоны (б).

степеней свободы превращается в энергию одной степени свободы. В связи с этим важно напомнить два обстоятельства.

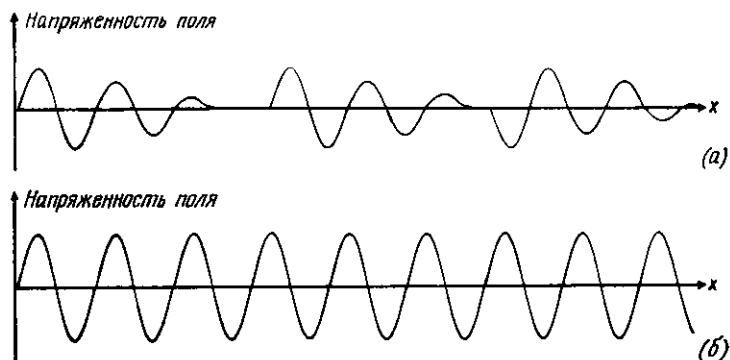
1) Весь процесс происходит в машине, созданной руками человека. В ней мы установили четкие ограничения.

2) Процесс начинается из сильно неравновесного состояния. Расширение газа, толкающего цилиндр, соответствует приближению к тепловому равновесию при заданных ограничениях.

Против использования этой машины в качестве модели для биологических систем сразу же можно возразить, что биологические системы самоорганизуются, а не созданы искусственно. Это приводит нас к вопросу о том, можно ли в природе найти системы, которые функционируют в состоянии, далеком от состояния теплового равновесия (см. выше замечание 2) при ограничениях, определяемых самой природой. Некоторые системы такого типа были открыты совсем недавно, другие известны уже давно. Мы приведем несколько типичных примеров.

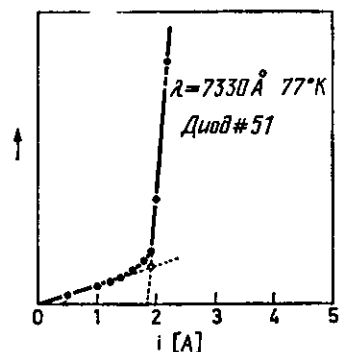
Системой, находящейся на границе между естественными системами и искусственными устройствами, является *лазер*. Здесь мы рассмотрим лазер как прибор, созданный руками человека, хотя лазерная генерация (в микроволновом диапазоне) была обнаружена и в межзвездном пространстве. В качестве примера рассмотрим твердотельный лазер. Это — твердый стержень, в который внедрены атомы определенного типа

(фиг. 1.9). Обычно на торцах стержня устанавливаются зеркала. Каждый атом может возбуждаться действием извне, например с помощью освещения. После этого атом действует как



Фиг. 1.11. Волновые цуги, испущенные из лампы (а), из лазера (б).

микроскопическая антенна, испуская цуг световых волн. Процесс излучения длится обычно 10^{-8} с, и испущенный цуг имеет длину около 3 м. Зеркала служат



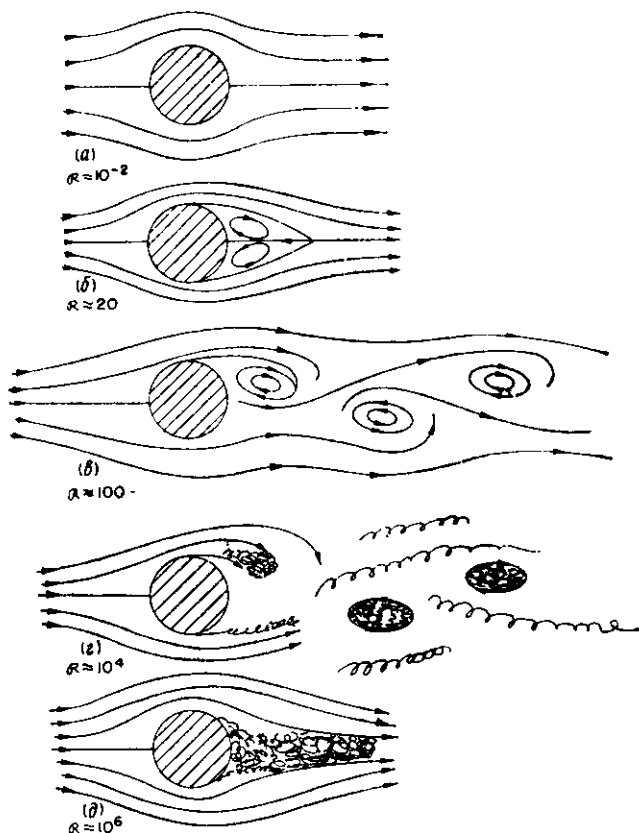
Фиг. 1.12. Выходная мощность лазера в зависимости от мощности накачки ниже и выше порога генерации (М. Г. Пилкун, не опубликованные результаты).

для селекции таких цугов: бегущие в аксиальном направлении цуги отражаются несколько раз от зеркал и остаются в лазере более продолжительное время, остальные быстро покидают объем (фиг. 1.10). Когда мы начинаем накачивать в лазер энергию, происходит следующее. При малых мощностях накачки лазер работает как лампа. Атомные антенны излучают световые цуги независимо друг от друга (хаотично). При определенном значении мощности накачки, называемой пороговой мощностью лазерной генерации, происходит совершенно новое явление. Похоже, что некий демон заставляет атомные антенны осциллировать в фазе. Они испу-

скают теперь один гигантский цуг, длина которого может быть 300 000 км! (Фиг. 1.11). При дальнейшем увеличении входной мощности (накачки) интенсивность излученного света (т. е. выходная мощность) резко возрастает (фиг. 1.12). Очевидно, что макроскопические свойства лазера при этом коренным об-

разом меняются, причем это изменение напоминает фазовый переход, например, в ферромагнетике.

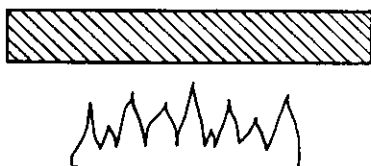
Как мы увидим далее, эта аналогия проходит гораздо глубже. Очевидно, что лазер является системой, находящейся вдали



Фиг. 1.13. Обтекание цилиндра жидкостью при различных скоростях (по книге [1.12]).

от состояния теплового равновесия. Когда энергия накачки входит в систему, она превращается в лазерный свет с его уникальными свойствами. Затем этот свет излучается лазером. Очевиден вопрос: что это за демон, который заставляет подсистемы (т. е. атомы) вести себя так организованно? Или, выражаясь более научно, какие механизмы и принципы способны объяснить самоорганизацию атомов (или атомных антенн)? Если лазер накачивается еще более мощной накачкой, снова внезапно происходит совершенно новое явление. Стержень

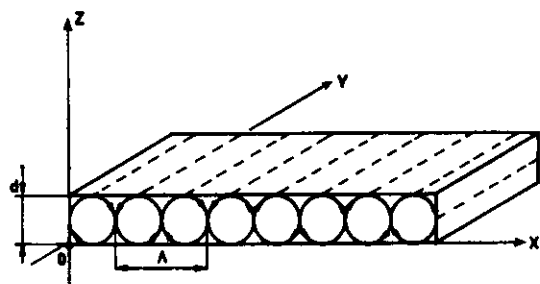
регулярно испускает световые вспышки чрезвычайно короткой длительности, скажем 10^{-12} с. За другим примером обратимся теперь к гидродинамике. Пусть это будет обтекание жидкостью цилиндра. При малой скорости картина обтекания такая, как на фиг. 1.13, а. При более высокой скорости внезапно возникает новая, статическая картина: появляется пара вихрей (фиг. 1.13, б). При еще более высокой скорости возникает динамическая картина, вихри теперь осциллируют (фиг. 1.13, в). Наконец при еще более высокой скорости появляется нерегулярная картина — турбулентный поток (фиг. 1.13, д). В этой книге мы не будем больше обращаться к этому примеру, но рассмотрим следующий.



Фиг. 1.14. Слой жидкости нагревается снизу при малых числах Рэлея. Перенос тепла осуществляется благодаря теплопроводности.

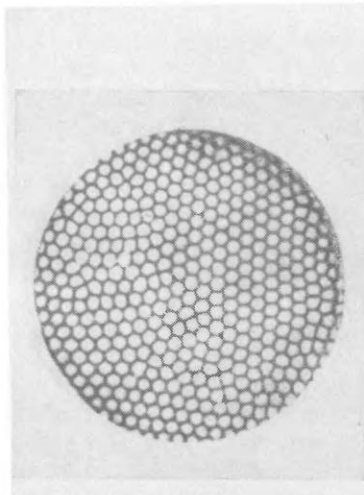
Конвективная неустойчивость (неустойчивость Бенара).

Рассмотрим слой жидкости, подогреваемый снизу, в то время как сверху температура поддерживается постоянной (фиг. 1.14). При малой разности температур (точнее, при малом градиенте) тепло переносится в результате процесса теплопроводности и

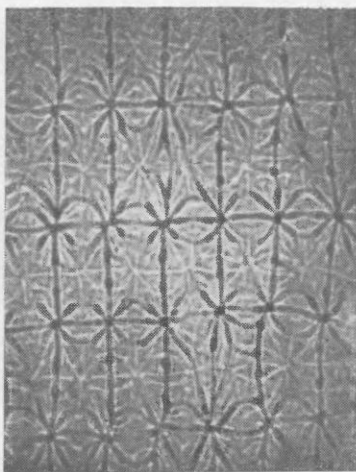


Фиг. 1.15. Движение жидкости в цилиндрических ячейках при числах Рэлея, несколько превышающих критическое значение.

жидкость остается в покое. Когда температурный градиент достигает некоторого критического значения, в жидкости начинается макроскопическое движение. Так как нагретые области жидкости расширяются, они имеют более низкую плотность и всплывают наверх, охлаждаются и опускаются снова на дно. Удивительно то, что это движение происходит четко упорядоченным образом. При этом наблюдаются либо цилиндрические (фиг. 1.15), либо гексагональные ячейки (фиг. 1.16). Таким об-



Фиг. 1.16. Ячеистая структура жидкости при неустойчивости Бенара (вид сверху) (по книге [1.13]).



Фиг. 1.17. Образование структуры в движении жидкости при больших числах Рэлея (по работе [1.14]).

разом, из совершенно однородного состояния возникает динамическая хорошо упорядоченная пространственная структура. При еще большем увеличении температурного градиента возникает новое явление. В цилиндрах начинается волновое движение вдоль их осей. Другие структуры показаны на фиг. 1.17. Отметим, что лепестки узлов осциллируют во времени. Эти явления играют фундаментальную роль, например, в метеорологии, определяя процессы движения воздуха и образования облаков (см. фиг. 1.18).

Возьмем другой, тесно связанный с предыдущим пример — *неустойчивость Тейлора*. Здесь жидкость находится между двумя вращающимися коаксиальными цилиндрами. При скорости вращения, превышающей критическую, возникают вихри Тейлора. В других экспериментах один из цилиндров еще и нагревается. Очевидно, что этот и подобные ему эффекты имеют отношение к астрофизике: во многих случаях звезды можно рассматривать как вращающиеся жидкие массы, внутри которых существуют температурные градиенты. Имеются и другие многочисленные примеры явления упорядочения в физических системах, далеких от теплового равновесия. Перейдем теперь к химии.

В ходе многих химических реакций образуются пространственные, временные или пространственно-временные структуры. Они возникают, в частности, в реакции Белоусова — Жаботинского. Для ее осуществления смешивают $\text{Ce}_2(\text{SO}_4)_3$, KBrO_3 ,



Фиг. 1.18. Типичный вид «улиц», образующихся в облаках (по работе [1.15]).

$\text{CH}_2(\text{COOH})_2$, H_2SO_4 и добавляют несколько капель ферроина (окислительно-восстановительного индикатора). Получающуюся однородную смесь переливают в пробирку, где сразу же начинаются временные осцилляции. Раствор периодически меняет

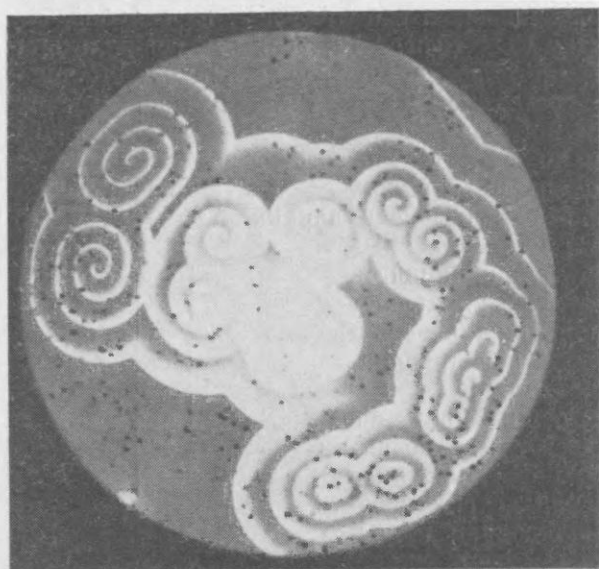
цвет — с красного, означающего избыток Ce^{3+} , на голубой, соответствующий избытку Ce^{4+} (фиг. 1.19). Так как реакция идет в замкнутой системе, система в конце концов приходит в однородное равновесное состояние. Другие примеры образования химических структур показаны на фиг. 1.20. В последующих главах этой книги мы рассмотрим химические реакции, которые происходят в *стационарных условиях*, где тем не менее возникают пространственно-временные осцилляции. Как мы увидим, процессы образования подобных структур подчиняются принципам, аналогичным тем, которые управляют переходами типа порядок — беспорядок в лазерах, а также в гидродинамических и других системах.

Последний набор наших примеров взят из *биологии*. Здесь уже ярко выражено спонтанное формирование структур на совершенно других уровнях. При этом мы наблюдаем колоссальное разнообразие видов уже в глобальном масштабе. Какие факторы определяют их распределение и численность? Чтобы продемонстрировать, какого типа корреляции наблюдаются, рассмотрим фиг. 1.21, которая отображает временные колебания численности американских зайцев-беляков и рысей. Какой механизм вызывает появление колебаний? В процессах эволюции фундаментальную роль играет отбор. Мы увидим, что отбор видов подчиняется тем же самым законам, что и, например, селекция лазерных мод.

И последний пример. В физиологии развития давно известно, что из совокупности одинаковых клеток могут спонтанно организовываться структуры с хорошо различаемыми областями. В эмбриогенезе моделью клеточного взаимодействия может служить агрегация слизевика (*Dictyostelium discoideum*). Диктиостелиум образует многоклеточный организм путем соединения отдельных клеток. В фазе роста организм существует в виде отдельных амебовидных клеток. Через несколько часов после прекращения роста эти клетки собираются и образуют полярное тело, вдоль которого они разделяются на споровые и стебельковые клетки, составляющие плодовое тело слизевика. Отдельные клетки способны время от времени спонтанно испускать в окружающее пространство порции молекул определенного типа, называемые цАМФ (циклический аденозин-3'-5'-монофосфат). Более того, клетки способны усиливать импульсы цАМФ. Таким образом, они спонтанно и стимулированно



Фиг. 1.19. Пространственная структура, возникающая при протекании реакции Белоусова — Жаботинского (схематично).

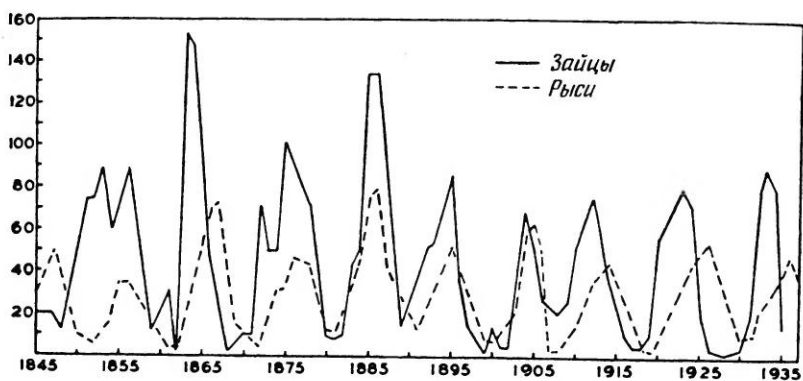


(a)

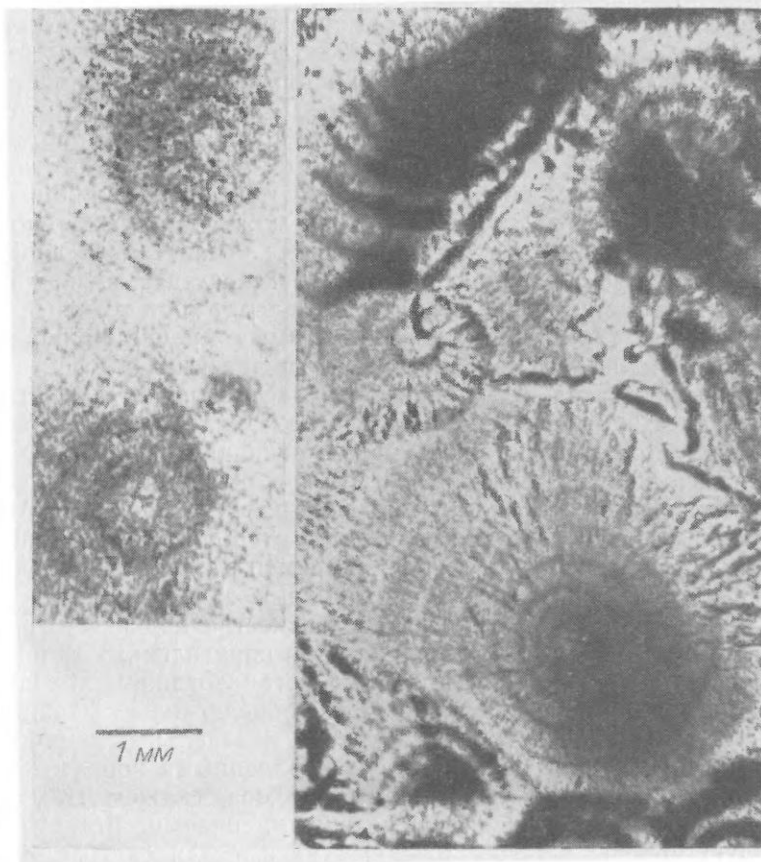


(б)

Фиг. 1.20. Спирали химической активности в неглубокой чашке. Когда волны соударяются «в лоб», обе они исчезают. (Фотографии сделаны А. Т. Винфри с помощью поляроида Sx-70.)



Фиг. 1.21. Изменение численности рысей и американских зайцев-беляков, установленное по числу шкурок, полученных компанией «Хадсон Бей» (по работе [1.16]). По оси ординат отложена численность в тысячах.



Фиг. 1.22. Волновая картина хемотаксической активности в плотных клеточных слоях слизевика (по работе [1.9]).

выделяют химические вещества (ср. спонтанное и стимулированное излучение света атомами в лазере). Происходит коллективное испускание химических импульсов, которые мигрируют в виде волн концентрации из центра, что приводит к возникновению градиента концентрации цАМФ. Отдельные клетки «чувствуют» направление градиента и мигрируют к центру с помощью псевдоподий. Получающиеся в результате макроскопические волновые структуры (спиральные или концентрические круги) показаны на фиг. 1.22. Они поразительно похожи на картину волн химической концентрации (фиг. 1.20).

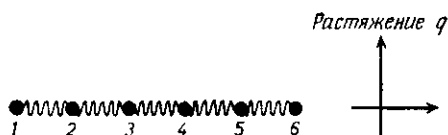
1.2. Некоторые типичные задачи и трудности

В предыдущем параграфе мы привели несколько типичных примеров явлений, часть из которых мы намереваемся изучить подробнее. Первый класс примеров относился к замкнутым системам. Из приведенных и многих других примеров термодинамика делает вывод, что в замкнутых системах энтропия всегда является неубывающей функцией. Доказательство этой теоремы дается в статистической механике. Говоря откровенно, эта проблема, несмотря на многочисленные усилия, полностью не решена. Здесь мы ее едва коснемся, но с несколько иной точки зрения. Нас интересует не то, как можно в *совершенно общем случае доказать*, что энтропия всегда возрастает, а скорее другое — *каким образом и как быстро* возрастает энтропия в данной системе? Мы увидим, что, хотя в термостатике и в так называемой термодинамике необратимых процессов понятие энтропии и связанные с ним понятия чрезвычайно полезны, они оказываются слишком грубы при рассмотрении самоорганизующихся структур. В общем случае в таких структурах энтропия изменяется лишь на очень малую величину. Кроме того, из статистической механики известно, что энтропия может флуктуировать. Таким образом, необходимы другие подходы. Мы попытаемся выяснить, какие черты являются общими для описанных выше неравновесных систем, например лазеров, гидродинамических систем, химических реакций и т. д. Во всех этих случаях полная система составлена из множества подсистем, например атомов, молекул, клеток и т. д. При определенных условиях эти подсистемы участвуют в хорошо организованном коллективном движении или выполняют вполне определенные функции.

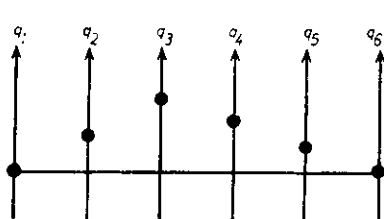
Чтобы прояснить некоторые из центральных проблем, рассмотрим, например, струну с закрепленными концами. Она состоит из очень большого числа атомов, скажем 10^{22} , которые связаны между собой определенными силами. Введем следующую модель: цепочку точечных масс, соединенных пружинами (фиг. 1.23). Чтобы модель была «реалистичной», точечных масс

должно быть очень много. Задача такова: определить движение очень большого числа взаимодействующих частиц (точечных масс) или подсистем. К решению этой сложной задачи многих тел мы подойдем с таких позиций: введем в ЭВМ уравнения движения точечных масс и реалистические начальные условия, например, такие, которые соответствуют фиг. 1.24. ЭВМ выдаст нам большие таблицы чисел, задающие положения точечных масс как функции времени. Первый существенный момент заключается в следующем. Эти таблицы довольно бесполезны до тех пор, пока наш мозг не выберет определенные типичные свойства. Так, мы обнаруживаем, что между положениями соседних атомов имеются определенные корреляции (фиг. 1.25). Кроме того, при внимательном рассмотрении мы находим, что движение периодически во времени. Однако таким путем мы никогда не откроем того, что движение струны описывается с помощью пространственной синусоидальной волны (фиг. 1.26), если, конечно, мы не знаем этого ответа заранее и не ввели его в качестве начального условия в ЭВМ. Теперь, синусоидальная (пространственная) волна характеризуется определенными величинами — длиной волны и амплитудой, которые совершенно не известны на микроскопическом (атомном) уровне. Существенный вывод из нашего примера заключается в следующем: для описания коллективного поведения нам требуются совершенно новые, по сравнению с микроописанием, концепции. Понятия длины волны и амплитуды совершенно отличны от понятия положения атомов. Конечно, когда мы знаем характеристики синусоидальной волны, мы можем вывести и положения отдельных атомов.

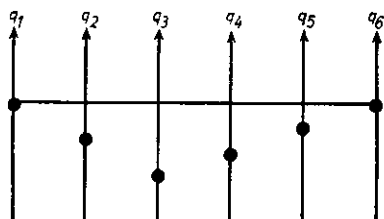
В более сложных системах для описания самих пространственно-временных структур или их функционирования могут подходить совсем другие «моды». Таким образом, наш «механический» пример следует рассматривать как аллгорию, которая, однако, выявляет главную проблему многокомпонентных систем, именно: какое описание адекватно в макроскопических терминах или каковы те моды, которые описывают поведение системы? Почему машинный счет в рассмотренном примере не приводит к этим модам? Причина заключена в линейности соответствующих уравнений движения, которая обуславливает то, что любая суперпозиция решений также является решением этих уравнений. Как мы увидим, уравнения, описывающие самоорганизацию, — существенно нелинейные уравнения. Из этих уравнений мы найдем в последующем, что моды могут или *конкурировать*, так что только одна выживает, или *сосуществовать*, стабилизируя друг друга. Очевидно, концепция моды имеет огромное преимущество перед микроскопическим описанием. Вместо необходимости знать все «атомные» координаты очень



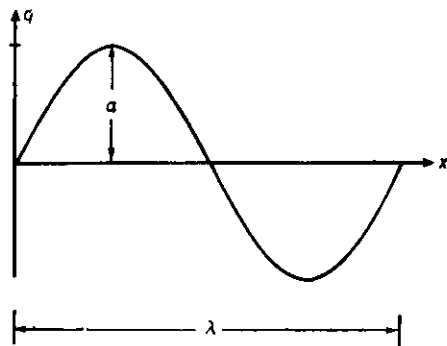
Фиг. 1.23. Точечные массы, соединенные пружинами.



Фиг. 1.24. Начальная конфигурация точечных масс.



Фиг. 1.25. Положения точечных масс в более поздний момент времени.



Фиг. 1.26. Примеры синусоидальных волн в струне.
 $q = \xi \sin 2\pi x/\lambda$, ξ — амплитуда, λ — длина волны.
 $\lambda = 2L/n$, n — целое число.

многих степеней свободы, нам требуется знать только один или несколько параметров, например амплитуду моды. Как мы увидим позже, амплитуды мод определяют тип и степень упорядоченности. Поэтому мы называем их параметрами порядка и устанавливаем связь с концепцией параметра порядка в теории фазовых переходов. Концепция моды предполагает свойство масштабного подобия (скейлинга). Пространственно-временные структуры могут быть подобными, отличаясь только величиной (масштабом) амплитуды. (Отметим, что принцип подобия играет важную роль в распознавании образа мозгом, но до сих пор нет механизма, объясняющего этот факт. Так, например, треугольник распознается как таковой независимо от его размера и положения.)

Выше, используя *аллегория*, мы продемонстрировали, как можно описать макроскопические упорядоченные состояния с помощью небольшого числа параметров (или степеней свободы). В дальнейшем изложении мы выведем несколько методов нахождения уравнений для параметров порядка. Это приводит нас к последнему вопросу: даже если мы имеем такие параметры, как происходит самоорганизация, например, как происходит спонтанное образование структур? По отношению к нашей аллегории с цепочкой этот вопрос будет звучать следующим образом. Рассмотрим цепочку, находящуюся в покое (амплитуда $\zeta = 0$). Внезапно она начинает движение в определенной моде. Это, конечно, невозможно, поскольку противоречит фундаментальным законам физики, например закону сохранения энергии. Таким образом, мы должны подвести энергию к системе, чтобы привести ее в движение и чтобы скомпенсировать потери на трение при движении. Поразительным свойством самоорганизующихся систем, таких, как рассмотренные в разд. 1.1, является следующее. Хотя энергия подводится к системе в *совершенно хаотической форме*, система образует вполне определенную макроскопическую моду. Нужно сказать, что таким свойством наша механическая модель цепочки не обладает. При хаотическом возбуждении цепочка с трением осциллирует хаотически. Системы же, которые мы будем изучать, организуют себя *когерентно*. Мы обсудим подход к описанию этих удивительных свойств в следующем разделе.

В заключение сделаем замечание относительно взаимной связи между микроскопическими переменными и параметрами порядка, опять используя в качестве примера нашу механическую цепочку. Поведение координаты μ -й точечной массы ($\mu = 1, 2, 3, \dots$) описывается и задается синусоидальной волной и величиной параметра порядка: таким образом, поведение атомов определяется параметром порядка. С другой стороны, образование синусоидальной волны возможно лишь в резуль-

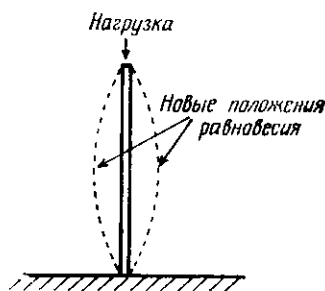
тате соответствующего коллективного движения атомов. Этот пример дает нам некую аллгорию, которой можно воспользоваться в других областях. Возьмем крайний случай — мозг. Подсистемами здесь являются нейроны и связи между ними. Химические и электрические процессы, протекающие в них, описываются громадным числом микроскопических переменных. Параметрами порядка являются в конечном итоге мысли. Обе системы влияют друг на друга. В связи с этим сделаем еще одно последнее замечание. Как мы видели, на макроскопическом уровне требуются совершенно иные концепции, нежели на микроскопическом. Следовательно, для полного описания функционирования мозга недостаточно рассмотрения только электрохимических процессов. Более того, ансамбль мыслей снова образует некую микроскопическую систему, параметры порядка которой нам не известны. Для их адекватного описания нам потребуются новые концепции, которые выходят за пределы нашего мышления — неразрешимая проблема для нас. Из-за недостатка места мы не можем здесь останавливаться на вопросах, которые тесно связаны с глубокими проблемами логики и которые, в несколько иной форме, хорошо известны математикам, — упомянем, например, проблему разрешимости. Системы же, рассматриваемые в нашей книге, имеют более простую природу и таких проблем здесь не возникнет.

1.3. План изложения материала

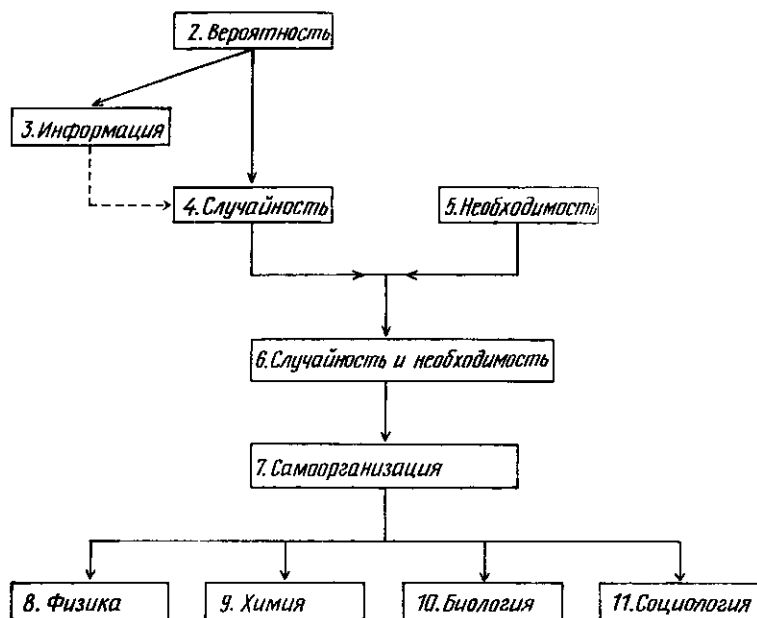
Поскольку во многих случаях самоорганизация возникает из хаотичных состояний, сначала мы должны развить методы адекватного описания таких состояний. Очевидно, что хаотические состояния содержат в себе неопределенность. Если бы мы знали все величины, мы могли бы по крайней мере выписать их, найти некоторые правила их расположения и, таким образом, справились бы с хаосом. Вместо этого мы должны иметь дело с неопределенностями, или, более точно, с вероятностями. Поэтому первая же глава основной части текста будет посвящена теории вероятностей. Следующий вопрос состоит в том, как описывать системы, относительно которых имеется очень мало сведений. Это естественным образом приводит нас к основным концепциям теории информации. Применяя их к физике, мы, так сказать, в качестве побочного продукта получаем основные соотношения термодинамики. Здесь мы приходим к понятию энтропии, к тому, что с ее помощью можно сделать и какие проблемы остались нерешенными. Затем перейдем к динамическим процессам. Начав с простых примеров процессов, обусловленных случайными событиями, разовьем элементарным, но систематическим образом математический аппарат для их рассмотрения. После

изучения «случайности» перейдем к «необходимости», рассматривая полностью детерминированные «движения». Сюда относятся уравнения механики, а также многие другие процессы, описываемые детерминистскими уравнениями. Центральной проблемой является определение равновесных конфигураций (или мод), а также исследование их устойчивости. Когда изменяются внешние параметры (например, такие параметры, как мощность накачки в лазере, температурный градиент в жидкостях, химические концентрации), старые конфигурации (моды) становятся неустойчивыми. Эта неустойчивость — необходимое условие появления новых мод. Удивительно то, что часто встречаются ситуации, когда для существования решения требуется наличие случайного события. Рассмотрим пример из статики — стержень, находящийся под нагрузкой (фиг. 1.27). При малых нагрузках прямое положение стержня устойчиво. Однако, когда нагрузка превысит некое критическое значение, прямое положение становится неустойчивым и появляются два новых эквивалентных положения равновесия (фиг. 1.27). Вопрос о том, какое из этих двух положений примет стержень, не может быть решен в рамках чисто детерминистской теории (если не допускается асимметрия). В реальной ситуации эволюция системы определяется как детерминированными, так и случайными факторами («силами») или, по выражению Монода, «случайностью и необходимостью». Для объяснения основных концепций и математических методов мы снова будем использовать простейшие примеры. После этого предварительного рассмотрения мы перейдем в гл. 7 к центральному вопросу — самоорганизации. Там мы узнаем, как находить параметры порядка, как они «подчиняют» себе подсистемы и как получать уравнения для параметров порядка. В эту главу включены методы описания непрерывно распределенных сред. Обсуждается также фундаментальная роль флуктуаций в самоорганизующихся системах. В гл. 8—10 детально рассмотрены примеры, взятые из физики, химии и биологии. Логическая связь между главами книги представлена ниже на схеме.

По ходу изложения материала станет ясно, что совершенно различные системы ведут себя совершенно аналогично. Это поведение подчиняется нескольким фундаментальным принципам. Договоримся, однако, что мы *ищем* такие аналогии, которые проявляются в существенных, основных свойствах рассмат-



Фиг. 1.27. Деформация стержня под действием нагрузки.



риваемых систем. Совершенно естественно, что если каждую из этих систем анализировать все более и более подробно вплоть до составляющих ее подсистем, то между системами могут обнаружиться все большие и большие различия.

Вероятность

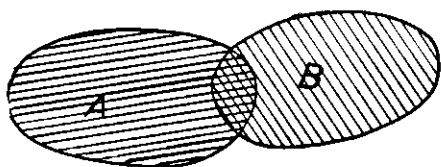
ЧЕМУ МЫ МОЖЕМ НАУЧИТЬСЯ ИЗ АЗАРТНЫХ ИГР

2.1. Объект нашего исследования:
выборочное пространство

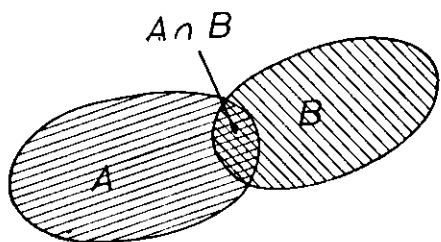
Объекты, которые мы будем изучать в этой книге, могут быть совершенно различными. В большинстве случаев, однако, мы будем рассматривать системы, состоящие из очень большого числа подсистем одного и того же типа или нескольких различных типов. В этой главе мы исследуем подсистемы и определим несколько простых соотношений. Простые подсистемы могут быть следующими:

атомы	растения
молекулы	животные
фотоны (кванты света)	студенты
клетки	

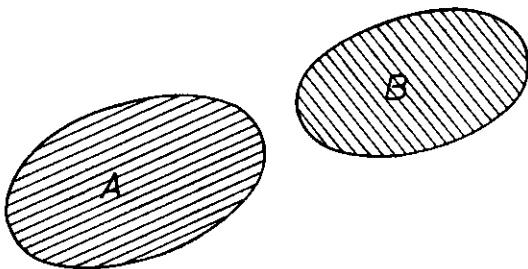
Рассмотрим, в частности, некую группу студентов. Каждый член этой группы будет обозначаться индексом $\omega = 1, 2, \dots$. Назовем отдельных представителей рассматриваемой группы выборочными точками. Полная группа, или, выражаясь математически, полный набор индивидуумов, называется выборочным пространством (Ω), или выборкой. Выборка Ω , состоящая из выборочных точек $1, 2, \dots, M$, обозначается символом $\Omega = \{1, 2, \dots, M\}$. Слово «выборка» означает, что при проведении статистических расчетов выбирается определенный набор индивидуумов. Один из простейших примеров — это бросание монеты. Если обозначить герб через единицу, а решку через нуль, то выборочным пространством будет $\Omega = \{0, 1\}$. Бросание означает случайный выброс 0 или 1. Другой пример дают возможные исходы бросания игральной кости. Если обозначить различные грани кости числами $1, 2, \dots, 6$, то выборочным пространством будет $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. Хотя здесь мы не будем обсуждать азартные игры (весьма интересный предмет сам по себе), воспользуемся подобными простыми примерами для демонстрации основных идей. Действительно, вместо бросания кости, мы



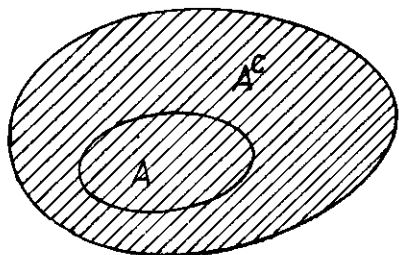
Фиг. 2.1. Объединение $A \cup B$ множеств A и B содержит все элементы A и B . (Для иллюстрации соотношения (2.3) мы представили множества A и B точками на плоскости, а не на действительной оси.)



Фиг. 2.2. Пересечение $A \cap B$ множеств A и B .



Фиг. 2.3. Непересекающиеся множества не имеют общих элементов.



Фиг. 2.4. Множество разложено на A и дополнительное множество A^c .

можем производить определенные эксперименты или измерения, исход которых имеет вероятностную природу. Точка выборки называется также элементарным событием, поскольку ее выбор является исходом «эксперимента» (бросания кости и т. п.).

По отношению к наборам (множествам) удобно ввести следующие обозначения. Совокупность выборочных точек ω будет называться поднабором (подмножеством) Ω и обозначаться буквами A, B, \dots . Пустое множество обозначается символом \emptyset , число точек в множестве S обозначается через $|S|$. Если все точки множества A содержатся в множестве B , мы пишем

$$A \subset B \text{ или } B \supset A. \quad (2.1)$$

Если оба множества содержат одни и те же точки, мы пишем

$$A = B. \quad (2.2)$$

Объединение

$$A \cup B = \{\omega \mid \omega \in A \text{ или } \omega \in B\} \quad (2.3)^1$$

есть новое множество, которое содержит все точки, находящиеся либо в A , либо в B (фиг. 2.1). Пересечение

$$A \cap B = \{\omega \mid \omega \in A \text{ и } \omega \in B\} \quad (2.4)$$

есть множество, в котором присутствуют все точки, содержащиеся одновременно как в A , так и в B (фиг. 2.2). Множества A и B являются непересекающимися (несовместными), если (фиг. 2.3)

$$A \cap B = \emptyset. \quad (2.5)$$

Все выборочные точки из Ω , которые не содержатся в A , образуют множество A^c , называемое дополнительным к A (фиг. 2.4). Вышеприведенные примеры содержат счетное множество выборочных точек $\omega = 1, 2, \dots, n$ (где n может быть бесконечным). Имеются, однако, другие случаи, когда подсистемы непрерывны. Представим себе, например, поверхность тонкой оболочки. Можно подразделять эту поверхность на все более мелкие части, так что в пределе число возможностей выбора участка поверхности станет несчетным. Однако, если не оговорено противное, мы будем считать, что выборочное пространство Ω дискретно.

¹⁾ Правая часть (2.3) читается следующим образом: все ω , для которых ω есть элемент либо A , либо B .

Упражнения к разд. 2.1

Докажите соотношения 1—4:

1. Если $A \subset B$ и $B \subset C$, то $A \subset C$;
если $A \subset B$ и $B \subset A$, то $A = B$.
2. $(A^c)^c = A$, $\Omega^c = \emptyset$, $\emptyset^c = \Omega$.
3. а) $(A \cup B) \cup C = A \cup (B \cup C)$ (ассоциативность),
б) $A \cup B = B \cup A$ (коммутативность),
в) $(A \cap B) \cap C = A \cap (B \cap C)$,
г) $A \cap B = B \cap A$ (коммутативность),
д) $A \cap (B \cup C) = (A \cap B) \cup (A \cap C)$ (дистрибутивность),
е) $A \cup A = A \cap A = A$, $A \cup \emptyset = A$, $A \cap \emptyset = \emptyset$,
ж) $A \cup \Omega = \Omega$, $A \cap \Omega = A$, $A \cup A^c = \Omega$, $A \cap A^c = \emptyset$,
з) $A \cup (B \cap C) = (A \cup B) \cap (A \cup C)$ (дистрибутивность),
и) $(A \cap B)^c = A^c \cup B^c$; $(A \cup B)^c = A^c \cap B^c$.

Указание. Возьмите произвольный элемент ω из множеств, определенных в левых частях, и покажите, что он содержится в множестве правых частей соответствующих уравнений. Затем сделайте то же самое с произвольным элементом ω' из правых частей.

4. Законы Де Моргана:

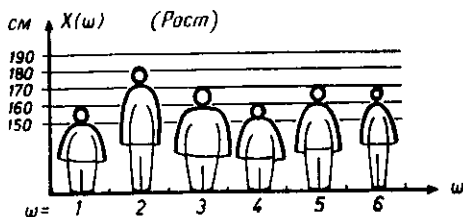
- а) $(A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_n)^c = A_1^c \cap A_2^c \cap \dots \cap A_n^c$.
- б) $(A_1 \cap A_2 \cap \dots \cap A_n)^c = A_1^c \cup A_2^c \cup \dots \cup A_n^c$.

Указание. Доказывайте методом полной индукции.

2.2. Случайные величины

Поскольку наша конечная цель — количественная теория, мы должны описать свойства выборочных точек количественно. Рассмотрим, например, атомы газа, которые будем обозначать индексом ω . В каждый данный момент атом ω имеет определенную скорость, которая является измеримой величиной. Другие примеры: люди, классифицируемые по росту; избиратели, отвечающие при голосовании «да» или «нет», при этом числа 1 или 0 приписываются соответственно ответам «да» или «нет». В каждом случае мы можем приписать выборочной точке ω численные значения функции X , так что для каждого ω имеем число $X(\omega)$, или, на математическом языке, $\omega \rightarrow X(\omega)$ (фиг. 2.5). Функция X называется случайной величиной, потому что точка ω выбирается случайным образом, например при измерении скорости индивидуальной молекулы газа или при бросании ко-

сти. Выбор точки ω определяет $X(\omega)$. Можно, конечно, одной выборочной точке ω приписать несколько численных значений функций X_1, X_2, \dots , например, молекулы можно различать по весу, скорости, энергиям вращения и т. д. Перечислим несколько простых свойств случайных величин. Если X и Y — случайные переменные, то их линейная комбинация $aX + bY$, произведение XY и отношение X/Y ($Y \neq 0$) также являются случайными переменными. Можно сделать более общее утверждение: если



Фиг. 2.5. Случайная переменная $X(\omega)$ (рост людей).

φ — функция двух обычных переменных и X, Y — случайные переменные, то $\omega \rightarrow \varphi(X(\omega), Y(\omega))$ также является случайной переменной. Особенно интересен случай суммы случайных переменных

$$S_n(\omega) = X_1(\omega) + \dots + X_n(\omega). \quad (2.6)$$

Поскольку в дальнейшем мы будем иметь дело с совместным действием многих подсистем (нумеруемых индексом $i = 1, 2, \dots, n$), такая сумма будет часто встречаться.

Примеры: вес n человек, находящихся в лифте, полная интенсивность испускания импульсов системой из n нейронов или световая волна, составленная из n волновых пакетов, испущенных атомами. В дальнейшем мы увидим, что функции, подобные (2.6), появляются как в случае независимого действия подсистем (людей, нейронов, атомов), так и тогда, когда они ведут себя кооперативно, хорошо организованным образом.

2.3. Вероятность

Теория вероятностей, по крайней мере частично, берет свое начало из рассмотрения исходов азартных игр. И сейчас еще для иллюстрации основных идей удобно обращаться к примерам из этой области. Одна из простейших игр — бросание монеты. Имеется два исхода: выпадет либо герб, либо решка. Если, однако, поставить на герб, то будет только один благоприятный исход. Интуитивно представляется довольно очевидным определить вероятность положительного исхода как

отношение числа положительных исходов (1) к числу всех возможных исходов (2), так что мы получаем $P = 1/2$. При бросании кости имеется шесть возможных исходов, так что выборочное пространство $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. Вероятность выпадения определенных чисел $k = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ равна $P(k) = 1/6$. Этот результат можно получить другим путем. Если, по соображениям симметрии, мы припишем одну и ту же вероятность каждому из шести исходов и потребуем, чтобы сумма вероятностей этих исходов равнялась единице, то снова получим

$$P(k) = 1/6, \quad k = 1, 2, 3, 4, 5, 6. \quad (2.7)$$

Подобные рассуждения, основанные на симметрии, играют важную роль и в других примерах, но во многих случаях они требуют дополнительного анализа. Прежде всего в нашем примере предполагалось, что кость имеет идеальную форму. Кроме того, исход бросания зависит от способа, которым оно производится. Таким образом, мы должны допустить, что «рука бросающего» не играет роли, а это, если немного поразмыслить, гораздо менее очевидно. В дальнейшем мы будем предполагать, что условия симметрии приблизительно выполняются. Эти утверждения можно переформулировать в духе теории вероятностей. Шесть возможных исходов рассматриваются как равновероятные, и наше допущение относительно «равного правдоподобия» основано на симметрии.

В последующем $P(k)$ будет называться вероятностью, но в случае, когда k изменяется, функция $P(k)$ будет называться вероятностной мерой. Вероятностные меры могут быть определены не только для отдельных выборочных точек ω , но также для подмножеств A, B и т. д. Например, в случае с игральной костью подмножество может состоять из всех четных чисел 2, 4, 6. Вероятность выпадения четного числа при бросании кости, очевидно, равна $P(\{2, 4, 6\}) = 3/6 = 1/2$, или, короче, $P(A) = 1/2$, где $A = \{2, 4, 6\}$.

Теперь мы можем определить вероятностную меру для выборочного пространства Ω . Она является функцией Ω , удовлетворяющей трем аксиомам:

1) Для каждого множества $A \subset \Omega$ значение функции есть неотрицательное число $P(A) \geq 0$.

2) Для любых двух непересекающихся множеств A и B значение функции для их объединения $A \cup B$ равно сумме ее значений для A и B :

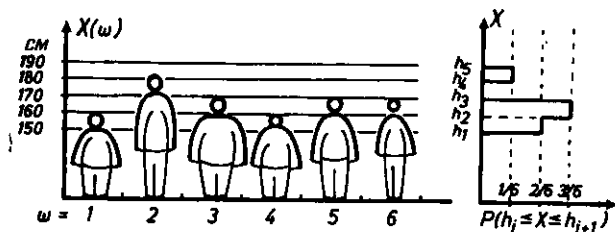
$$P(A \cup B) = P(A) + P(B) \quad \text{при условии, что} \quad A \cap B = \emptyset. \quad (2.8)$$

3) Значение функции для Ω (рассматриваемого в качестве подмножества) равно 1:

$$P(\Omega) = 1. \quad (2.9)$$

2.4. Распределение

В разд. 2.2 мы ввели понятие случайной переменной, которая связывает определенную величину X (например, рост человека) с выборочной точкой ω (например, с самим человеком). Рассмотрим теперь задачу, которая в некотором смысле, является обратной. Зададим определенную область случайных переменных, например высоту роста в пределах от 160 до 170 см, и зададимся вопросом, какова вероятность найти среди населения человека, рост которого лежит в этих пределах (фиг. 2.6).



Фиг. 2.6. Вероятность P обнаружения индивидуума с ростом, заключенным в пределах от h_j до h_{j+1} (например, $h_1 = 150$ см, $h_2 = 160$ см).

Математически эта проблема формулируется следующим образом: пусть X — случайная переменная, a и b — константы. Рассмотрим подмножество выборочных точек ω , для которых $a \leq X(\omega) \leq b$ или

$$\{a \leq X \leq b\} = \{\omega \mid a \leq X(\omega) \leq b\}. \quad (2.10)$$

Допустим снова, что полный набор Ω является счетным множеством. Как мы уже видели в разд. 2.3, в этом случае каждому подмножеству из Ω можно приписать вероятность. Таким образом, подмножество, определенное формулой (2.10), можно сопоставить с вероятностью, которую мы будем обозначать как

$$P(a \leq X \leq b). \quad (2.11)$$

Для иллюстрации этого определения рассмотрим пример с игральной костью. Требуется найти вероятность того, что при однократном бросании кости число выпавших точек лежит между 2 и 5. Подмножество событий, которые нужно сосчитать в соответствии с (2.10), дается числами 2, 3, 4, 5 [отметим, что в этом примере $X(\omega) = \omega$]. Поскольку выпадение каждого числа имеет вероятность $1/6$, вероятность подмножества 2, 3, 4, 5 равна $P = 4/6 = 2/3$. Этот пример допускает немедленное обобщение. Точно так же мы можем задаться вопросом, какова вероятность такого выпадения нечетного числа точек, чтобы

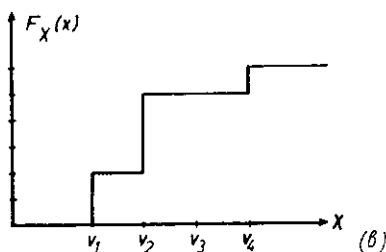
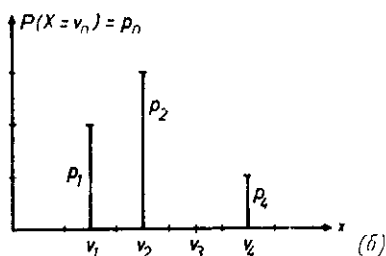
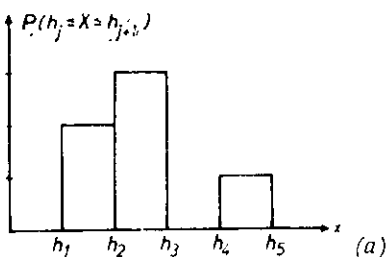
$X = 1, 3, 5$. В этом случае X соответствует не интервалу, а хорошо определенному подмножеству A , так что в совершенно общем случае можно ввести определение

$$P(X \in A) = P(\{\omega \mid X(\omega) \in A\}), \quad (2.12)$$

где A — множество действительных чисел. В качестве частного случая формул (2.11) или (2.12) можно рассмотреть пример, когда случайная переменная X задана: $X = x$. В этом случае (2.12) сводится к виду

$$P(X = x) = P(X \in \{x\}). \quad (2.13)$$

Сформулируем теперь общее правило вычисления $P(a \leq X \leq b)$. Оно подсказывается вычислением вероятности выпадения числа очков, лежащего между 2 и 5 (в случае бросания кости). Используем то обстоятельство, что $X(\omega)$ счетно, если Ω — счетное множество. Обозначим определенные значения $X(\omega)$ через $v_1, v_2, \dots, v_n, \dots$, а набор $\{v_1, v_2, \dots\}$ через V_x . Далее, если $x \notin V_x$, то $P(X = x) = 0$. Кроме того, можно допустить, что некоторые значения v_n имеют вероятности, равные нулю. Для краткости обозначим $p_n = P(X = v_n)$ (фиг. 2.7, а и б). Используя аксиомы, приведенные на стр. 42, получаем,



Фиг. 2.7. а — то же, что и на правой части фиг. 2.6, но теперь абсцисса и ордината меняются местами; б — вероятностная мера p_n . Дискретные значения роста получаются взятием среднего значения $v_n = \frac{1}{2}(h_n + h_{n+1})$ от различных значений в интервале $h_n \dots h_{n+1}$; в — функция распределения $F_X(x)$, соответствующая б.

что вероятность $P(a \leq X \leq b)$ дается выражением

$$P(a \leq X \leq b) = \sum_{a \leq v_n \leq b} p_n, \quad (2.14)$$

а в общем случае вероятность $P(X \in A)$ определяется формулой

$$P(X \in A) = \sum_{v_n \in A} p_n. \quad (2.15)$$

Если множество A состоит из всех действительных чисел X из интервала $(-\infty, x)$, то можно ввести так называемую *функцию распределения* X следующим образом (фиг. 2.7, в):

$$F_X(x) = P(X \leq x) = \sum_{v_n \leq x} p_n. \quad (2.16)$$

Величины p_n иногда называют элементарными вероятностями. В соответствии с упомянутыми выше аксиомами они обладают следующими свойствами:

$$p_n \geq 0 \quad \text{для всех } n \quad (2.17)$$

и

$$\sum_n p_n = 1. \quad (2.18)$$

Следует предупредить читателя, что термин «распределение» используется в двух различных значениях:

I

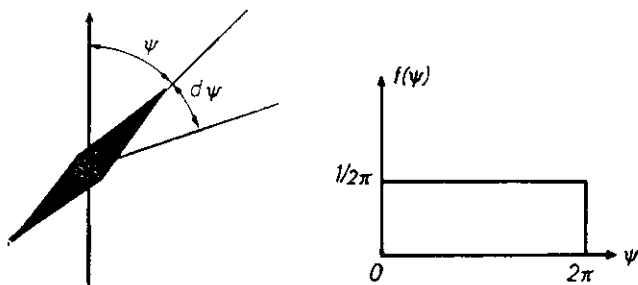
II

«Функция распределения», определенная формулой (2.16)

«Распределение вероятностей» (2.13) или «плотность вероятности»

2.5. Случайные величины и плотность вероятности

Во многих практических случаях случайные величины не дискретны, а непрерывны.



Фиг. 2.8. Угол ψ и его плотность вероятности $f(\psi)$.

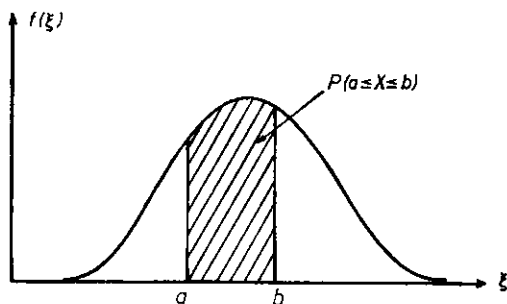
Рассмотрим, например, стрелку, вращающуюся вокруг оси, перпендикулярной стрелке. Когда стрелка останавливается (благодаря трению), ее конечное положение можно рассматривать как случайную величину (фиг. 2.8). Требуется, следовательно, распространить определения, данные в предыдущем разделе, на этот более общий случай. В частности, мы хотим

соответствующим образом обобщить формулу (2.14). Можно ожидать, что это обобщение состоит в замене суммы в (2.14) интегралом. Чтобы сформулировать это математически точно, сопоставим переменную ξ с функцией $f(\xi)$: $\xi \rightarrow f(\xi)$, где $f(\xi)$ определена на действительной оси в интервале от $-\infty$ до $+\infty$. Потребуем, чтобы $f(\xi)$ обладала следующими свойствами:

$$1) \forall \xi: f(\xi) \geq 0, \quad (2.19)^1$$

$$2) \int_{-\infty}^{+\infty} f(\xi) d\xi = 1 \quad (2.20)$$

(интеграл берется в смысле Римана). Функция f называется плотностью вероятности. Предполагается, что она кусочно-не-



Фиг. 2.9. $P(a \leq X \leq b)$ равна заштрихованной площади.

прерывна, так что $\int_a^b f(\xi) d\xi$ всегда существует. Рассмотрим снова случайную переменную X , определенную на Ω с $\omega \rightarrow X(\omega)$. Вероятность теперь задается формулой (фиг. 2.9):

$$P(a \leq X \leq b) = \int_a^b f(\xi) d\xi. \quad (2.21)^2$$

Смысл этого определения сразу же станет понятным, если мы снова обратимся к примеру со стрелкой. Случайная переменная ψ может принимать непрерывный ряд значений из интервала от 0 до 2π . Если исключить, например, гравитационные эффекты, так чтобы можно было считать все направления рав-

¹⁾ Символ $\forall \xi$ означает: «для всех ξ ».

²⁾ Более точно, $f(\xi)$ должна иметь индекс X , означающий, что $f_X(\xi)$ соответствует случайной переменной X [см. (2.16)].

новероятными (допущение равного правдоподобия!), то вероятность нахождения стрелки с определенным направлением в интервале от ψ_0 до $\psi_0 + d\psi$ равна $(1/2\pi)d\psi$. Тогда вероятность нахождения ψ в интервале от ψ_1 до ψ_2 определяется формулой

$$P(\psi_1 \leq \psi \leq \psi_2) = \int_{\psi_1}^{\psi_2} \frac{1}{2\pi} d\psi = \frac{1}{2\pi} (\psi_2 - \psi_1).$$

Отметим, что множитель $1/2\pi$ возникает из условия нормировки (2.20), а также из того, что в нашем случае $f(\xi) = 1/2\pi$ является константой. Формулу (2.21) можно обобщить на случай, когда A состоит из объединения интервалов. Тогда мы соответственно определяем

$$P(X \in A) = \int_A f(\xi) d\xi. \quad (2.22)$$

Иногда случайную величину с заданной плотностью вероятностей называют непрерывной случайной переменной. Обобщая определение (2.16) на случай непрерывных случайных переменных, приходим к следующему определению: если $A = (-\infty, x)$, то функция распределения $F_X(x)$ задается формулой

$$F_X(x) \equiv P(X \leq x) = \int_{-\infty}^x f(\xi) d\xi. \quad (2.23)$$

В частности, если f непрерывна, то

$$F'_X(x) = f_X(x). \quad (2.24)$$

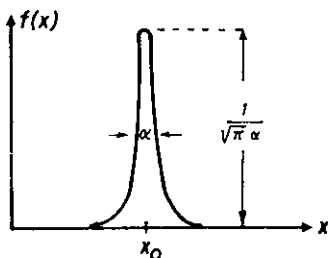
Упражнения к разд. 2.5

1. δ -функция Дирака (см., например, фиг. 2.10) определяется соотношениями

$$\delta(x - x_0) = 0 \quad \text{для } x \neq x_0$$

и

$$\int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} \delta(x - x_0) dx = 1 \quad \text{для любого } \varepsilon > 0,$$



Фиг. 2.10. δ -функцию можно рассматривать как гауссову функцию $\alpha^{-1/2} \pi^{-1/2} \exp[-(x - x_0)^2/\alpha^2]$ в пределе $\alpha \rightarrow 0$.

Покажите, что функция распределения

$$f(x) = \sum_{j=1}^n p_j \delta(x - x_j)$$

позволяет записать (2.16) в виде (2.23).

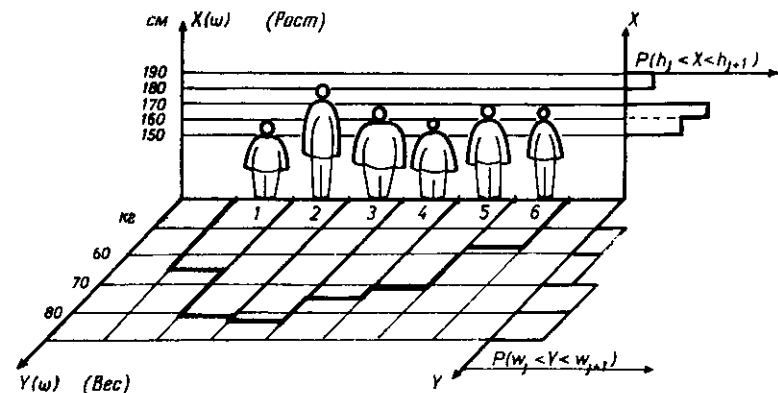
2. а) Постройте графики функции $f(x) = \alpha \exp(-\alpha x)$ и соответствующей ей функции $F_x(x)$, $x \geq 0$ в зависимости от x .

б) Постройте график $f(x) = \beta(\exp(-\alpha x) + \gamma \delta(x - x_1))$ и соответствующей ей функции $F_x(x)$, $x \geq 0$ в зависимости от x . Определить β из условия нормировки (2.20).

Указание. δ -функция «бесконечно велика». Изобразите ее стрелкой.

2.6. Совместная вероятность

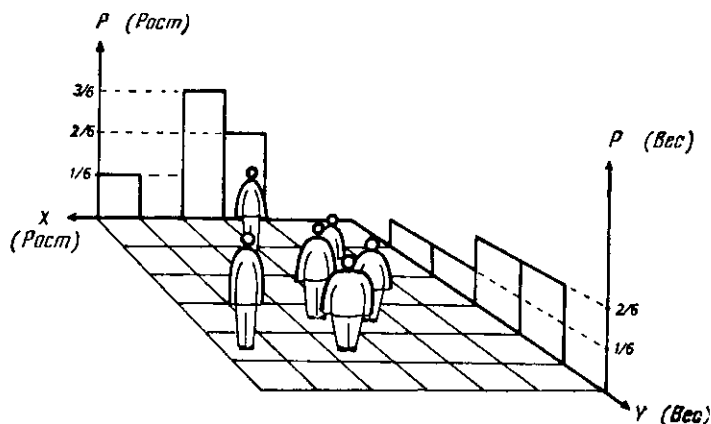
До сих пор мы рассматривали лишь одну случайную переменную, например человеческий рост. Можно, однако, рассматривать одновременно и другие случайные переменные, например вес людей, цвет их кожи и т. д. (фиг. 2.11). Это приводит



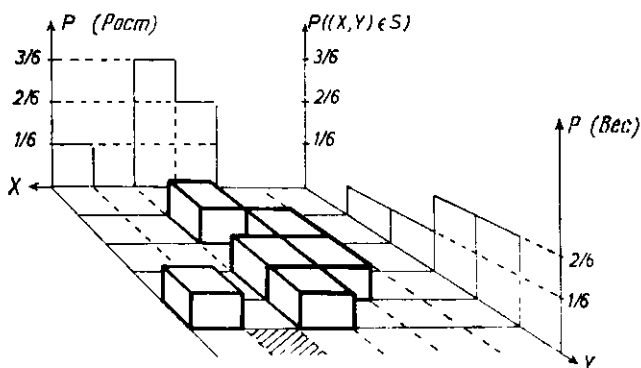
Фиг. 2.11. Случайные переменные X (рост) и Y (вес). Справа указаны вероятностные меры для роста (вне зависимости от веса) и для веса (вне зависимости от роста).

нас к понятию «совместной вероятности» — вероятности нахождения человека с данным весом, данным ростом и т. д. Чтобы выразить это понятие в математических терминах, рассмотрим пример двух случайных переменных. Введем множество S , состоящее из всех пар значений (u, v) , которые принимают случайные переменные (X, Y) . Для любого подмножества $S' \in S$ определим совместную вероятность, обобщая (2.12) следующим образом (фиг. 2.12 и 2.13):

$$P((X, Y) \in S') = P(\{\omega \mid (X(\omega), Y(\omega)) \in S'\}). \quad (2.25)$$



Фиг. 2.12. Индивидуумы сгруппированы в соответствии с их весом и ростом



Фиг. 2.13. Совместная вероятность $P(X, Y) \in S$ как функция X и Y . Подмножества S представлены квадратами (см., например, заштрихованный квадрат).

Обозначив определенные значения $X(\omega) = u_m$ индексом m , а значения $Y(\omega) = v_n$ индексом n , положим

$$P(X = u_m, Y = v_n) = P_{mn}. \quad (2.26)$$

Используя аксиомы разд. 2.3, можно легко доказать, что вероятность $P(X = u_m)$, т. е. вероятность того, что $X(\omega) = u_m$ вне зависимости от тех значений, которые принимает Y , дается формулой

$$P(X = u_m) = \sum_n P(X = u_m, Y = v_n). \quad (2.27)$$

Совместная вероятность иногда называется многомерной вероятностью.

Упражнения к разд. 2.6

1. Обобщите определения и соотношения разд. 2.4 и 2.5 на случай двух переменных.

2. Обобщите соотношения, полученные для двух случайных переменных, на случай нескольких случайных переменных $X_1(\omega), X_2(\omega), \dots, X_N(\omega)$.

2.7. Математическое ожидание $E(X)$ и моменты

Математическое ожидание $E(X)$ называется также ожидаемым значением, средним значением или первым моментом. Для введения этой величины рассмотрим случайную переменную X , которую определим на дискретном выборочном пространстве Ω . Возьмем в качестве примера игральную кость. Можно задать вопрос, чему равно среднее значение числа выпавших очков, которое получается после многократного бросания кости. В этом случае среднее значение определяется как сумма по числам $1, 2, \dots, 6$, деленная на общее число возможных бросаний. Вспоминая, что отношение $1/(\text{Число возможных бросаний})$ равно вероятности выпадения данного числа очков, мы приходим к следующему выражению для среднего значения:

$$E(X) = \sum_{\omega \in \Omega} X(\omega) P(\{\omega\}), \quad (2.28)$$

где $X(\omega)$ — случайная переменная, P — вероятность выборочной точки и суммирование производится по всем точкам выборочного пространства Ω . Если перенумеровать выборочные точки целыми числами, то, используя определение, данное в разд. 2.4, можно записать следующее:

$$E(X) = \sum_n p_n v_n. \quad (2.29)$$

Поскольку любая функция случайной переменной также является случайной переменной, мы можем легко обобщить (2.28) на определение среднего от функции $\varphi(X)$ и по аналогии с (2.28) найти

$$E(\varphi(X)) = \sum_{\omega \in \Omega} \varphi(X(\omega)) P(\{\omega\}), \quad (2.30)$$

а по аналогии с (2.29) —

$$E(\varphi(X)) = \sum_n p_n \varphi(v_n). \quad (2.31)$$

Определение среднего (или математического ожидания) можно сразу же обобщить на случай непрерывной переменной, поэтому

мы приведем лишь результат:

$$E(\varphi(X)) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\xi) f(\xi) d\xi. \quad (2.32)$$

Если в (2.30), (2.31) или (2.32) положить $\varphi(X) = X^r$, то математическое ожидание $E(X^r)$ будет называться r -м моментом X . Далее мы определяем дисперсию соотношением

$$E\{(X - E(X))^2\} = \sigma^2. \quad (2.33)$$

Квадратный корень из этой величины называется среднеквадратичным отклонением.

2.8. Условные вероятности

До сих пор мы рассматривали вероятности без дополнительных условий. Однако во многих практических случаях имеет место ситуация, которую, пользуясь простейшим примером игры в кости, можно описать следующим образом: *при условии*, что число выпавших очков нечетно, требуется найти вероятность того, что это число равно трем. Чтобы вычислить эту вероятность, напомним читателю простые правила, установленные ранее. Если множество Ω конечно и все точки выборки обладают одним и тем же статистическим весом, то вероятность нахождения члена из A равна

$$P(A) = \frac{|A|}{|\Omega|}, \quad (2.34)$$

где $|A|$, $|\Omega|$ обозначают число элементов из A или Ω . Это правило можно обобщить, если Ω — счетное множество и каждая точка ω имеет вес $P(\omega)$. Тогда,

$$P(A) = \frac{\sum_{\omega \in A} P(\omega)}{\sum_{\omega \in \Omega} P(\omega)}. \quad (2.35)$$

В (2.34) и (2.35) мы предполагали, что выборочное пространство является полным. В качестве примера (2.34) и (2.35) мы можем рассмотреть снова случай игры в кости, описанный в начале раздела.

Найдем теперь следующую вероятность: ограничим число точек выборки определенным подмножеством $S(\omega)$ и найдем статистический вес части A , заключенной в S , по отношению к S . Например, в случае игральной кости мы включаем в число

выборочных точек только нечетные числа. По аналогии с формулой (2.35) находим вероятность

$$P(A|S) = \frac{\sum_{\omega \in A \cap S} P(\omega)}{\sum_{\omega \in S} P(\omega)}. \quad (2.36)$$

Умножая знаменатель и числитель (2.36) на $1 / \sum_{\omega \in \Omega} P(\omega)$, перепишем (2.36) в виде

$$P(A|S) = \frac{P(A \cap S)}{P(S)}. \quad (2.37)$$

Эта величина называется *условной вероятностью* A относительно S . В литературе используются также другие термины: говорят о вероятности A , «зная S », «при заданном S », «в предположении заданного S ».

Упражнения к разд. 2.8

1. Бросают игральную кость. Определите вероятность выпадения 2 (3) очков в предположении, что выпало нечетное число очков.

2. Заданы стохастические переменные X и Y с вероятностной мерой

$$P(m, n) \equiv P(X = m, Y = n).$$

Покажите, что

$$P(m|n) = \frac{P(m, n)}{\sum_m P(m, n)}.$$

2.9. Независимые и зависимые случайные величины

Рассмотрим для простоты счетные, принимающие численные значения случайные переменные, хотя рассмотрение легко обобщить на несчетные численные случайные переменные. Как мы уже говорили, можно одновременно определить несколько случайных переменных, например вес и рост людей. В этом случае мы ожидаем наличия определенной связи между весом и ростом, так что случайные переменные не зависят друг от друга. С другой стороны, когда одновременно бросают две кости и число очков, выпавших на первой кости рассматривают как случайную переменную X_1 , а число очков на второй как случайную переменную X_2 , мы ожидаем, что эти случайные величины будут независимы друг от друга. Как легко прове-

речь на этом примере, совместная вероятность может быть записана как произведение вероятностей для каждой отдельной кости. Мы, таким образом, приходим к следующему общему правилу. Случайные переменные X_1, X_2, \dots, X_n независимы тогда и только тогда, когда для любых действительных чисел x_1, \dots, x_n имеет место равенство

$$P(X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n) = P(X_1 = x_1) P(X_2 = x_2) \dots P(X_n = x_n). \quad (2.38)$$

Более общее определение, следующее из (2.38), утверждает, что величины изменяются независимо в том и только в том случае, если для произвольных счетных множеств S_1, \dots, S_n имеет место соотношение

$$P(X_1 \in S_1, \dots, X_n \in S_n) = P(X_1 \in S_1) \dots P(X_n \in S_n). \quad (2.39)$$

Отметим следствие, вытекающее из (2.38), которое имеет много практических применений. Пусть $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ — произвольные функции, принимающие действительные значения, определенные на всей действительной оси, а X_1, \dots, X_n — независимые случайные переменные. Тогда случайные переменные $\varphi_1(X_1), \dots, \varphi_n(X_n)$ также независимы. Если случайные переменные не независимы друг от друга, желательно иметь меру степени их независимости, или, говоря более определенно, меру их корреляции. Поскольку ожидаемые значения произведения независимых случайных величин факторизуются [это следует из (2.38)], мерой корреляции будет отклонение $E(XY)$ от $E(X)E(Y)$. Чтобы избежать больших значений случайных переменных X, Y с малой корреляцией, имитирующих большие корреляции,

$$E(XY) - E(X)E(Y) \quad (2.40)$$

нормализуют делением на среднеквадратичные отклонения $\sigma(X)$ и $\sigma(Y)$. Таким образом, мы приходим к определению корреляции

$$\rho(X, Y) = \frac{E(XY) - E(X)E(Y)}{\sigma(X)\sigma(Y)}. \quad (2.41)$$

Используя определение дисперсии (2.33), можно показать, что для независимых случайных переменных X и Y (с конечными дисперсиями) имеет место соотношение

$$\sigma^2(X + Y) = \sigma^2(X) + \sigma^2(Y). \quad (2.42)$$

Упражнение к разд. 2.9

Случайные переменные X, Y могут принимать значения 0 и 1. Проверьте, являются ли эти переменные статистически

независимыми, если их совместные вероятности равны

а)	б)	в)
$P(X=0, Y=0) = \frac{1}{4}$	$= \frac{1}{2}$	$= 1,$
$P(X=1, Y=0) = \frac{1}{4}$	$= 0$	$= 0,$
$P(X=0, Y=1) = \frac{1}{4}$	$= 0$	$= 0,$
$P(X=1, Y=1) = \frac{1}{4}$	$= \frac{1}{2}$	$= 0.$

Для наглядности используйте пример с бросанием монеты.

2.10*. Производящие функции и характеристические функции

Начнем со специального случая. Рассмотрим случайную переменную X , принимающую лишь неотрицательные целые значения. Примерами X могут быть число молекул газа в ячейке заданного объема, являющейся частью большего объема, или число вирусов в объеме крови, являющемся частью гораздо большего объема. Пусть распределение вероятностей X задается выражением

$$P(X=j) = a_j, \quad j=0, 1, 2, \dots \quad (2.43)$$

Представим теперь распределение (2.43) в виде одной функции. Для этого введем вспомогательную переменную z и определим производящую функцию

$$g(z) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j z^j. \quad (2.44)$$

Коэффициенты a_j получаем сразу же из разложения функции $g(z)$ в ряд Тейлора. Они равны производной j -го порядка от $g(z)$, деленной на $j!$:

$$a_j = \frac{1}{j!} \left. \frac{d^j g}{dz^j} \right|_{z=0}. \quad (2.45)$$

Большое преимущество (2.44) и (2.45) заключается в том, что в ряде важных практических случаев $g(z)$ — явно определенная функция, а также в том, что с помощью $g(z)$ можно легко вычислить ожидаемые значения и моменты. Мы оставляем читателю самому вывести с помощью (2.44) выражение для первого момента случайной переменной X . Формула (2.45) позво-

ляет посредством (2.44) найти распределение вероятностей (2.43). В свою очередь оказывается, что также можно выразить (2.44) через функцию случайной переменной X , а именно:

$$g(z) = E(z^X). \quad (2.46)$$

Это можно показать следующим образом: $\omega \rightarrow z^{X(\omega)}$ для каждого z является случайной величиной, и, таким образом, в соответствии с формулами (2.30), (2.43) мы получаем

$$E(z^X) = \sum_{j=0}^{\infty} P(X=j) z^j = g(z). \quad (2.47)$$

Отметим важное следствие выражения (2.44). Если случайные переменные X_1, \dots, X_n независимы и g_1, \dots, g_n — соответствующие им производящие функции, то производящая функция суммы $X_1 + X_2 + \dots + X_n$ задается произведением $g_1 g_2 \dots g_n$. Определение производящей функции в виде (2.46) допускает обобщение на случай случайных переменных более общего вида. Так, можно определить производящую функцию для неотрицательных величин, заменяя z на $e^{-\lambda}$:

$$\text{Преобразование Лапласа } (z \rightarrow e^{-\lambda}); E(z^X) \rightarrow E(e^{-\lambda X}); \quad (2.48)$$

для произвольных случайных переменных z заменяется на $e^{-i\theta}$:

$$\text{Преобразование Фурье } (z \rightarrow e^{i\theta}), E(z^X) \rightarrow E(e^{i\theta X}). \quad (2.49)$$

Определения (2.48) и (2.49) могут быть использованы не только для дискретных значений X , но также для непрерывно распределенных значений X . Детальную формулировку мы оставляем читателю в качестве упражнения.

Упражнение к разд. 2.10

Убедитесь, что производные характеристической функции

$$\Phi_X(\theta) = E\{e^{i\theta X}\}$$

дают моменты

$$\left. \frac{d^n \Phi_X(\theta)}{d\theta^n} \right|_{\theta=0} = i^n E(X^n).$$

2.11. Специальный случай распределения вероятностей: биномиальное распределение

Во многих практических случаях имеет место ситуация, когда эксперимент повторяется много раз, каждый раз с двумя возможными исходами. Простейшим примером является n -кратное бросание монеты. В общем случае два возможных исхода можно рассматривать как успех или неудачу. Вероятность

успеха в единичном эксперименте обозначим через p , а вероятность неудачи — через q , при этом $p + q = 1$. Получим теперь выражение для вероятности того, что при n попытках получится k успешных исходов. Мы найдем, таким образом, распределение вероятностей случайной величины X (числа успехов), причем X может принимать значения $0, 1, \dots, n$. В случае с монетой обозначим успех через 1, а неудачу через 0. Если подбросить монету n раз, то получится определенная последовательность чисел, например $0, 1, 0, 0, 1, 1, \dots, 1, 0$. Так как последовательные события независимы друг от друга, то вероятность появления этой определенной последовательности равна просто произведению соответствующих вероятностей p или q . В только что рассмотренном случае $P = qrqqrpp \dots pq = p^k q^{n-k}$. В этой полной серии испытаний было k успешных выпадений, но только в *определенном порядке*.

Во многих практических случаях интересуются не определенной последовательностью, а всеми возможными последовательностями, которые содержат одно и то же число успехов. Таким образом, мы приходим к вопросу о том, сколько существует различных последовательностей нулей и единиц, содержащих одно и то же количество k чисел «1». Чтобы подсчитать k , рассмотрим n ящиков, в каждый из которых можно поместить одно число — 1 или 0. (Обычно в такой модели по ящикам распределяются черные и белые шары. Здесь мы вместо шаров используем 0 и 1.) Поскольку рассуждения подобного типа будут повторяться часто, мы приведем их очень подробно. Возьмем число 0 или 1. Это число мы можем поместить в один из n ящиков n различными способами. Для следующего числа мы имеем $n - 1$ возможностей (поскольку один ящик уже занят), для третьего $n - 2$ возможностей и т. д. Общее число возможных способов заполнения ящиков дается произведением числа способов размещения каждого индивидуального числа и равно

$$n(n-1)(n-2) \dots 2 \cdot 1 = n!$$

Заполнение ящиков числами не во всех случаях приводит к различным конфигурациям, поскольку конфигурация сохраняется, если две или несколько единиц поменять местами. Так как единицы (1) могут быть распределены по ящикам $k!$ различными способами, а нули (0) аналогично $(n-k)!$ способами, нужно разделить общее число $n!$ на $k!(n-k)!$. Выражение $n!/k!(n-k)!$ обозначается как $\binom{n}{k}$ и называется биномиальным коэффициентом. Полное распределение вероятностей получается следующим образом: имеется $\binom{n}{k}$ различных последо-

вательностей, каждая из которых имеет вероятность $p^k q^{n-k}$. Поскольку для различных поднаборов событий вероятности складываются, вероятность нахождения k успехов вне зависимости от их последовательности дается формулой

$$B_k(n, p) = \binom{n}{k} p^k q^{n-k} \quad (2.50)$$

(биномиальное распределение). Соответствующие примеры приведены на фиг. 2.14. Среднее значение для биномиального распределения равно

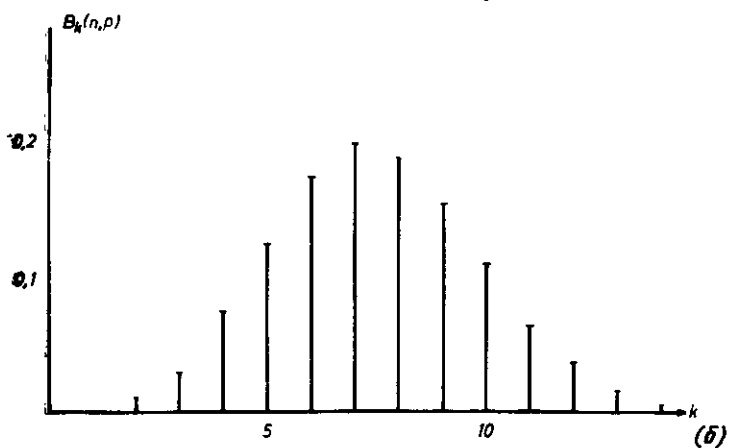
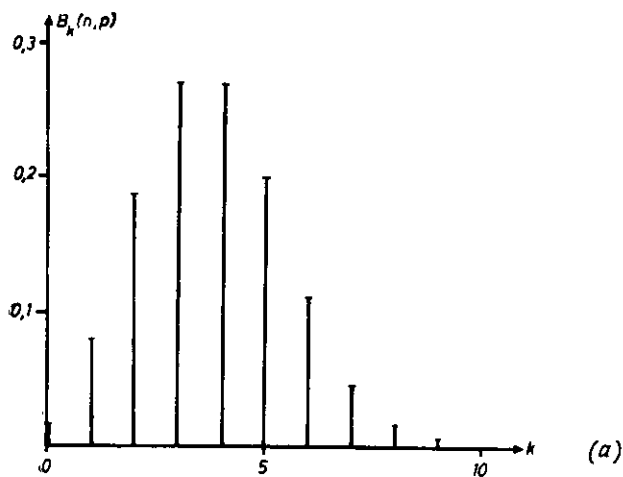
$$E(X) = np, \quad (2.51)$$

а дисперсия —

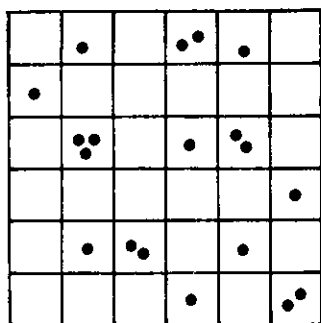
$$\sigma^2 = n \cdot p \cdot q. \quad (2.52)$$

Доказательство этих соотношений мы оставляем читателю в качестве упражнения. Для больших n вычисление B слишком громоздко. Между тем на практике число испытаний n может быть очень большим. Поэтому применение (2.50) обычно ограничивают определенными предельными случаями, которые мы обсудим в последующих разделах.

Большое достоинство концепции вероятности заключается в ее гибкости, благодаря чему ее можно использовать в различных отраслях знания. В качестве примера биномиального распределения рассмотрим распределение вирусов в объеме крови, наблюдаемое под микроскопом (фиг. 2.15). Поместим поверх объема квадратную сетку и найдем распределение вероятностей обнаружения в каждом квадрате (ячейке) заданного числа частиц. Если предположить, что имеется N квадратов и $n = \mu N$ частиц, то μ — это среднее число частиц в ячейке. Задачу можно свести к уже рассмотренной проблеме с бросанием монеты. Выберем определенную ячейку и пусть пока будет только один вирус. Тогда имеем положительное событие (успех), если вирус находится в ячейке, и отрицательное событие (неудачу), если он находится вне ячейки. Очевидно, что вероятность положительного события равна $p = 1/N$. Теперь нам нужно распределить $\mu N = n$ частиц по двум «ячейкам»: по выбранной ячейке и остальному объему. Мы производим n испытаний. Если в мысленном эксперименте мы помещаем один вирус за другим в полный объем, это в точности соответствует эксперименту с бросанием монеты. Вероятность каждой определенной последовательности с k успехами, т. е. с k вирусами в рассматриваемой ячейке, равна, как и прежде, $p^k q^{n-k}$. Поскольку снова имеются $\binom{n}{k}$ различных последовательностей, полная вероятность снова дается формулой (2.50)



Фиг. 2.14. Биномиальное распределение $B_k(n, p)$ как функция k при $p = 1/4$ и $n = 15$ (а), $n = 30$ (б).



Фиг. 2.15. Распределение частиц по клеткам квадратной сетки.

или, с учетом того, что $n = \mu N$, формулой

$$B_k(n, p) = \binom{n}{k} p^k q^{n-k} = \binom{\mu N}{k} \left(\frac{1}{N}\right)^k \left(1 - \frac{1}{N}\right)^{\mu N - k}. \quad (2.53)$$

В практических случаях N и, следовательно, n — очень большие числа, тогда как μ фиксировано и p стремится к нулю. При условии что $n \rightarrow \infty$, μ фиксировано, $p \rightarrow 0$, биномиальное распределение (2.50) можно заменить так называемым распределением Пуассона.

2.12. Распределение Пуассона

Возьмем формулу (2.53) и, используя элементарные преобразования, запишем ее в виде

$$\begin{aligned} B_k(n, p) &= \\ &= \frac{n(n-1)(n-2)\dots(n-k+1)}{k!} \left(\frac{\mu}{n}\right)^k \left(1 - \frac{\mu}{n}\right)^n \left(1 - \frac{\mu}{n}\right)^{-k} = \\ &= \underbrace{\frac{\mu^k}{k!}}_1 \underbrace{\left(1 - \frac{\mu}{n}\right)^n}_2 \underbrace{\left[\left(1 - \frac{1}{n}\right)\left(1 - \frac{2}{n}\right)\dots\left(1 - \frac{k-1}{n}\right)\left(1 - \frac{\mu}{n}\right)^k\right]}_3. \end{aligned} \quad (2.54)$$

При фиксированных μ , k , но при $n \rightarrow \infty$ для сомножителей 1, 2, 3 в (2.54) получим следующие выражения. Первый сомножитель остается без изменения, в то время как второй дает экспоненциальную функцию

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{\mu}{n}\right)^n = e^{-\mu}. \quad (2.55)$$

Третий сомножитель непосредственно сводится к виду

$$\lim_{n \rightarrow \infty} [\dots] = 1. \quad (2.56)$$

Таким образом, мы получили распределение Пуассона

$$p_{k, \mu} = \lim_{n \rightarrow \infty} B_k(n, p) = \frac{\mu^k}{k!} e^{-\mu}. \quad (2.57)$$

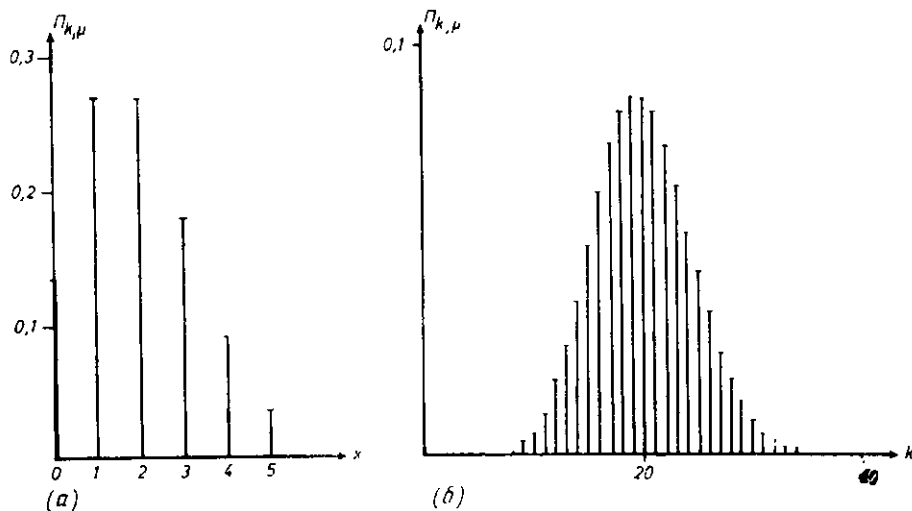
Примеры приведены на фиг. 2.16. Используя обозначения разд. 2.10, выражение (2.57) можно также записать в виде

$$a_k = \frac{\mu^k}{k!} e^{-\mu}. \quad (2.58)$$

Тогда для производящей функции получается выражение

$$g(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k = e^{(z-1)\mu}. \quad (2.59)$$

Вычисление математического ожидания и дисперсии (которое



Фиг. 2.16. Пуассоновское распределение $\pi_{k,\mu}$ как функция k при $\mu = 2$ (а) и $\mu = 20$ (б).

мы оставляем читателю в качестве упражнения) соответственно дает

$$E(X) = g'(1) = \mu, \quad (2.60)$$

$$\sigma^2(X) = \mu. \quad (2.61)$$

Упражнение к разд. 2.12

Докажите, что $E(X(X-1) \dots (X-l+1)) = \mu^l$.

Указание. Продифференцируйте $g(z)$ [см. (2.59)] l раз.

2.13. Нормальное (гауссово) распределение

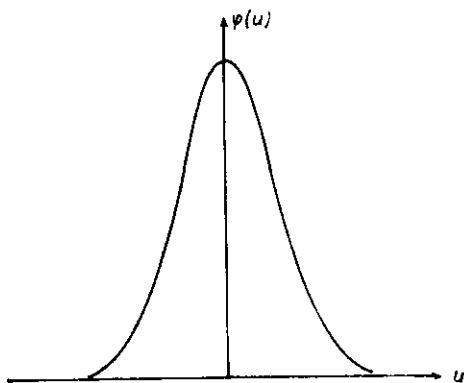
Нормальное распределение можно получить как предельный случай биномиального распределения; здесь снова $n \rightarrow \infty$, но p и q не малы, например $p = q = 1/2$. Так как переход к пределу требует более сложных выкладок, которые заняли бы слишком много места, мы не будем вдаваться в подробности, а ограничимся изложением основных идей (см. также разд. 4.1). Вве-

дем сначала новую переменную u , потребовав, чтобы среднее значение $k = np$ соответствовало $u = 0$; затем введем новый масштаб, выполнив замену $k \rightarrow k/\sigma$, где σ — среднеквадратичное отклонение. Так как из формулы (2.52) следует, что при $n \rightarrow \infty$ дисперсия стремится к бесконечности, это масштабное преобразование означает, что мы по существу заменяем дискретные переменные k непрерывной переменной. Не удивительно поэтому, что вместо первоначальной функции распределения B мы получаем плотность вероятности φ , используя одновременно преобразование $\varphi = \sigma B$. Точнее, мы полагаем, что

$$\varphi_n(u) = \sigma B_k(n, p). \quad (2.62)$$

Тогда, устремляя $n \rightarrow \infty$, мы получаем нормальное распределение:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n(u) = \varphi(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-1/2 u^2}; \quad (2.63)$$



Фиг. 2.17. Гауссово распределение $\varphi(u)$ как функция u . Оно имеет характерную колоколообразную форму.

здесь $\varphi(u)$ — плотность вероятности (фиг. 2.17). Интеграл от нее — нормальное (гауссово) распределение

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-1/2 u^2} du. \quad (2.64)$$

Плотность вероятности для нормального распределения в случае нескольких переменных

Если на практике возникают задачи, в которых встречаются несколько случайных переменных, то часто используют совместную плотность вероятности для нормального распределения (гауссову плотность):

$$f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-n/2} |Q|^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{m})^T Q^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}) \right], \quad (2.65)$$

где \mathbf{X} — вектор, составленный из случайных переменных X_1, \dots, X_n ; \mathbf{x} — соответствующий вектор с компонентами, равными значениям, которые может принимать случайная величина \mathbf{X} ; $Q(\mu_{ij})$ — квадратная матрица порядка n . Предполагается, что существует обратная ей матрица Q^{-1} . Далее $|Q| = \det Q$ обозначает детерминант Q ; \mathbf{m} — заданный постоянный вектор; T —

транспонированный вектор. При этом имеет место следующее соотношение: среднее от случайной переменной X_j равно j -й компоненте m :

$$m_j = E\{X_j\}, \quad j = 1, \dots, n. \quad (2.66)$$

Кроме того, компоненты дисперсии μ_{ij} , определенные соотношением

$$\mu_{ij} = E\{(X_i - m_i)(X_j - m_j)\}, \quad (2.67)$$

совпадают с матричными элементами $Q = (Q_{ij})$, т. е. $\mu_{ij} = Q_{ij}$.

Упражнения к разд. 2.13

1. Убедитесь, что первые моменты гауссовой плотности

$$f(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \exp(-\alpha x^2)$$

равны $m_1 = 0$, $m_2 = 1/(2\alpha)$.

2. Покажите, что характеристическая функция гауссовой плотности равна

$$E\{\exp(i\theta x)\} = \exp(-\theta^2/(4\alpha)).$$

3. Убедитесь в правильности (2.66) и (2.67).

Указание. Введите новые переменные $y_j = x_j - m_j$ и диагонализуйте Q с помощью новых линейных комбинаций $\xi_k = \sum a_{kj} y_j$. Q — симметричная матрица.

4. Проверьте соотношение

$$E\{X_1^{l_1} X_2^{l_2} \dots X_n^{l_n}\} = \\ = i^{-(l_1+l_2+\dots+l_n)} \left\{ \frac{\partial^{l_1+l_2+\dots+l_n}}{\partial \theta_1^{l_1} \partial \theta_2^{l_2} \dots \partial \theta_n^{l_n}} \Phi_X(\theta) \right\}_{\theta=0}.$$

2.14. Формула Стирлинга

Для некоторых применений в последующих главах нам потребуется вычислять выражение для $n!$. Для больших значений n оно дается формулой Стирлинга

$$n! = \left(\frac{n}{e}\right)^n \sqrt{2\pi} e^{\omega(n)}, \quad \text{где} \quad \frac{1}{12\left(n + \frac{1}{2}\right)} < \omega(n) < \frac{1}{12n}. \quad (2.68)$$

Так как во многих практических случаях $n \gg 1$, множитель $\exp \omega(n)$ можно опустить.

2.15*. Центральная предельная теорема

Пусть X_j , $j \geq 1$ — последовательность взаимно независимых случайных величин, имеющих одно и то же распределение вероятностей. Предположим, что среднее значение m и дисперсия σ^2 каждого X_j конечны. Сумма $S_n = X_1 + \dots + X_n$, $n \geq 1$ также является случайной переменной (ср. разд. 2.2). Так как случайные переменные X_j взаимно независимы, для среднего находим

$$E(S_n) = n \cdot m, \quad (2.69)$$

а для дисперсии —

$$\sigma^2(S_n) = n\sigma^2. \quad (2.70)$$

Вычитая $n \cdot m$ из S_n и деля разность на $\sigma \sqrt{n}$, получаем новую случайную переменную

$$Y_n = \frac{S_n - n \cdot m}{\sigma \sqrt{n}} \quad (2.71)$$

с нулевым средним значением и дисперсией, равной единице.

Центральная предельная теорема устанавливает распределение вероятностей Y_n для предельного случая $n \rightarrow \infty$ в виде

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(a < Y_n \leq b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_a^b e^{-\xi^2/2} d\xi. \quad (2.72)$$

В физике, в частности, это соотношение используется в следующем виде. Пусть $a = x$ и $b = x + dx$, где dx означает малый интервал. Тогда интеграл в правой части (2.72) можно вычислить приближенно, и результат будет таков:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(x < Y_n < x + dx) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} dx, \quad (2.73)$$

или, в словесной формулировке, в пределе $n \rightarrow \infty$ вероятность того, что Y_n лежит в интервале $x, \dots, x + dx$, дается гауссовой плотностью, умноженной на интервал dx . Отметим, что здесь нельзя опустить интервал dx : в противном случае при замене координат могут возникнуть ошибки. Для других практических приложений часто используют (2.72) в грубом приближении, а именно:

$$P(x_1 \sigma \sqrt{n} < (S_n - nm) < x_2 \sigma \sqrt{n}) \approx \Phi(x_2) - \Phi(x_1), \quad (2.74)$$

где

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\xi^2/2} d\xi. \quad (2.75)$$

В синергетике центральная предельная теорема играет очень важную роль. Ее применяют во всех случаях, когда исходы различных событий суммируются. С другой стороны, если центральная предельная теорема в формуле (2.72) оказывается неприменимой, это означает, что случайные переменные X_j уже не являются взаимно независимыми и *коррелируют* друг с другом. Ниже, мы встретимся с многочисленными примерами подобного *кооперативного* поведения.

Информация

КАК БЫТЬ НЕПРЕДУБЕЖДЕННЫМ

3.1. Некоторые основные идеи

В этой главе мы хотим показать, как с помощью новой интерпретации теории вероятностей можно войти в круг вопросов совершенно другой дисциплины, а именно теории информации. Рассмотрим снова эксперимент, заключающийся в последовательном бросании монеты с исходами 0 и 1. Интерпретируем теперь 0 и 1 как тире и точку азбуки Морзе. Всем известно, что азбукой Морзе можно передавать сообщения, так что определенной последовательности символов можно приписать определенный смысл, или, другими словами, определенная последовательность символов несет информацию. В задачу теории информации входит нахождение *меры количества информации*.

Рассмотрим простой пример, когда имеются R_0 различных возможных событий («реализаций»), априори равновероятных. Так, при бросании монеты мы имеем события 1 и 0 и $R_0 = 2$. В случае игральной кости возможны шесть различных исходов, следовательно, $R_0 = 6$. Исход бросания монеты или кости интерпретируется как получение сообщения, причем в действительности реализуется только один из R_0 исходов. Очевидно, что чем больше R_0 , тем больше неопределенность перед получением сообщения и тем больше будет количество информации после получения сообщения. Таким образом, можно интерпретировать всю процедуру следующим образом: в первоначальной ситуации нет информации I_0 , т. е. $I_0 = 0$ и R_0 исходов равновероятны.

В окончательной ситуации мы имеем информацию $I_1 \neq 0$ с $R_1 = 1$, т. е. с единственным исходом. Введем теперь меру количества информации I , которая, очевидно, должна быть связана с R_0 . Чтобы выяснить, как должна проявляться связь между R_0 и I , потребуем, чтобы для независимых событий I было аддитивным. Тогда, если имеется два таких набора с R_{01} и R_{02} исходами, что общее число исходов равно

$$R_0 = R_{01}R_{02}, \quad (3.1)$$

мы требуем, чтобы

$$I(R_{01} R_{02}) = I(R_{01}) + I(R_{02}). \quad (3.2)$$

Это условие может быть выполнено, если принять

$$I = K \ln R_0, \quad (3.3)$$

где K — некая константа. Можно даже показать, что (3.3) является единственным решением (3.2). Константа K остается произвольной и может быть фиксирована с помощью некоторого определения. Обычно используется следующее определение. Рассмотрим так называемую «двоичную» систему, которая имеет только два символа (или буквы). В качестве их могут выступать герб и решка монеты или ответы «да» и «нет», или числа 0 и 1. Если образовать все возможные «слова» (или последовательности) из n символов, то будут $R = 2^n$ «реализаций». отождествим I с n в такой двоичной системе. Потребуем, таким образом, чтобы

$$I \equiv K \ln R \equiv Kn \ln 2 = n; \quad (3.4)$$

отсюда

$$K = 1/\ln 2 = \log_2 e. \quad (3.5)$$

При таком выборе K (3.4) записывается в другой форме:

$$I = \log_2 R. \quad (3.4a)$$

Одно положение в последовательности символов (знаков) в двоичной системе называется «битом», поэтому информация I теперь задается непосредственно в битах. Так, если $R = 8 = 2^3$, то $I = 3$ битам, а в общем случае для $R = 2^n$ $I = n$ битов. Определение информации, данное в (3.3), легко обобщить на случай, когда первоначально имеется R_0 , а окончательно R_1 равновероятных исходов. Тогда информация равна

$$I = K \ln R_0 - K \ln R_1, \quad (3.6)$$

что сводится к первоначальному определению (3.3), если $R_1 = 1$. Простой пример дает игральная кость. Определим игру, в которой четные числа означают выигрыш, а нечетные — проигрыш. Тогда $R_0 = 6$ и $R_1 = 3$. В этом случае количество информации то же, что и в случае монеты с двумя исходными возможностями. Получим теперь более удобное выражение для информации. Для этого рассмотрим сначала следующий пример упрощенной азбуки Морзе с точками и тире¹⁾. Рассмотрим слово, состоящее из G символов, содержащее N_1 тире и N_2 точек, причем

$$N_1 + N_2 = N. \quad (3.7)$$

¹⁾ В настоящей азбуке Морзе пропуск является третьим символом.

Найдем информацию, поступающую при приеме такого слова. В духе теории информации мы должны подсчитать полное число слов, которые можно сконструировать из этих двух символов при *фиксированных* N_1, N_2 . Этот расчет вполне аналогичен проведенному в разд. 2.11 на стр. 56. В соответствии с числом способов, которыми мы можем распределить тире и точки по N положениям, имеются

$$R = \frac{N!}{N_1! N_2!} \quad (3.8)$$

возможностей. Другими словами, R задает число сообщений, которые могут быть переданы с помощью N_1 тире и N_2 точек. Определим теперь информацию в расчете на один символ: $i = I/N$. Подставляя (3.8) в (3.3), получаем

$$I = K \ln R = K [\ln N! - \ln N_1! - \ln N_2!]. \quad (3.9)$$

Используя формулу Стирлинга (2.68) в приближении

$$\ln Q! \approx Q (\ln Q - 1), \quad (3.10)$$

которое дает хорошую точность при $Q > 100$, легко находим, что

$$I \approx K [N (\ln N - 1) - N_1 (\ln N_1 - 1) - N_2 (\ln N_2 - 1)]. \quad (3.11)$$

Далее, с помощью (3.7) получаем

$$i = \frac{I}{N} \approx -K \left[\frac{N_1}{N} \ln \frac{N_1}{N} + \frac{N_2}{N} \ln \frac{N_2}{N} \right]. \quad (3.12)$$

Введем теперь величину, которую можно интерпретировать как вероятность нахождения символа «тире» или «точка». Вероятность идентична частоте появления тире или точек

$$p_j = N_j/N, \quad j = 1, 2. \quad (3.13)$$

С учетом (3.13) формула (3.12) приобретает окончательный вид

$$i = \frac{I}{N} = -K (p_1 \ln p_1 + p_2 \ln p_2). \quad (3.14)$$

Это выражение легко обобщить на случай, когда имеются не просто два символа, а несколько, как буквы алфавита. Тогда совершенно аналогичным образом мы получаем выражение для информации в расчете на один символ

$$i = -K \sum_j p_j \ln p_j, \quad (3.15)$$

где p_j — относительная частота появления символов. Из этой интерпретации становится очевидным, что i можно использовать

при рассмотрении проблем передачи информации и т. д. Прежде чем двигаться дальше, скажем несколько слов относительно информации в том смысле, в каком она используется здесь. Следует отметить, что понятия «полезный» и «бесполезный», «имеющий смысл» и «бессмысленный» не имеют отношения к теории. Например, в азбуке Морзе, определенной выше, большое число слов может быть бессмысленным. Информация, используемая в принятом здесь смысле, скорее имеет отношение к частоте появления события. Хотя это обстоятельство приводит к значительным ограничениям, теория оказывается чрезвычайно полезной.

Выражение для информации можно рассматривать с двух совершенно различных точек зрения. С одной стороны, можно считать, что заданы численные значения p_i , и тогда, используя формулу (3.3), записать численное значение I . Более важна, однако, другая интерпретация, а именно рассмотрение I как функции p_i ; это означает, что если изменять значения p_i , то значение I будет соответственно изменяться. Чтобы пояснить эту интерпретацию, возьмем пример, который будет подробно разбираться позже. Рассмотрим газ, состоящий из атомов, свободно движущихся в ящике. Представляет интерес пространственное распределение атомов газа внутри ящика. Отметим, что по существу эта задача идентична рассмотренной в разд. 2.11, но мы рассмотрим ее здесь с новой точки зрения. Разделим снова сосуд на M ячеек одинакового размера и обозначим число частиц в k -й ячейке через N_k . Полное число частиц равно N . Относительная частота, с которой частица попадает в ячейку, равна

$$\frac{N_k}{N} = p_k, \quad k = 1, 2, \dots, M, \quad (3.16)$$

где p_k можно рассматривать как функцию распределения частиц по ячейкам k . Поскольку ячейки имеют равный объем и не отличаются друг от друга по физическим свойствам, следует ожидать, что частицы будут находиться с равной вероятностью в каждой ячейке, т. е.

$$p_k = 1/M. \quad (3.17)$$

Получим теперь этот же результат (3.17), исходя из свойств информации. В самом деле, информацию можно рассматривать следующим образом. До проведения измерения и получения сообщения имеется R возможностей; другими словами, $K \ln R$ является мерой нашего незнания. Можно сказать также, что R дает нам число реализаций, которые в принципе возможны.

Рассмотрим ансамбль M объемов, каждый из которых содержит N атомов газа. Допустим, что в каждом объеме ча-

стицы распределены в соответствии с различными функциями распределения p_k :

$$p_k^{(1)}, p_k^{(2)}, p_k^{(3)}, \dots$$

Соответственно получают различные числа реализаций, т. е. различные количества информации. Например, если $N_1 = N$, $N_2 = N_3 = \dots = 0$, то $p_1^{(1)} = 1$, $p_2^{(1)} = p_3^{(1)} = \dots = 0$ и, следовательно, $I^{(1)} = 0$. С другой стороны, если $N_1 = N_2 = N_3 = \dots = N/M$, получаем $p_1^{(2)} = 1/M$, $p_2^{(2)} = 1/M, \dots$, так что $I^{(2)} = -M \log_2(1/M) = M \log_2 M$ есть очень большое число, если число ящиков велико.

Таким образом, когда мы рассматриваем любой объем, заполненный атомами газа, вероятность того, что они окажутся распределенными в соответствии с второй функцией распределения, много больше, чем с первой. Это означает, что подавляюще велика вероятность обнаружения функции распределения p_k , для реализации которой имеется наибольшее количество возможностей R , и, следовательно, информация будет наибольшей. Таким образом, мы приходим к требованию, что выражение

$$-\sum p_i \ln p_i = \text{Extr!} \quad (3.18)$$

должно быть справедливым при условии, что полная сумма вероятностей p_i равна единице:

$$\sum_{i=1}^M p_i = 1. \quad (3.19)$$

Этот принцип является фундаментальным в применении к реальным системам в физике, химии и биологии; в дальнейшем мы рассмотрим его более подробно.

Задача нахождения экстремума (3.18) при условии (3.19) может быть решена методом множителей Лагранжа. Согласно этому методу, умножаем (3.19) на пока неопределенный параметр λ и прибавляем полученное выражение к левой части (3.18), потребовав затем, чтобы полная сумма была экстремальной. Теперь уже p_i можно варьировать независимо друг от друга, не принимая во внимание ограничение (3.19). Варьирование левой части выражения

$$-\sum p_i \ln p_i + \lambda \sum_i p_i = \text{Extr!} \quad (3.20)$$

означает дифференцирование его по p_i , что приводит к уравнению

$$-\ln p_i - 1 + \lambda = 0. \quad (3.21)$$

Уравнение (3.21) имеет решение

$$p_i = \exp(\lambda - 1), \quad (3.22)$$

не зависящее от индекса i , т. е. p_i равняется константе. Подставляя найденное значение p_i в (3.19), можно легко определить λ , так что

$$M \exp(\lambda - 1) = 1, \quad (3.23)$$

т. е.

$$p_i = \frac{1}{M}, \quad (3.24)$$

что, как и следовало ожидать, полностью согласуется с (3.17).

Упражнения к разд. 3.1

1. Используя (3.8) и биномиальную теорему, покажите, что $R = 2^N$, если N_1, N_2 выбираются произвольно, но при выполнении условия (3.7).

2. В заданном объеме находятся пять шаров. Эти шары могут располагаться («возбуждаться») на эквидистантных энергетических уровнях. Разность энергий двух ближайших уровней равна Δ . К системе подводится энергия $E = 5\Delta$. Какое состояние может быть реализовано наибольшим числом способов, если состояние характеризуется числом «возбужденных» шаров? Чему равно полное число реализаций? Сравните вероятности для одного состояния и соответствующее число реализаций. Обобщите формулы для полного числа состояний на случай шести шаров, которые получают энергию $E = N\Delta$.

3. Убедитесь сами, что число реализаций расположений N_1 тире и N_2 точек по N возможным положениям совпадает с числом распределений N частиц (или шаров) по двум ящикам при фиксированных N_1 и N_2 числах частиц в 1-м и 2-м ящиках.

4. На острове имеется пять различных видов птиц, относительная численность которых 80, 10, 5, 3 и 2%. Чему равна информационная энтропия этой популяции?

Указание. Используйте (3.15).

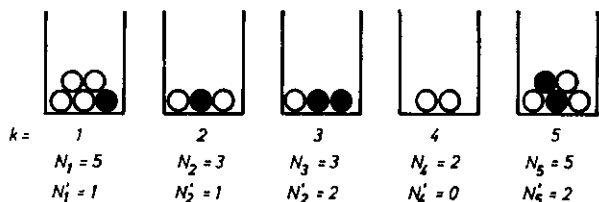
3.2*. Прирост информации: иллюстрация

Рассмотрим распределение шаров по ящикам, пронумерованным индексами 1, 2, Найдем число способов, которыми можно распределить по этим ящикам N шаров, так чтобы в конце концов в соответствующих ящиках было N_1, N_2 и т. д. шаров. Эта задача рассматривалась в разд. 2.11 для случая двух ящиков — 1, 2 [ср. (3.8)]. Аналогично в данном случае

для числа конфигураций получим

$$Z_1 = \frac{N!}{\prod_k N_k!}. \quad (3.25)$$

Взяв логарифм Z_1 по основанию два, получаем соответствующую информацию. Рассмотрим теперь ту же самую задачу, но с шарами разных цветов — белого и черного (фиг. 3.1). Черные



Фиг. 3.1. Распределение белых и черных шаров по ящикам.

шары теперь образуют поднабор из числа всех шаров. Пусть число черных шаров будет N' , их число в ящике k равно N'_k . Подсчитаем число конфигураций, учитывая различие между черными и белыми шарами. В каждом ящике разделим N_k на две части: N'_k и $N_k - N'_k$. Тогда находим

$$Z_2 = \frac{N!}{\prod N_k!} \frac{(N - N')!}{\prod (N_k - N'_k)!} \quad \left(\text{где } \prod = \prod_k \right) \quad (3.26)$$

реализаций. Рассмотрим теперь отношение чисел реализаций

$$Z = \frac{Z_1}{Z_2} \quad (3.27)$$

или, используя (3.25), (3.26),

$$Z = \frac{N!}{\prod N_k!} \cdot \frac{\prod N'_k}{N'^!} \frac{\prod (N_k - N'_k)!}{(N - N')!}. \quad (3.28)$$

По формуле Стирлинга (2.68) после некоторых вычислений получаем

$$\frac{N!}{(N - N')!} \approx N^{N'} \quad (3.29)$$

и

$$\frac{N_k!}{(N_k - N'_k)!} \approx N_k^{N'_k}, \quad (3.30)$$

и, таким образом,

$$Z \approx N^{N'} \frac{1}{N'^!} \prod N_k! \frac{1}{\prod N_k^{N'_k}}. \quad (3.31)$$

Применяя еще раз формулу Стирлинга, находим

$$\ln Z = N' \ln N - N' \ln N' + \sum_k N'_k (\ln N'_k - \ln N_k); \quad (3.32)$$

используя же

$$N' = \sum_k N'_k, \quad (3.33)$$

получаем

$$\ln Z = \sum_k N'_k \ln \frac{N'_k}{N_k} - \sum_k N'_k \ln \frac{N'}{N}, \quad (3.34)$$

что можно записать короче в виде

$$\ln Z = N' \sum_k \frac{N'_k}{N'} \ln \frac{N'_k/N'}{N_k/N}. \quad (3.35)$$

Как и ранее, введем относительные частоты, или вероятности,

$$N_k/N = p_k \quad (3.36)$$

и

$$N'_k/N' = p'_k. \quad (3.37)$$

Если разделить обе части (3.35) на N' [и затем умножить на константу K из (3.5)], получим окончательную формулу для прироста информации в виде

$$K(p', p) = \frac{K}{N'} \ln Z = K \sum_k p'_k \ln \frac{p'_k}{p_k}, \quad (3.38)$$

где

$$\sum_k p_k = 1 \quad (3.39)$$

и

$$\sum_k p'_k = 1. \quad (3.40)$$

Прирост информации $K(p, p')$ обладает следующим важным свойством, которое мы используем в других главах:

$$K(p', p) \geq 0. \quad (3.41)$$

Знак равенства имеет место тогда и только тогда, если

$$p' \equiv p, \quad \text{т. е. } p'_k = p \quad \text{для всех } k.$$

3.3. Информационная энтропия и ограничения

В этом и последующих двух разделах мы будем заниматься рассмотрением приложений концепции информации в *физике* и поэтому будем использовать для информации общепринятое обозначение S , отождествляя константу K в (3.3) с постоянной Больцмана k_B . По причинам, которые станут ясными в дальнейшем, S назовем информационной энтропией. Поскольку химические и биологические системы могут быть представлены как физические системы, наше рассмотрение применимо равным образом и к ним. Еще более важно то, что общий формализм этой главы применим также к другим дисциплинам, таким, как обработка информации и т. д.

Будем исходить из основной формулы

$$S = -k_B \sum_i p_i \ln p_i. \quad (3.42)$$

В отношении индексов i можно считать, что они описывают индивидуальные свойства частиц подсистемы. Рассмотрим этот вопрос более подробно. Индекс i может соответствовать, например, координате частицы или скорости, или описывать обе эти характеристики вместе. В рассмотренных выше примерах индекс i нумеровал ящики, заполненные шарами. В гл. 2 индекс i относился к значениям, которые могла принимать случайная переменная. В этом разделе для простоты предполагается, что индекс i принимает дискретные значения.

Центральная проблема, рассматриваемая в этой книге, — нахождение способов определения p_i (например, в случае газа из молекул в замкнутом объеме требуется определить местоположение молекул). Во многих дисциплинах мы встречаемся с задачей нахождения *объективных* оценок, приводивших бы к таким значениям p_i , которые согласуются со всей доступной информацией о системе. Так, рассмотрим идеальный газ в случае одного измерения. Можно определить, например, положение центра тяжести газа. Здесь ограничением будет условие

$$\sum_i p_i q_i = M, \quad (3.43)$$

где q_i — координата i -й ячейки, M — фиксированная величина, равная Q/N (Q — координата центра тяжести, N — число частиц). Конечно, этому соотношению можно удовлетворить, выбирая различные комбинации p_i . Поэтому мы могли бы выбрать совокупность $\{p_i\}$ довольно произвольным образом, т. е. отдав предпочтение какому-то одному из возможных вариантов. Как это часто бывает в жизни, такой выбор необъективен. Как сделать его объективным? Обратимся снова к примеру

с атомарным газом и воспользуемся принципом, сформулированным в разд. 3.1. Согласно этому принципу, с подавляюще большой вероятностью будут реализоваться те распределения, при которых выражение (3.42) имеет максимум. Однако из-за условия (3.43) не все эти распределения следует принимать в расчет и находить максимум (3.42) нужно при условии (3.43). Можно обобщить этот принцип на случай, когда имеется набор условий. Пусть, например, переменная i обозначает скорость. Тогда можно наложить условие, в соответствии с которым полная кинетическая энергия $E_{\text{кин}}^{\text{полн}}$ частиц оказывается фиксированной. Если обозначить кинетическую энергию частицы с массой m и скоростью v_i через $f_i [f_i = (m/2) v_i^2]$, то средняя кинетическая энергия в расчете на одну частицу задается формулой

$$\sum_i p_i f_i = E_{\text{кин}}. \quad (3.43a)$$

В общем случае одна система i может быть охарактеризована величинами $f_i^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots, M$ (координатой, кинетической энергией или другими типичными характеристиками). Если эти величины аддитивны и значения соответствующих сумм фиксированы, то ограничивающие условия принимают вид

$$\sum_i p_i f_i^{(k)} = f_k. \quad (3.44)$$

Кроме этого имеется обычное условие нормировки распределения вероятностей

$$\sum_i p_i = 1. \quad (3.45)$$

Задача нахождения экстремума (3.42) при условиях (3.44) и (3.45) может быть решена при помощи метода множителей Лагранжа λ_k , $k = 1, 2, \dots, M$ [см. (3.1)]. Умножим левые части (3.44) на λ_k , а левые части (3.45) на $(\lambda - 1)$ и просуммируем полученные выражения. Затем вычтем эту сумму из $(1/k_B)S$. Множитель $1/k_B$ обеспечивает определенную нормировку λ , λ_k . Затем проварьируем полную сумму по p_i :

$$\delta \left[\frac{1}{k_B} S - (\lambda - 1) \sum_i p_i - \sum_k \lambda_k \sum_i p_i f_i^{(k)} \right] = 0. \quad (3.46)$$

Дифференцируя по p_i и приравнявая полученное выражение нулю, получаем

$$-\ln p_i - 1 - (\lambda - 1) - \sum_k \lambda_k f_i^{(k)} = 0. \quad (3.47)$$

Решая (3.47) относительно p_i , находим

$$p_i = \exp \left\{ -\lambda - \sum_k \lambda_k f_i^{(k)} \right\}. \quad (3.48)$$

Подставим (3.48) в (3.45) и получим

$$e^{-\lambda} \sum_i \exp \left\{ - \sum_k \lambda_k f_i^{(k)} \right\} = 1. \quad (3.49)$$

Здесь для суммы по i удобно ввести сокращенное обозначение:

$$\sum_i \exp \left\{ - \sum_k \lambda_k f_i^{(k)} \right\} = Z(\lambda_1, \dots, \lambda_M). \quad (3.50)$$

Эта сумма называется статистической суммой. Подстановка (3.50) в (3.49) дает

$$e^\lambda = Z \quad (3.51)$$

или

$$\lambda = \ln Z, \quad (3.52)$$

что позволяет определить λ , если определены λ_k . Чтобы найти уравнения для λ_k , подставим (3.48) в (3.44). Это приводит к следующему уравнению:

$$\langle f_i^{(k)} \rangle = \sum_i p_i f_i^{(k)} = e^{-\lambda} \sum_i \exp \left\{ - \sum_l \lambda_l f_i^{(l)} \right\} \cdot f_i^{(k)}. \quad (3.53)$$

Уравнение (3.53) по своей структуре похоже на (3.50); различаются они тем, что в (3.53) каждый экспоненциальный фактор дополнительно умножается на $f_i^{(k)}$. Однако из (3.50) можно легко получить сумму, фигурирующую в (3.53), дифференцируя (3.50) по λ_k . Обозначая первый множитель в (3.53) через Z в соответствии с (3.51), получаем

$$\langle f_i^{(k)} \rangle = \frac{1}{Z} \left(- \frac{\partial}{\partial \lambda_k} \right) \underbrace{\sum_i \exp \left\{ - \sum_l \lambda_l f_i^{(l)} \right\}}_Z \quad (3.54)$$

или, короче,

$$f_k \equiv \langle f_i^{(k)} \rangle = - \frac{\partial \ln Z}{\partial \lambda_k}. \quad (3.55)$$

Поскольку левые части фиксированы [ср. (3.44)] и Z определяется, согласно (3.50), функцией специального вида от λ_k , то формула (3.55) задает в компактной форме систему уравнений для λ_k .

Приведем теперь формулу, которая впоследствии окажется полезной. Подставляя (3.48) в (3.42), получаем

$$\frac{1}{k_B} S_{\max} = \lambda \sum_i p_i + \sum_k \lambda_k \sum_i p_i f_i^{(k)}. \quad (3.56)$$

Используя (3.44) и (3.45), эту формулу можно записать в виде

$$\frac{1}{k_B} S_{\text{макс}} = \lambda + \sum_k \lambda_k f_k. \quad (3.57)$$

Таким образом, максимум информационной энтропии можно выразить через средние значения f_k и множители Лагранжа λ_k . Те читатели, которые знакомы с уравнениями Лагранжа первого рода в механике, вспомнят, что множители Лагранжа в этом случае имеют физический смысл сил. Аналогичным образом, как мы увидим в дальнейшем, множители Лагранжа λ_k и в других применениях имеют определенный физический (химический, биологический и т. д.) смысл. Формулами (3.48), (3.52) вместе с (3.42), (3.55) и (3.57) завершается вывод выражений для ρ и $S_{\text{макс}}$.

Выведем еще несколько полезных соотношений. Сначала выясним, как изменяется информация $S_{\text{макс}}$ при изменении функции $f_i^{(k)}$ и f_k [см. (3.44)]. Поскольку в соответствии с (3.57) S зависит не только от f , но также и от λ и λ_k , которые в свою очередь являются функциями f , при взятии производных по f следует соблюдать осторожность. Поэтому вычислим сначала вариацию λ из (3.52)

$$\delta\lambda \equiv \delta \ln Z = \frac{1}{Z} \delta Z.$$

Подставляя сюда Z из (3.50), получаем

$$\delta\lambda = e^{-\lambda} \sum_i \sum_k \{ -\delta\lambda_k f_i^{(k)} - \lambda_k \delta f_i^{(k)} \} \exp \left\{ - \sum_i \lambda_i f_i^{(i)} \right\}.$$

Используя определение p_i [см. (3.48)], преобразуем эту формулу к виду

$$\delta\lambda = - \sum_k \left[\delta\lambda_k \sum_i p_i f_i^{(k)} + \lambda_k \sum_i p_i \delta f_i^{(k)} \right].$$

Формула (3.53) и аналогичное определение $\langle \delta f_i^{(k)} \rangle$ позволяют записать последнее выражение как

$$\delta\lambda = - \sum_k \left[\delta\lambda_k \langle f_i^{(k)} \rangle + \lambda_k \langle \delta f_i^{(k)} \rangle \right]. \quad (3.58)$$

Подставляя (3.58) в выражение для $\delta S_{\text{макс}}$ [из (3.57)], найдем, что вариация от λ_k выпадает и остающееся выражение принимает вид

$$\delta S_{\text{макс}} = k_B \sum_k \lambda_k \left[\delta \langle f_i^{(k)} \rangle - \langle \delta f_i^{(k)} \rangle \right]. \quad (3.59)$$

Запишем его в форме

$$\delta S_{\text{макс}} = k_B \sum_k \lambda_k \delta Q_k, \quad (3.60)$$

где введено «обобщенное количество тепла»

$$\delta Q_k = \delta \langle f_i^{(k)} \rangle - \langle \delta f_i^{(k)} \rangle. \quad (3.61)$$

Термин «обобщенное количество тепла» станет понятным в дальнейшем при рассмотрении термодинамики. По аналогии с (3.55) можно получить простое выражение для дисперсии $f_i^{(k)}$ [см. (2.33)]:

$$\langle f_i^{(k)2} \rangle - \langle f_i^{(k)} \rangle^2 = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \lambda_k^2}. \quad (3.62)$$

Во многих практических применениях $f_i^{(k)}$ зависит от дополнительной переменной α (или набора таких переменных $\alpha_1, \alpha_2, \dots$). Вычислим изменение среднего значения (3.44) при изменении α . Дифференцируя $f_{i,\alpha}^{(k)}$ по α и усредняя, получаем

$$\left\langle \frac{\partial f_{i,\alpha}^{(k)}}{\partial \alpha} \right\rangle = \sum_i p_i \frac{\partial f_{i,\alpha}^{(k)}}{\partial \alpha}. \quad (3.63)$$

Воспользовавшись (3.51) и p_i в виде (3.48), выражение (3.63) можно записать в виде

$$\frac{1}{Z} \sum_i \frac{\partial f_{i,\alpha}^{(k)}}{\partial \alpha} \exp\left(-\sum_i \lambda_i f_{i,\alpha}^{(l)}\right) \quad (3.64)$$

или, через производную от Z по α ,

$$(3.64) = -\frac{1}{Z} \frac{1}{\lambda_k} \frac{\partial Z}{\partial \alpha}. \quad (3.65)$$

Окончательно получаем

$$-\frac{1}{\lambda_k} \frac{\partial \ln Z}{\partial \alpha} = \left\langle \frac{\partial f_{i,\alpha}^{(k)}}{\partial \alpha} \right\rangle. \quad (3.66)$$

Если имеются несколько параметров α_l , то эту формулу можно легко обобщить, приписывая в левой и правой частях параметру α , по которому производится дифференцирование, индекс l . Мы уже несколько раз убеждались в полезности величины, определяемой (3.50), или логарифма этой величины [см., например, (3.55) или (3.62), (3.66)]. Покажем, что соотношение $\ln Z \equiv \lambda$ [см. (3.52)] можно непосредственно получить из вариационного принципа. Формулу (3.46) можно интерпретировать следующим образом. Найдем экстремум выражения

$$\frac{1}{k_B} S - \sum_k \lambda_k \sum_i p_i f_i^{(k)} \quad (3.67)$$

при единственном ограничении

$$\sum_i p_i = 1. \quad (3.68)$$

С учетом (3.44), (3.57) и (3.52) легко показать, что экстремум (3.67) действительно совпадает с $\ln Z$. Отметим, что вариационный принцип используется по-разному при выводе выражения для $\ln Z$ и нахождении экстремума S . В последнем случае максимум S ищут при условиях (3.44), (3.45) при фиксированных f_k и с неизвестными λ_k . В первом же случае имеется лишь одно ограничение (3.68), а λ_k предполагаются заданными. Как происходит переход от одного набора фиксированных величин к другому, станет яснее из последующих примеров, взятых из физики, которые прояснят также многие другие аспекты рассмотренных вопросов.

Упражнения к разд. 3.3

Чтобы прочувствовать, что дает принцип экстремума, решите следующие задачи:

1. Определите все решения $p_1 + p_2 = 1$ при $0 \leq p_i \leq 1$, (У.1)

все решения $p_1 + p_2 + p_3 = 1$, (У.2)

все решения $\sum p_i = 1$. (У.3)

2. Помимо условий (У.1), (У.2), задается дополнительное условие (3.44). Определить в этом случае все решения p_i .

Указание. Рассматривайте (У.1)—(У.3) как уравнения в плоскости $p_1 - p_2$, пространстве $p_1 - p_2 - p_3$, в n -мерном пространстве. Найдите геометрическую интерпретацию дополнительных условий. Что представляет собой частное решение $p_1^{(0)}, \dots, p_n^{(0)}$ в пространстве p_1, p_2, \dots, p_n ?

3.4. Пример из физики: термодинамика

Пусть для наглядности индекс i соответствует скорости частицы. В более сложной теории p_i представляет собой вероятность заполнения i -го квантового состояния в многочастичной системе. Далее, отождествим $f_{i,\alpha}^{(k)}$ с энергией E_i , а параметр α — с объемом. Положим, таким образом, что

$$f_{i,\alpha}^{(k)} = E_i(V), \quad k = 1. \quad (3.69)$$

При этом

$$f_i \leftrightarrow U \equiv \langle E_i \rangle, \quad \alpha \leftrightarrow V, \quad \lambda_1 = \beta. \quad (3.70)$$

Здесь мы обозначили λ_1 через β . Используя эти обозначения, можно записать ряд формул, выведенных выше, так, что их

можно будет немедленно отождествить с хорошо известными соотношениями термодинамики и статистической физики. Теперь (3.48) записываем в виде

$$p_i = e^{-\lambda - \beta E_i(V)}. \quad (3.71)$$

Формула (3.71) представляет собой знаменитую *функцию распределения Больцмана*. Уравнение (3.57) приобретает вид

$$\frac{1}{k_B} S_{\text{макс}} = \ln Z + \beta U, \quad (3.72)$$

или после некоторого преобразования

$$U - \frac{1}{k_B \beta} S_{\text{макс}} = - \frac{1}{\beta} \ln Z. \quad (3.73)$$

Это уравнение хорошо известно в термодинамике и статистической физике. Первый член можно интерпретировать как внутреннюю энергию U , $1/\beta$ — как абсолютную температуру T , умноженную на постоянную Больцмана k_B , S — как энтропию. Правая часть представляет собой свободную энергию \mathcal{F} , так что (3.73) в термодинамических обозначениях записывается в виде

$$U - TS = \mathcal{F}. \quad (3.74)$$

Сравнивая (3.74) и (3.73), находим

$$\mathcal{F} = - k_B T \ln Z \quad (3.75)$$

и $S = S_{\text{макс}}$. В последующем изложении индекс «макс» будем опускать. Формула (3.50) теперь записывается как

$$Z = \sum_i \exp(-\beta E_i). \quad (3.76)$$

Это есть не что иное, как статистическая сумма. Из полученных выше формул можно вывести и ряд других соотношений термодинамики.

Единственная проблема, требующая дополнительного анализа, — это идентификация *независимых* и *зависимых* переменных. Начнем с информационной энтропии $S_{\text{макс}}$. В (3.57) она фигурирует как функция λ , λ_{μ} и f_k . Однако сами λ и λ_{μ} определены выражениями, содержащими f_k и $f_i^{(k)}$ в качестве *заданных* величин [см. (3.50), (3.52), (3.53)]. Таким образом, независимыми величинами являются f_k , $f_i^{(k)}$, а зависимыми — λ , λ_k , а также, как это следует из (3.57), и $S_{\text{макс}}$. На практике $f_i^{(k)}$ являются фиксированными функциями от i (например, функциями энергии состояния « i »), но все еще зависящими от параметров α [например, объема; см. (3.69)]. Таким образом, истинно независимыми величинами в нашем рассмотрении являются f_k

(как и выше) и α . Отсюда следует вывод, что $S = S(f_k, \alpha)$. В нашем примере $f_1 = E \equiv U$, $\alpha = V$ и, следовательно,

$$S = S(U, V). \quad (3.77)$$

Применим теперь общее соотношение (3.59) к нашей конкретной модели. Если варьировать лишь внутреннюю энергию U , но оставлять S неизменным, то

$$\delta \langle f_i^{(1)} \rangle \equiv \delta f_i \equiv \delta U \neq 0 \quad (3.78)$$

и

$$\delta f_{i,\alpha}^{(1)} \equiv \delta E_i(V) = (\delta E_i(V)/\delta V) \delta V = 0 \quad (3.79)$$

и, следовательно,

$$\delta S = k_B \lambda_1 \delta U,$$

или

$$\frac{\delta S}{\delta U} = k_B \lambda_1 (\equiv k_B \beta). \quad (3.80)$$

В соответствии с термодинамикой левая часть (3.80) определяет величину, обратную абсолютной температуре:

$$\delta S/\delta U = 1/T. \quad (3.81)$$

Как и ожидалось, это дает $\beta = 1/k_B T$. С другой стороны, варьирование V при фиксированном U , т. е.

$$\delta \langle f_i^{(1)} \rangle = 0, \quad (3.82)$$

но

$$\langle \delta f_i^{(1)} \rangle = \langle \delta E_i(V)/\delta V \rangle \cdot \delta V \neq 0 \quad (3.83)$$

дает в (3.59) вклад

$$\delta S = k_B (-\lambda_1) \langle \delta E_i(V)/\delta V \rangle \delta V$$

или

$$\frac{\delta S}{\delta V} = -\frac{1}{T} \langle \delta E_i(V)/\delta V \rangle. \quad (3.84)$$

Как следует из термодинамики,

$$\frac{\delta S}{\delta V} = \frac{P}{T}, \quad (3.85)$$

где P — давление. Сравнивая эту формулу с (3.84), получаем

$$\langle \delta E_i(V)/\delta V \rangle = -P. \quad (3.86)$$

Подстановка (3.81) и (3.85) в (3.59) приводит к соотношению

$$\delta S = \frac{1}{T} \delta U + \frac{1}{T} P \delta V. \quad (3.87)$$

В соответствующей формуле термодинамики правая часть равна dQ/T , где dQ — приращение тепла. Это и объясняет термин «обобщенное количество тепла», введенный ранее в (3.61). Проведенное рассмотрение можно обобщить на частицы различных сортов с заданными средними числами частиц \bar{N}_k , $k = 1, 2, \dots, m$. Отождествим f_1 с E , а $f_{k'+1}$ с $\bar{N}_{k'}$, $k' = 1, \dots, m$ (отметим изменение индекса!). Поскольку каждому сорту l отвечает свое число частиц N_l , заменим индекс i на обобщенный индекс i , N_1, \dots, N_m и положим

$$f_i^{(k+1)} \rightarrow f_{i, N_1, \dots, N_m}^{(k+1)} = N_k.$$

Чтобы привести полученные выше формулы в соответствие с теми, которые используются в термодинамике, положим

$$\lambda_{k+1} = -\frac{1}{k_B T} \mu_k, \quad (3.88)$$

где μ_k — величина, называемая химическим потенциалом.

После умножения обеих частей уравнения (3.57) на $k_B T$ с учетом (3.52) получаем

$$TS = k_B T \ln Z + U - \mu_1 \bar{N}_1 - \mu_2 \bar{N}_2 - \dots - \mu_m \bar{N}_m, \quad (3.89)$$

Из (3.59) следует тождество

$$\frac{\delta S}{\delta \bar{N}_k} = -k_B \lambda_{k+1} = \frac{1}{T} \mu_k. \quad (3.90)$$

Статистическая сумма принимает вид

$$Z = \sum_{N_1, N_2, \dots, N_m} \sum_i \exp \left\{ -\frac{1}{k_B T} [E_i(V) - \mu_1 N_1 - \dots - \mu_m N_m] \right\}. \quad (3.91)$$

Проведенное выше рассмотрение оказывается наиболее полезным в термодинамике необратимых процессов (см. разд. 3.5). В обычной же термодинамике роли независимых и зависимых переменных величин до некоторой степени меняются местами. В нашу задачу не входит рассмотрение различных преобразований, которые приводят к различным термодинамическим потенциалам (Гиббса, Гельмгольца и т. д.). Упомянем лишь один важный случай: вместо независимых переменных U, V (и N_1, \dots, N_m) можно ввести новые независимые переменные V и $T = (\partial S / \partial U)^{-1}$ (и N_1, \dots, N_m). В качестве примера рассмотрим случай $U - V$ (считая формально μ_1, μ_2, \dots). В соответствии с (3.77) свободная энергия \mathcal{F} является функцией T .

Дифференцирование $\partial \mathcal{F} / \partial T$ дает

$$-\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial T} = k_B \ln Z + \frac{1}{T} \frac{1}{Z} \sum_i E_i \exp(-\beta E_i).$$

Второй член в правой части есть просто U , так что

$$-\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial T} = k_B \ln Z + \frac{1}{T} U. \quad (3.92)$$

Сравнивая это соотношение с (3.73), где $1/\beta = k_B T$, приходим к важной формуле

$$-\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial T} = S, \quad (3.93)$$

где опущен индекс «макс».

3.5*. Элементы термодинамики необратимых процессов

Результаты предыдущего раздела позволяют просто ввести основные понятия термодинамики необратимых процессов. Рассмотрим систему, составленную из двух подсистем. Допустим, что для обеих подсистем заданы распределения вероятностей p_i и p'_i . Определим энтропии соответствующих подсистем

$$S = -k_B \sum_i p_i \ln p_i \quad (3.94a)$$

и

$$S' = -k_B \sum_i p'_i \ln p'_i. \quad (3.94b)$$

Для обеих подсистем справедливы дополнительные условия

$$\sum_i p_i f_i^{(k)} = f_k \quad (3.95a)$$

и

$$\sum_i p'_i f_i^{(k)} = f'_k. \quad (3.95b)$$

Потребуем, чтобы суммы значений f в обеих подсистемах были равны заданным постоянным

$$f_k + f'_k = f_k^0 \quad (3.96)$$

(например, фиксированы полное число частиц, полная энергия и т. д.). Согласно (3.57), энтропию можно представить в виде

$$\frac{1}{k_B} S = \lambda + \sum_k \lambda_k f_k \quad (3.97a)$$

и

$$\frac{1}{k_B} S' = \lambda' + \sum_k \lambda'_k f'_k \quad (3.97b)$$

(здесь и в дальнейшем опущен индекс «макс»). Введем теперь суммарную энтропию в полной системе

$$S + S' = S^0. \quad (3.98)$$

Чтобы перейти к термодинамике необратимых процессов, введем «экстенсивные величины» X . Экстенсивными называются величины, аддитивные по отношению к объему. Если объем системы разбивается на два объема, так что $V_1 + V_2 = V$, то для экстенсивной величины имеет место соотношение $X_{V_1} + X_{V_2} = X_V$. Примерами экстенсивных величин являются число частиц, энергия (в случае короткодействующего взаимодействия) и др. Различные физические величины (числа частиц, энергии и т. д.) мы будем различать по индексам k , а значения, которые они принимают в состоянии i , — по индексу i (или набору индексов). Это будет записываться как $X_i^{(k)}$.

Пример. Рассмотрим в качестве экстенсивных величин число частиц и энергию. Пусть индекс $k = 1$ относится к числу частиц, а $k = 2$ — к энергии. Тогда

$$X_i^{(1)} = N_i$$

и

$$X_i^{(2)} = E_i.$$

Очевидно, что $X_i^{(k)}$ мы должны отождествить с $f_i^{(k)}$:

$$X_i^{(k)} = f_i^{(k)}. \quad (3.99)$$

Для правой части (3.95) соответственно вводим обозначение X_k . В первой части этой главы рассмотрение ограничивалось случаем, когда экстенсивные величины X_k могут изменяться, тогда как $X_i^{(k)}$ фиксированы. Продифференцируем (3.98) по X_k . Используя (3.97) и условие

$$X_k + X'_k = X_k^0 \quad (3.100)$$

{ср. (3.96)}, находим

$$\frac{\partial S^{(0)}}{\partial X} = \frac{\partial S}{\partial X_k} - \frac{\partial S'}{\partial X'_k} = k_B (\lambda_k - \lambda'_k). \quad (3.101)$$

Рассмотрим следующий пример: пусть $X_k = U$ (внутренняя энергия), тогда $\lambda_k = \beta = 1/k_B T$ (см. разд. 3.4), а T , как и прежде, — абсолютная температура.

Так как мы хотим исследовать процессы, следует допустить, что энтропия S зависит от времени. Рассмотрим две подсистемы, энтропии которых равны S и S' и которые в начальный момент находятся в различных условиях, например имеют разные температуры. Затем эти две системы приводятся в контакт.

например, путем обмена энергией. Для метода термодинамики необратимых процессов характерен отказ от детальной конкретизации механизмов переноса энергии. Так, здесь совершенно не рассматриваются микроскопические механизмы столкновений молекул в газах или жидкостях. Вместо этого рассмотрение ведется в весьма общих терминах в предположении локального равновесия. Это следует из того факта, что энтропии S , S' здесь определяются точно так же, как и для равновесной системы при заданных ограничениях. Благодаря обмену энергией или другими физическими характеристиками распределение вероятностей p_i изменяется. Так, например, при нагревании газа молекулы приобретают другие значения кинетической энергии, что приводит к изменению p_i . Поскольку перенос энергии или других величин происходит постоянно, распределение вероятностей p_i постоянно меняется как функция времени. Если p_i зависят от времени, то и величины f_k [ср. (3.95а) или (3.95б)] также являются функциями времени. Обобщим теперь формализм нахождения максимума энтропии на случай, когда величины зависят от времени, предполагая, что физические величины f_k заданы и изменяются со временем, а p_i должны определяться из условия максимума энтропии

$$S = -k_B \sum_i p_i(t) \ln p_i(t) \quad (3.102)$$

при дополнительных условиях

$$\sum_i p_i(t) f_i^{(k)} = f_k(t). \quad (3.103)$$

В (3.103) предполагается, что f_k зависят от времени, например энергия U является функцией времени. Дифференцируя теперь (3.102) по времени и учитывая, что S зависит через условия (3.103) от $f_k \equiv X_k$, получаем

$$\frac{dS}{dt} = \sum_k \frac{\partial S}{\partial X_k} \frac{dX_k}{dt}. \quad (3.104)$$

Как мы видели ранее [ср. (3.101)], производная

$$\frac{1}{k_B} \frac{\partial S}{\partial X_k} = \lambda_k \quad (3.105)$$

вводит множители Лагранжа, которые определяют так называемые интенсивные величины. Второй сомножитель в (3.104) представляет собой временную производную от внутренней энергии. Законы сохранения, например энергии, требуют, чтобы уменьшение или увеличение энергии в одной системе происходило за счет потока энергии между различными системами.

Это приводит нас к определению потока по формуле

$$J_k = \frac{dX_k}{dt}. \quad (3.106)$$

Заменяя в (3.104) S на S^0 и используя (3.101) и (3.106), получаем

$$\frac{dS^0}{dt} = \sum_k J_k (\lambda_k - \lambda'_k) k_B. \quad (3.107a)$$

Разность $(\lambda_k - \lambda'_k) k_B$ называется *обобщенной термодинамической силой* (или *сродством*) и обозначается через

$$F_k = (\lambda_k - \lambda'_k) k_B. \quad (3.107b)$$

Смысл введения таких терминов станет ясным из примеров, рассмотренных ниже. С помощью (3.107b) можно представить (3.107a) в виде

$$\frac{dS^0}{dt} = \sum_k F_k J_k. \quad (3.108)$$

Эта формула выражает временную производную энтропии S^0 полной системы (1 + 2) через силы и потоки. Если $F_k = 0$, система находится в равновесии; если $F_k \neq 0$, происходит необратимый процесс.

Примеры. 1. Рассмотрим две системы, разделенные диатермической стенкой и положим $X_k = U$ (U — внутренняя энергия). Из термодинамики известно, что

$$\frac{\partial S}{\partial U} = \frac{1}{T}; \quad (3.109)$$

поэтому

$$F_k = \frac{1}{T} - \frac{1}{T'}. \quad (3.110)$$

Известно, что разность температур вызывает поток тепла. Таким образом, обобщенные силы являются причиной возникновения потоков.

2. Возьмем теперь в качестве X_k число молей. Тогда

$$F_k = [\mu'/T' - \mu/T]. \quad (3.111)$$

Различие химических потенциалов μ приводит к изменению числа молей.

В примерах 1 и 2 имеют место соответствующие потоки, а именно: в случае 1 — поток тепла и в случае 2 — поток частиц.

Рассмотрим теперь случай, когда экстенсивные переменные X являются параметрами от f . В этом случае в дополнение к (3.99)

$$X_k = \alpha_k, \quad (3.112)$$

$$f_i^{(k)} = f_{i, \alpha_1, \dots, \alpha_l}^{(k)}. \quad (3.113)$$

(Ниже будут приведены конкретные примеры из физики.) В соответствии с (3.59) в общем случае имеем

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha_j} = \sum_k k_B \lambda_k \left\{ \frac{\partial f_k}{\partial \alpha_j} - \left\langle \frac{\partial f_{i, \alpha_1, \dots}^{(k)}}{\partial \alpha_j} \right\rangle \right\}. \quad (3.114)$$

Ограничим дальнейшее рассмотрение случаем, когда f_k не зависят от α , т. е. будем считать f_k и α независимыми переменными.

[Пример. В выражении

$$f_{i, \alpha} \equiv E_i(V) \quad (3.115)$$

объем является независимой переменной, то же справедливо для внутренней энергии $U = \langle E_i(V) \rangle$.]

В этом случае (3.114) сводится к виду

$$\frac{1}{k_B} \frac{\partial S}{\partial \alpha_j} = \sum_k \lambda_k \left\{ - \left\langle \frac{\partial f_{i, \alpha_1, \dots}^{(k)}}{\partial \alpha_j} \right\rangle \right\}. \quad (3.116)$$

Для двух систем, характеризуемых (3.98) и (3.100), теперь появляются дополнительные условия

$$\alpha_j(t) + \alpha'_j(t) = \alpha_j^{(0)} \quad (1 \leq j \leq m) \quad (3.117)$$

(например, α равно объему.) Изменение энтропии S^0 полной системы со временем, dS^0/dt , можно найти из (3.107а), (3.116) и (3.117):

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_B} \frac{dS^{(0)}}{dt} = & \sum_k (\lambda_k - \lambda'_k) \frac{dX_k}{dt} - \\ & - \sum_{j, k} \left[\lambda_k \left\langle \frac{\partial X_i^{(k)}}{\partial \alpha_j} \right\rangle - \lambda'_k \left\langle \frac{\partial X_i'^{(k)}}{\partial \alpha_j} \right\rangle \right] \frac{d\alpha_j}{dt}. \end{aligned} \quad (3.118)$$

Используя определения (3.106) и (3.107б) совместно с

$$\frac{d\alpha_j}{dt} = \tilde{J}_j \quad (3.119)$$

и

$$\tilde{F}_j = k_B \sum_k \left[\lambda'_k \left\langle \frac{\partial X_i'^{(k)}}{\partial \alpha_j} \right\rangle - \lambda_k \left\langle \frac{\partial X_i^{(k)}}{\partial \alpha_j} \right\rangle \right], \quad (3.120)$$

приводим (3.118) к виду

$$\frac{dS^{(0)}}{dt} = \sum_{k=1}^n F_k J_k + \sum_{l=1}^m \tilde{F}_l \tilde{J}_l. \quad (3.121)$$

Положим

$$\begin{aligned} \hat{F}_l &= F_l; & \hat{J}_l &= J_l, & \text{если} & & 1 \leq l \leq n, \\ \hat{F}_l &= \tilde{F}_{l-n}; & \hat{J}_l &= \tilde{J}_{l-n}, & \text{если} & & n+1 \leq l \leq n+m, \end{aligned} \quad (3.122)$$

тогда получаем уравнение того же вида, что и в (3.107), но теперь уже с учетом параметров α :

$$\frac{dS^{(0)}}{dt} = \sum_l \hat{F}_l \hat{J}_l. \quad (3.123)$$

Важность этого обобщения станет ясной из следующего примера, который уже встречался в предыдущем разделе ($\alpha = V$) ($i \rightarrow i, N$):

$$\begin{aligned} f_{i,\alpha}^{(1)} &= E_i(V), & f_1 &\equiv X_1 = U; & \lambda_1 &= \frac{1}{k_B T}, \\ f_{i,\alpha}^{(2)} &= N, & f_2 &\equiv X_2 = \bar{N}; & \lambda_2 &= \frac{-\mu}{k_B T}. \end{aligned} \quad (3.124)$$

Подставляя (3.124) в (3.128), получаем

$$\frac{dS^{(0)}}{dt} = \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T'} \right) \frac{dU}{dt} + \left(\frac{\mu'}{T'} - \frac{\mu}{T} \right) \frac{d\bar{N}}{dt} + \left(\frac{P}{T} - \frac{P'}{T'} \right) \frac{dV}{dt}. \quad (3.125)$$

Интерпретация выражения (3.125) очевидна из примеров, даваемых формулами (3.110), (3.111). Первые два члена содержатся в (3.107), третий член возникает из общего выражения (3.123).

Соотношение (3.125) представляет собой хорошо известный результат термодинамики необратимых процессов. Очевидно, однако, что весь этот формализм применим и к совершенно другим дисциплинам при условии, что там можно ввести аналог локального равновесия. Поскольку термодинамика необратимых процессов рассматривает в основном *непрерывные системы*, покажем, как можно обобщить проведенное выше рассмотрение на этот случай.

Снова будем исходить из выражения для энтропии

$$S = -k_B \sum_i p_i \ln p_i, \quad (3.126)$$

предполагая, что S и распределение вероятностей p_i зависят от времени и координат.

Основная идея заключается в следующем. Разделим полную непрерывную систему на подсистемы (или полный объем на малые объемы) и предположим, что каждый подобъем, с одной стороны, достаточно велик, чтобы можно было применять методы термодинамики, а с другой — настолько мал, что внутри его распределение вероятностей или значение экстенсивной величины f можно считать постоянными. Допустим снова, что p_i определяются локально для заданного момента времени условиями (3.103), где f_k теперь меняются на

$$\hat{f}_k(x, t). \quad (3.127)$$

В качестве упражнения читателю предлагается обобщить это рассмотрение на случай, когда $f^{(k)}$ зависит от параметров α ,

$$\hat{f}_{i, \alpha}^{(k)}(x, t). \quad (3.128)$$

Рассмотрим уравнение

$$\sum_i p_i(x, t) \hat{f}_i^{(k)}(x, t) = \hat{f}_k(x, t), \quad (3.129)$$

определяющее p_i . Разделим энтропию S на единичный объем V_0 и рассмотрим изменение плотности энтропии

$$s = \frac{S}{V_0}. \quad (3.130)$$

Как и выше, экстенсивные величины отождествляем с f :

$$X_k \equiv \hat{f}_k(x, t). \quad (3.131)$$

Они теперь являются функциями координат и времени. Произведем замену

$$\frac{X_k}{V_0} \rightarrow X_k \quad \text{и} \quad \frac{\hat{f}_k}{V_0} \rightarrow \hat{f}_k. \quad (3.132)$$

В данном случае, когда f зависят от координат и времени, легко повторить все рассуждения разд. 3.3. При этом сразу же обнаруживается, что плотность энтропии можно снова записать в виде

$$\frac{1}{k_B} s = \lambda_0 + \sum_k \lambda_k(x, t) \hat{f}_k(x, t), \quad (3.133)$$

что полностью соответствует (3.97).

Наша цель — вывести уравнение непрерывности для плотности энтропии и получить в явном виде выражения для локального временного изменения энтропии и для потока энтропии. Рассмотрим сначала локальное временное изменение эн-

тропии, вычисляя производную от (3.133). Это дает [как мы уже видели в (3.59)]

$$\frac{1}{k_B} \frac{\partial s}{\partial t} = \sum_k \lambda_k \left[\frac{\partial}{\partial t} f_k - \left\langle \frac{\partial f^{(k)}}{\partial t} \right\rangle \right]. \quad (3.134)$$

Рассмотрим случай, когда $\langle \partial f^{(k)} / \partial t \rangle$ равны нулю. Производная $\partial f_k / \partial t$ дает локальное изменение во времени экстенсивных величин, например таких, как энергия, импульс и т. д. Так как можно предполагать, что эти величины X_k подчиняются уравнениям непрерывности

$$\dot{X}_k + \nabla \mathbf{J}_k = 0, \quad (3.135)$$

где \mathbf{J}_k — соответствующие потоки, мы заменим в (3.134) \dot{X}_k на $-\nabla \mathbf{J}_k$. Тогда (3.134) перепишем как

$$\frac{1}{k_B} \frac{\partial s}{\partial t} = - \sum_k \lambda_k \nabla \mathbf{J}_k. \quad (3.136)$$

Используя тождество

$$\lambda_k \nabla \mathbf{J}_k = \nabla (\lambda_k \mathbf{J}_k) - \mathbf{J}_k \nabla \lambda_k$$

и перегруппировав члены в (3.136), получаем окончательный результат

$$\frac{1}{k_B} \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \sum_k \lambda_k \mathbf{J}_k = \sum_k (\nabla \lambda_k) \mathbf{J}_k. \quad (3.137)$$

Левая часть типична для уравнения непрерывности. Это наводит на мысль, что величину

$$k_B \sum_k \lambda_k \mathbf{J}_k$$

можно рассматривать как адекватное выражение для потока энтропии. С другой стороны, правую часть можно рассматривать как локальную скорость производства энтропии и записать

$$\frac{dS}{dt} = k_B \sum_k (\nabla \lambda_k) \mathbf{J}_k. \quad (3.138)$$

Уравнение (3.137) можно интерпретировать следующим образом: локальное производство энтропии приводит к изменению энтропии со временем (первый член в левой части) и потоку энтропии (второй член). Важность этого уравнения заключается в том, что величины \mathbf{J}_k и $\nabla \lambda_k$ снова можно отождествить с макроскопически измеряемыми величинами. Так, например, если \mathbf{J}_k — поток энергии, то $k_B \nabla \lambda_k = \Delta(1/T)$ представляет собой термодинамическую силу. Здесь важно отметить следующее. В термодинамике необратимых процессов при выводе уравнения

движения для потоков используются несколько дополнительных гипотез. Обычно принимаются следующие допущения:

1) система является марковской, т. е. потоки в данный момент зависят только от обобщенных сил, взятых в тот же самый момент времени;

2) рассматриваются только линейные процессы, для которых потоки пропорциональны силам. Это означает, что потоки задаются в виде

$$J_k = \sum_j L_{jk} F_j. \quad (3.139)$$

Коэффициенты L_{jk} называются *коэффициентами Онсагера*. Рассмотрим в качестве примера поток тепла J . Феноменологически он связан с градиентом температуры T :

$$J = -\kappa \nabla T. \quad (3.140)$$

Это можно записать в несколько ином виде:

$$J = \kappa T^2 \nabla \frac{1}{T}. \quad (3.141)$$

Сравнивая эти выражения с (3.139) и (3.138), можно отождествить $\nabla(1/T)$ с обобщенной термодинамической силой, а κT^2 — с кинетическим коэффициентом L_{11} . Другими примерами являются закон Ома для электрического тока или закон Фика для диффузии.

Выше мы привели некоторые основные соотношения. Можно провести и ряд важных обобщений их. Например, мы предполагали, что между $p_i(t)$ и $f_k(t)$ существует мгновенная связь. Недавно Зубарев и др. рассмотрели случай связи, запаздывающей во времени. Это рассмотрение, как и проведенное нами, имеет ограниченную область применимости. Соответствующие ограничения будут рассмотрены в разд. 4.11.

Упражнения к разд. 3.5

1. Поскольку в соответствии с (3.42) S^0 , S и S' в (3.98) можно выразить через вероятности p_i, \dots , представляет интерес исследовать, как свойство аддитивности (3.98) отражается на виде распределения вероятностей p . Для этого докажите следующую теорему. Заданы энтропии (общий множитель k_B опускаем)

$$S^{(0)} = - \sum_{i,j} p(i, j) \ln p(i, j), \quad (У.1)$$

$$S = - \sum_i p_i \ln p_i, \quad (У.2)$$

$$S' = - \sum_j p'_j \ln p'_j, \quad (У.3)$$

где

$$p_i = \sum_j p(i, j), \quad (У.4)$$

$$p'_j = \sum_i p(i, j). \quad (У.5)$$

Покажите, что энтропии аддитивны, т. е.

$$S^{(0)} = S + S', \quad (У.6)$$

в том и только том случае, если

$$p(i, j) = p_i p'_j \quad (У.7)$$

(т. е. совместная вероятность $p(i, j)$ факторизуется, или, другими словами, события $X = i$, $Y = j$ статистически независимы).

Указания. а) Чтобы доказать необходимость этого условия, подставьте (У.7) в (У.1) и используйте условия $\sum_i p_i = 1$,

$$\sum_j p'_j = 1;$$

б) чтобы доказать достаточность, подставьте в левую часть (У.6) выражение (У.1), в правую часть — (У.2) и (У.3), тогда получится соотношение

$$\sum_{i,j} p(i, j) \ln(p(i, j)/(p_i p'_j)) = 0.$$

Теперь используйте свойство (3.41), которым обладает $K(p, p)'$, заменяя в (3.38) индекс k двойным индексом i, j .

2. Обобщите (3.125) на случай частиц нескольких сортов, когда насчитывается N_k частиц каждого сорта.

3.6. Энтропия — проклятие статистической механики ¹⁾?

В предыдущих главах мы убедились в том, что основные соотношения термодинамики естественным образом вытекают из концепции информации. Читатели, знакомые с термодинамическим выводом этих соотношений, согласятся с тем, что данный здесь вывод обладает внутренним изяществом. Однако сами понятия информации и энтропии таят в себе вопросы. В наши первоначальные планы входило найти объективные способы предсказания вида p_i . Как мы видели, вероятности p_i выпадают из термодинамических соотношений, так что в действительности их явный вид не важен. Не существенно даже то, как выбирают случайные переменные, по значениям которых, нумерованым индексом i , производится суммирование. Это находится

¹⁾ Автор, по-видимому, намекает на «вечную» проблему соотношения обратимости уравнений механики и соответствующего им уравнения Лиувилля и необратимости кинетических уравнений. — *Прим. ред.*

в полном согласии с так называемым субъективистским подходом к теории информации, в котором просто допускается, что нам доступно лишь ограниченное знание, в нашем случае представленное ограничивающими условиями, налагаемыми на p_i .

Имеется, однако, другая, объективистская школа. Согласно ей, возможно, по крайней мере в принципе, непосредственно определить p_i . Тогда следует проверить, согласуется ли развитый выше подход с полученными определенным образом значениями p_i . Рассмотрим пример из физики. Прежде всего можно установить необходимое условие. В статистической механике допускают, что p_i подчиняются так называемому уравнению Лиувилля, которое является полностью детерминистским (ср. упражнения к разд. 6.3). Из этого уравнения вытекает, что некоторые величины являются константами движения (энергия, импульс и т. д.). Условия, рассмотренные в разд. 3.4, согласуются с подходом статистической механики, если f_k и есть такие константы движения. В этом случае можно показать, что p_i действительно удовлетворяют уравнению Лиувилля (ср. упражнения к разд. 6.3).

Рассмотрим теперь задачу с зависящими от времени величинами. Одним из основных постулатов термодинамики является утверждение, что в замкнутой системе энтропия возрастает. С другой стороны, если p_i подчиняются уравнению Лиувилля и начальное состояние системы с достоверностью известно, то можно точно показать, что S не зависит от времени. Это можно понять из следующих рассуждений. Пусть индекс i соответствует координате q или индексам ячеек некоторого пространства (в действительности это многомерное пространство координат и импульсов). Поскольку p_i подчиняются детерминистским уравнениям, то всегда $p_i = 1$, если ячейка занята в момент времени t , и $p_i = 0$, если ячейка пуста. Таким образом, информация остается равной нулю, поскольку за время всего процесса неопределенность не возникает. Чтобы удовлетворить условию возрастания энтропии, были предложены два подхода.

1. Производят усреднение распределения вероятностей по малым объемам¹⁾, меняя p_i на $1/\Delta v \int p_i dV = \bar{P}_i$ и вводя $S = -k_B \sum_i \bar{P}_i \ln \bar{P}_i$ (сумма может быть заменена интегралом). Эта

функция S называется «крупнозернистой энтропией». Усреднение учитывает тот факт, что у нас нет полного знания о начальном состоянии. Начальное распределение, как можно показать, все больше и больше расплывается, так что по отношению к виду реального распределения возникает неопределен-

¹⁾ Подразумеваются объемы в фазовом пространстве.

ность и это приводит к возрастанию энтропии. Основную идею крупнозернистого усреднения можно наглядно представить себе следующим образом (см. стр. 18). Капнем чернила в воду. Если следить за отдельными частицами чернил, то их траектории будут полностью детерминированы. Однако если усреднять по объемам, то состояние будет все более диффузным. Этот подход обладает определенным недостатком, поскольку возникает впечатление, что возрастание энтропии обусловлено процедурой усреднения.

2. Во втором подходе предполагают, что невозможно определить p_i из полностью детерминистских уравнений механики. Действительно, нельзя пренебрегать взаимодействием системы с окружающей средой. Внешний мир постоянно вносит флуктуации в систему. Если устранить другие контакты, то останутся вакуумные флуктуации электромагнитного поля, флуктуации гравитационного поля и т. д. Такие взаимодействия, играющие большую роль в практических задачах, могут быть учтены введением «термостатов» или «резервуаров» (см. гл. 6). В особенности они важны в *открытых системах*, где часто требуется явно вводить постоянные затухания и вероятности процессов. В этой книге используется подход, в котором функции распределения p_i всегда, по крайней мере до некоторой степени, размыты, что автоматически приводит к росту энтропии (в замкнутой системе), или, в более общем смысле, к увеличению прироста информации (см. разд. 3.2) в открытой (или замкнутой) системе (подробнее см. упр. 1 и 2 к разд. 5.3).

Из-за недостатка места мы не можем обсуждать эти проблемы более детально, но надеемся, что читатель узнает много нового из непосредственных примеров. Они будут даны в гл. 4 в связи с кинетическим уравнением, в гл. 6 в связи с уравнением Фоккера — Планка и уравнением Ланжевена и в гл. 8, 10 на явных примерах. Кроме того, роль флуктуаций в проблеме энтропии будет обсуждаться в разд. 4.10.

Случайность

КАК ДАЛЕКО МОЖЕТ ЗАБРЕСТИ ПЬЯНЫИ

В гл. 2 мы имели дело с фиксированной вероятностной мерой, теперь мы переходим к изучению стохастических процессов, в которых вероятностная мера изменяется со временем. Сначала как пример чисто стохастического движения мы рассмотрим модели броуновского движения. Затем покажем, как введение все большего числа ограничений, например в формализме кинетического уравнения, делает стохастический процесс все более детерминированным.

Гл. 4 и 5 одинаково важны для последующего изложения. Поскольку гл. 4 более трудна для чтения, можно сначала прочитать гл. 5, а затем уже гл. 4. С другой стороны, гл. 4 непосредственно продолжает нить рассуждений гл. 2 и 3. В любом случае разделы, обозначенные звездочкой, при первом чтении можно опустить.

4.1. Модель броуновского движения

Эта глава преследует три цели. 1) Здесь дается наиболее простой пример стохастического процесса. 2) Показывается, как в этом случае можно получить явное выражение для вероятности. 3) Показывается, что происходит, когда эффекты многих независимых событий складываются. С помощью биномиального распределения вероятностей, полученного в разд. 2.11, мы можем провести изящное рассмотрение броуновского движения. Объясним сначала, что представляет собой броуновское движение. Если под микроскопом следить за малой частицей, погруженной в жидкость, наблюдается, что она движется зигзагообразно. В нашей модели мы предполагаем, что частица движется вдоль одномерной цепочки, перескакивая из какой-либо точки в одну из двух соседних с ней точек с *равной вероятностью*. Найдем вероятность того, что после n скачков частица окажется на определенном расстоянии x от исходной точки. Назовем скачок направо успехом, а скачок налево неудачей. Конечное положение x достигается, скажем, после s успехов

и $(n - s)$ неудач. Если величина элементарного шага равна a , то достигнутая координата x равна

$$x = a(s - (n - s)) = a(2s - n). \quad (4.1)$$

Отсюда можно выразить число успехов:

$$s = \frac{n}{2} + \frac{x}{2a}. \quad (4.2)$$

Обозначая время перескока при одном элементарном шаге через τ , для времени t , затраченного на n шагов, имеем

$$t = n\tau. \quad (4.3)$$

Вероятность нахождения определенной конфигурации из n испытаний, из которых s оказались успешными, была получена в разд. 2.11. Она равна

$$P(s, n) = \binom{n}{s} \left(\frac{1}{2}\right)^n \quad (4.4)$$

(в рассматриваемом случае $p = q = 1/2$). С помощью (4.2) и (4.3), выражая s и n через измеримые величины x (расстояние) и t (время), вместо (4.4) получаем

$$\hat{P}(x, t) \equiv P(s, n) = \binom{t/\tau}{t/(2\tau) + x/(2a)} \left(\frac{1}{2}\right)^{t/\tau}. \quad (4.4a)$$

Очевидно, что эта формула не очень удобна и пользоваться ею для точных вычислений трудно. Однако во многих практически важных случаях измерения производят за такие промежутки времени t , которые содержат много элементарных шагов, так что n можно считать большим числом. Предположим также, что достижение точки x требует большого числа шагов s , так что и s можно считать большим. В этом предельном случае с помощью нескольких элементарных выкладок формула (4.4a) упрощается. (Нетерпеливый читатель может сразу перейти к окончательному результату (4.29), который понадобится в последующем изложении.) Чтобы вычислить (4.4) при больших s и n , запишем это выражение в виде

$$\frac{n!}{s!(n-s)!} \left(\frac{1}{2}\right)^n \quad (4.5)$$

и используем для факториалов формулу Стирлинга (ср. разд. 2.14) в виде

$$n! = e^{-n} n^n \sqrt{2\pi n}. \quad (4.6)$$

Подставляя (4.6) и аналогичные формулы для $s!$ и $(n-s)!$ в (4.4), получаем

$$\hat{P}(x, t) \equiv \hat{P}(s, n) = A \cdot B \cdot C \cdot F, \quad (4.7)$$

где

$$A = \frac{e^{-n}}{e^{-s} e^{-(n-s)}} = 1, \quad (4.8)$$

$$B = \exp[n \ln n - s \ln s - (n-s) \ln(n-s)], \quad (4.9)$$

$$C = n^{1/2} (2\pi s(n-s))^{-1/2},$$

$$F = \exp(-n \ln 2). \quad (4.10)$$

Множитель A возникает из членов со степенями от e в (4.6), которые в (4.8) взаимно уничтожаются. B получается из второго множителя в (4.6), а C — из последнего множителя в (4.6), в то время как F — это переписанный иначе последний множитель в (4.5). Упростим сначала (4.9). С этой целью воспользуемся для s формулой (4.2) и обозначим

$$\frac{x}{2a} = \delta. \quad (4.11)$$

Затем перепишем (4.9) с учетом элементарных формул для логарифма

$$\ln\left(\frac{n}{2} \pm \delta\right) = \ln n - \ln 2 + \ln\left(1 \pm \frac{2\delta}{n}\right) \quad (4.12)$$

и

$$\ln(1 + \alpha) = \alpha + \frac{\alpha^2}{2} + \dots, \quad (4.13)$$

оставив лишь члены до второго порядка по δ включительно; при этом для $B \cdot F$ получим

$$B \cdot F = \exp\left\{-\frac{2\delta^2}{n}\right\} = \exp\left\{-\frac{x^2 \tau}{2a^2 t}\right\}. \quad (4.14)$$

Введем обозначение

$$D = \frac{a^2}{\tau}, \quad (4.15)$$

где D — коэффициент диффузии. В дальнейшем потребуем, чтобы при стремлении a и τ к нулю коэффициент диффузии D оставался конечным. Таким образом, (4.14) принимает вид

$$B \cdot F = \exp\left\{-\frac{x^2}{2Dt}\right\}. \quad (4.16)$$

Обратимся теперь к множителю C в (4.7). Как мы увидим, этот множитель тесно связан с постоянной нормировки. Подставляя

(4.3) и (4.2) в выражение для C , находим

$$C = (2\pi)^{-1/2} \left(\frac{n}{\left(\frac{n}{2} - \frac{x}{2a}\right) \left(\frac{n}{2} + \frac{x}{2a}\right)} \right)^{1/2}, \quad (4.17)$$

или после элементарных преобразований

$$C = (2\pi)^{-1/2} 2 \left\{ \left(t^2 - x^2 \tau \frac{\tau}{a^2} \right) \left(\frac{1}{t\tau} \right) \right\}^{-1/2}, \quad (4.18)$$

где $\tau/a^2 = 1/D$. Поскольку τ и a мы будем устремлять к нулю и при условии, что D фиксировано,

$$\tau D \rightarrow 0,$$

так что член, содержащий x^2 , в (4.18) может быть опущен и

$$C = (2\pi)^{-1/2} 2\tau^{1/2} t^{-1/2}. \quad (4.19)$$

Подставляя в (4.7) промежуточные результаты для A (4.8), $B \cdot F$ (4.16) и C (4.19), находим, что

$$\hat{P}(x, t) = (2\pi)^{-1/2} 2\tau^{1/2} t^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{x^2}{2Dt} \right\}. \quad (4.20)$$

Наличие множителя $\tau^{1/2}$, конечно, довольно неприятно, поскольку мы намереваемся устремить τ к нулю. Но от этого осложнения легко избавиться, если вспомнить, что не имеет смысла вводить непрерывную переменную x^1) и определять *вероятность* нахождения *точного значения* x . Эта вероятность с необходимостью должна обращаться в нуль. Мы же должны искать вероятность обнаружения частицы в момент времени t в интервале между x_1 и x_2 или в исходных координатах в интервале между s_1 и s_2 . Для этого следует вычислить сумму (ср. разд. 2.5)

$$\sum_{s_1}^{s_2} P(s, n) = P(s_1 \leq s \leq s_2). \quad (4.21)$$

Если $P(s, n)$ — медленно меняющаяся функция в интервале s_1, \dots, s_2 , то сумму можно заменить интегралом

$$\sum_{s_1}^{s_2} P(s, n) = \int_{s_1}^{s_2} P(s, n) ds. \quad (4.22)$$

Переходим теперь к новым координатам x, t . Из (4.2) следует, что

$$ds = \frac{1}{2a} dx. \quad (4.23)$$

¹⁾ Заметим, что благодаря (4.15) и (4.1) при стремлении τ к нулю x становится непрерывной переменной!

Используя кроме этого (4.7), вместо (4.22) находим

$$\sum_{s_1}^{s_2} P(s, n) = \int_{x_1}^{x_2} \hat{P}(x, t) \frac{1}{2a} dx. \quad (4.24)$$

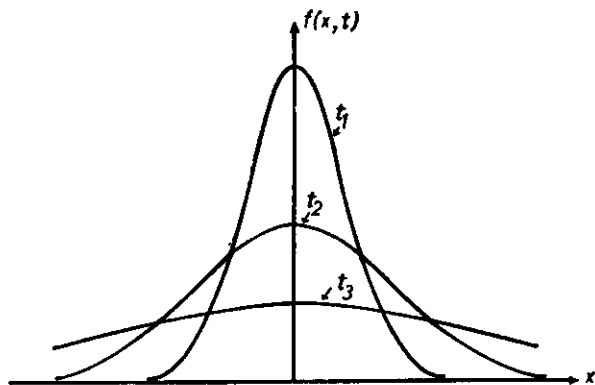
Как мы скоро увидим, удобно ввести обозначение

$$\frac{1}{2a} \hat{P}(x, t) = f(x, t), \quad (4.25)$$

так что окончательно (4.22) записывается в виде

$$\sum_{s_1}^{s_2} P(s, n) = \int_{x_1}^{x_2} f(x, t) dx. \quad (4.26)$$

При подстановке в (4.21) распределения вероятностей (4.7), пропорционального $\tau^{1/2}$, мы видим, что множитель $\tau^{1/2}$ входит



Фиг. 4.1. Функция распределения (4.29) как функция пространственной координаты x в три различных момента времени.

вместе с $1/a$. Поэтому в соответствии с (4.15) запишем

$$\frac{\tau^{1/2}}{a} = D^{-1/2}, \quad (4.27)$$

так что окончательно (4.21) запишется как

$$\int_{x_1}^{x_2} \exp \left\{ -\frac{x^2}{2Dt} \right\} (2\pi)^{-1/2} t^{-1/2} D^{-1/2} dx. \quad (4.28)$$

При сравнении окончательной формулы (4.28) с (2.21) оказывается, что функцию

$$f(x, t) = (2\pi Dt)^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{x^2}{2Dt} \right\} \quad (4.29)$$

можно отождествить с плотностью вероятности (фиг. 4.1). Физический смысл функции $f(x, t)$ заключается в том, что $f(x, t) dx$ дает вероятность нахождения частицы в момент времени t в интервале $x \dots x + dx$. Проведенные выше преобразования (4.21) — (4.29) часто сокращают следующим образом: в предположении медленного непрерывного изменения $P(s, n)$ и f можно записать сумму в левой части (4.26) так:

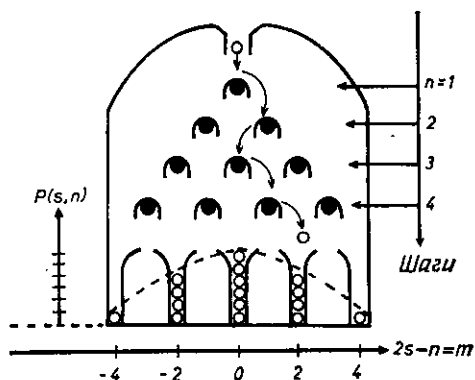
$$P(s, n) \Delta s \quad (\Delta s \equiv s_2 - s_1),$$

а правую часть (4.26) — в виде

$$f(x, t) \Delta x \quad (\Delta x = x_2 - x_1).$$

При переходе к бесконечно малым интервалам формула (4.26) принимает вид

$$P(s, n) ds = f(x, t) dx. \quad (4.30)$$



Фиг. 4.2. Случайное блуждание шара в игровой машине дает биномиальное распределение (4.4). Здесь $n = 4$. Внизу показано среднее число шаров, попадающих в соответствующие отсеки.

Конкретные примеры можно найти в целом ряде дисциплин, например в физике. Результат, представленный формулой (4.29), имеет фундаментальное значение. Он показывает, что при сложении многих независимых событий (именно, переходов вперед или назад на один шаг) вероятность суммарной величины (расстояния x) задается формулой (4.29), т. е. нормальным распределением. Прекрасный пример распределения (4.4) или (4.29) дает игральная машина, изображенная на фиг. 4.2. Другой важный результат заключается в том, что в пределе непрерывно изменяющихся величин, исходная вероятность принимает очень простой вид.

Обсудим теперь *ограниченное броуновское движение*. Снова рассмотрим процесс перескоков частиц между точками, но теперь между каждыми двумя точками поместим диафрагму, так чтобы частица могла перескакивать только в одном направлении, скажем направо. Тогда

$$p = 1 \quad \text{и} \quad q = 0. \quad (4.31)$$

В этом случае число успехов s совпадает с числом прыжков n :

$$s = n. \quad (4.32)$$

Таким образом, вероятностная мера

$$P(s, n) = \delta_{s, n}. \quad (4.33)$$

Снова вводим координату $x = sa$ и время $t = n\tau$ и считаем, что $a \rightarrow 0$, $\tau \rightarrow 0$, так что x и t становятся непрерывными. Используя (4.30), получаем плотность вероятности

$$f(x, t) = \delta(x - vt), \quad v = a/\tau, \quad (4.34)$$

поскольку δ -символ Кронекера при переходе к непрерывному случаю заменяется на δ -функцию Дирака. Отметим, что $\lim_{\tau \rightarrow 0}$ и $\lim_{a \rightarrow 0}$ следует брать так, чтобы выражение $v = a/\tau$ оставалось конечным.

Упражнение к разд. 4.1

Вычислите первые два момента для (4.29) и (4.34) и сравните их временные зависимости. Как это можно использовать для выяснения того, каким образом осуществляется проводимость в нервных волокнах: с помощью процесса диффузии или с помощью однонаправленного процесса?

4.2. Модель случайного блуждания и соответствующее кинетическое уравнение

В предыдущем разделе мы уже встречались с примером стохастического процесса, протекающего во времени, а именно с движением частицы, совершающей случайные перескоки вперед и назад. Нашей целью является вывод уравнения для вероятностной меры, точнее, мы хотим вывести уравнение для вероятности того, что после $n+1$ скачков частица окажется в положении m , $m=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$. Обозначим эту вероятность через $P(m; n+1)$. Так как частица в одном элементарном акте перескакивает только на расстояние «1», то после n скачков она должна быть в точке $m-1$ или $m+1$, чтобы после $n+1$ -го скачка оказаться точно в положении m . В эти точки частица попадает с вероятностью либо $P(m-1; n)$, либо $P(m+1; n)$. Таким образом, $P(m; n+1)$ состоит из двух частей, это обусловлено двумя возможностями по отношению к направлению перескока частицы. Частица переходит из $m-1$ в m с вероятностью перехода

$$w(m, m-1) = 1/2 (= p). \quad (4.35)$$

Вероятность $P(m; n+1)$ нахождения частицы в точке m после $n+1$ скачков, если в момент n -го скачка она находилась в точке $m-1$, задается произведением $w(m, m-1) \cdot P(m-1; n)$.

Совершенно аналогичное выражение можно получить для случая, когда частица попадает в точку m из $m + 1$. Так как частица может прийти в эту точку либо из $m - 1$, либо из $m + 1$ и эти события независимы, $P(m; n + 1)$ можно записать в виде

$$P(m; n + 1) = \omega(m, m - 1)P(m - 1; n) + \omega(m, m + 1)P(m + 1; n) \quad (4.36)$$

где

$$\omega(m, m + 1) = \omega(m, m - 1) = 1/2. \quad (4.37)$$

Отметим, что мы не использовали выражение (4.37) явно, так что формула (4.36) также справедлива в общем случае, при условии что

$$p + q \equiv \omega(m, m + 1) + \omega(m, m - 1) = 1. \quad (4.38)$$

Данный пример позволяет просто объяснить некоторые понятия. В разд. 2.6 мы ввели понятие совместной вероятности, которое теперь можно обобщить на случай нестационарных процессов. Рассмотрим в качестве примера вероятность $P(m, n + 1; m', n)$ нахождения частицы после n шагов в точке m' и после $n + 1$ шагов в точке m . Эта вероятность состоит из двух частей, о которых уже говорилось выше. Частица может быть на шаге n в точке m' с вероятностью $P(m'; n)$, затем она может перейти из m' в m с вероятностью $\omega(m, m')$. Таким образом, совместную вероятность можно записать в виде

$$P(m, n + 1; m', n) = \omega(m, m')P(m'; n), \quad (4.39)$$

где ω , очевидно, совпадает с условной вероятностью (ср. разд. 2.8). Поскольку частица при каждом скачке уходит из исходной точки, т. е.

$$m \neq m', \quad (4.40)$$

и поскольку она может перескочить только на элементарный шаг «1»,

$$|m - m'| = 1, \quad (4.41)$$

то $\omega(m, m') = 0$, за исключением случая $m' = m \pm 1$ (для нашего примера).

Возвратимся к (4.36) и преобразуем эту формулу. Введем обозначения

$$\omega(m, m \pm 1)/\tau = \tilde{\omega}(m, m \pm 1)$$

и назовем $\tilde{\omega}(m, m \pm 1)$ вероятностью перехода в секунду (или в единицу времени). Вычтем $P(m, n)$ из обеих частей (4.36) и разделим обе части на τ . Используя далее (4.38), получаем

следующее уравнение:

$$\frac{P(m; n+1) - P(m; n)}{\tau} = \tilde{\omega}(m, m-1)P(m-1; n) + \tilde{\omega}(m, m+1)P(m+1; n) - (\tilde{\omega}(m+1, m) + \tilde{\omega}(m-1, m))P(m; n). \quad (4.42)$$

В нашем конкретном примере обе вероятности ω равны $1/(2\tau)$. Свяжем дискретную переменную n со временем t : $t = n\tau$ и соответственно введем вероятностную меру \tilde{P} , положив

$$\tilde{P}(m, t) = P(m; n) \equiv P(m; t/\tau); \quad (4.43)$$

\tilde{P} в (4.43) обозначает функцию $P(m; t/\tau)$. Аппроксимируем разность в левой части (4.42) временной производной:

$$(P(m; n+1) - P(m; n))/\tau \approx d\tilde{P}/dt, \quad (4.44)$$

так что первоначальное уравнение (4.36) принимает вид

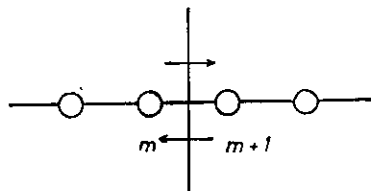
$$\frac{d\tilde{P}(m, t)}{dt} = \tilde{\omega}(m; m-1)\tilde{P}(m-1, t) + \tilde{\omega}(m, m+1)\tilde{P}(m+1, t) - (\tilde{\omega}(m+1, m) + \tilde{\omega}(m-1, m))\tilde{P}(m, t). \quad (4.45)$$

Это уравнение известно в литературе под названием *кинетического уравнения*.

Рассмотрим теперь стационарное состояние, в котором вероятность P не зависит от времени. Как такое состояние может поддерживаться, несмотря на все время продолжающиеся скачки частиц? Проведем линию, перпендикулярную цепочке между точками m и $m+1$ (фиг. 4.3); величина P не изменяется, если (в единицу времени) в правом и левом направлениях происходит одно и то же число переходов. Это условие называется принципом детального равновесия (фиг. 4.3). Математически оно может быть записано в виде

$$\tilde{\omega}(m, m')P(m'; n) = \tilde{\omega}(m', m)P(m; n). \quad (4.46)$$

В разд. 4.1 мы видели, что m удобно заменить на непрерывно меняющуюся переменную x , положив $m = x/a$. Если x конечно и a стремится к нулю, то m с необходимостью должно стать очень большим числом. В этом случае по сравнению с m единицу можно рассматривать как малую величину. Заменяем фор-



Фиг. 4.3. Наглядное представление принципа детального равновесия.

мально 1 величиной ε и рассмотрим частный случай:

$$\tilde{\omega}(m, m+1) = \tilde{\omega}(m, m-1) = \frac{1}{2\tau}.$$

При этом правая часть (4.42) приобретает вид

$$\frac{1}{2\tau} \tilde{P}(m-\varepsilon, t) + \tilde{P}(m+\varepsilon, t) - 2\tilde{P}(m, t). \quad (4.47)$$

Разложим ее в ряд Тейлора по ε до членов второго порядка включительно:

$$(4.47) \approx \frac{1}{2\tau} \left\{ \tilde{P}(m, t) + \tilde{P}(m, t) - 2\tilde{P}(m, t) + \right. \\ \left. + [\tilde{P}'(m, t) - \tilde{P}'(m, t)]\varepsilon + \frac{1}{2} [\tilde{P}''(m, t) + \tilde{P}''(m, t)]\varepsilon^2 \right\}; \quad (4.48)$$

здесь штрихи обозначают дифференцирование \tilde{P} по m . Так как члены, пропорциональные ε^0 или ε , равны нулю, первым исчезающим членом будет вторая производная от \tilde{P} . Подстановка этого результата в (4.42) дает

$$\frac{d\tilde{P}}{dt} = \frac{1}{2\tau} \frac{d^2\tilde{P}}{dm^2} \varepsilon^2. \quad (4.49)$$

Теперь удобно ввести новую функцию f по формуле

$$\tilde{P}(m, t) \Delta m = f(x, t) \Delta x. \quad (4.50)$$

(Насчет того, почему здесь мы ввели Δm и Δx , см. разд. 4.1.) Используя, кроме того,

$$\frac{d}{dm} = \frac{a \cdot d}{dx}, \quad \varepsilon = 1, \quad (4.51)$$

приходим к основному уравнению

$$\frac{df(x, t)}{dt} = \frac{1}{2} D \frac{d^2f(x, t)}{dx^2}, \quad D = \frac{a^2}{\tau}, \quad (4.52)$$

которое называется *уравнением диффузии*. Как мы увидим позже (разд. 6.3), это уравнение является очень простым частным случаем так называемого уравнения Фоккера — Планка. Решение (4.52) найти, конечно, проще, чем решение кинетического уравнения. Разложение по ε основано на свойствах масштабного преобразования (скейлинга). Действительно, стремление ε к нулю можно понимать как стремление к нулю масштаба длины a . Поэтому проделанные преобразования можно повторить более формальным образом, введя в качестве параметра разложения масштаб длины a . Поскольку $\Delta x/\Delta m = a$, положим

$$P(m, t) = af(x, t) \quad (4.53a)$$

и одновременно с этим, поскольку координата $m + 1$ означает, что частица находится в точке $x + a$, положим

$$\dot{P}(m \pm 1, t) = af(x \pm a, t). \quad (4.536)$$

Подстановка (4.53а) и (4.536) в (4.42) после разложения f до членов второго порядка по a снова приводит к (4.52). Проведенный вывод справедлив лишь при условии, что при фиксированном a функция f на расстоянии $\Delta x = a$ изменяется очень мало. Таким образом, вся процедура обусловлена требованием самосогласованности.

Упражнения к разд. 4.2

1. Покажите, что с учетом (4.37) $P(s, n)$, заданное в виде (4.4), удовлетворяет (4.36), если s, n соответствующим образом связаны с m, n . Начальное условие: $P(m, 0) = \delta_{m,0}$ (т. е. $P = 1$ для $m = 0$ и $P = 0$ для $m \neq 0$).

2. Убедитесь, что (4.29) удовлетворяет (4.52) с начальным условием $f(x, 0) = \delta(x)$ (δ — функция Дирака).

3. Проведите обобщение уравнения (4.52) на случай $\omega(m, m + 1) \neq \omega(m, m - 1)$.

4. *Перенос возбуждения между двумя молекулами посредством процесса перескоков.* Обозначим две молекулы индексами $j = 0, 1$, а вероятность обнаружить молекулу j в возбужденном состоянии в момент t — через $P(j, t)$ $\tilde{\omega}$ — число скачков в единицу времени. Кинетическое уравнение для этого процесса имеет вид

$$\dot{P}(0, t) = \tilde{\omega}P(1, t) - \tilde{\omega}P(0, t), \quad (У.1)$$

$$P(1, t) = \tilde{\omega}P(0, t) - \tilde{\omega}P(1, t).$$

Покажите, что равновесное распределение равно

$$P(j) = 1/2. \quad (У.2)$$

Определите условную вероятность

$$P(j, t | j', 0) \quad (У.3)$$

и совместную вероятность

$$P(j, t; j', t'). \quad (У.4)$$

Указание. Решайте уравнение (У.1), задавая решение в виде

$$P(j, t | j', 0) = \alpha_1 j e^{-\lambda_1 t} + \alpha_2 j e^{-\lambda_2 t} \quad (У.5)$$

и используя для $j' = 0, j' = 1$ начальное условие ($t = 0$)

$$P(0, 0) = 1, \quad P(1, 0) = 0. \quad (У.6)$$

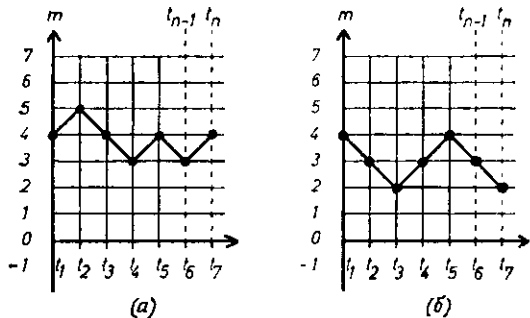
4.3*. Совместная вероятность и траектории.

Интегралы по траекториям

Марковские процессы.

Уравнение Чемпена — Колмогорова.

Для разъяснения основных идей этого раздела возьмем пример, рассмотренный в двух предыдущих разделах, — частицу, совершающую случайные скачки по узлам цепочки. Если проследить за различными положениями, которые частица последовательно занимает в процессе перескоков, то картина окажется примерно такой, как показано на фиг. 4.4, а. В моменты



Фиг. 4.4. Две траектории броуновской частицы: $t_1 = 0$, $m_1 = 4$, ..., $n = 7$.

t_1, t_2, \dots, t_n частица находится в определенных точках m_1, m_2, \dots, m_n . Если повторить эксперимент, то обнаружится другая реализация (см., например, фиг. 4.4, б). Найдем вероятность нахождения частицы в моменты t_1, t_2, \dots в соответствующих точках m_1, m_2, \dots . Обозначим эту вероятность через

$$P_n(m_n, t_n; m_{n-1}, t_{n-1}; \dots; m_1, t_1). \quad (4.54)$$

Очевидно, что P_n является совместной вероятностью в смысле, указанном в разд. 2.6. Если известна совместная вероятность по отношению к n различным моментам времени, то легко найти другие распределения вероятностей, содержащие меньшее число аргументов m_j, t_j . Так, например, если требуется найти совместную вероятность лишь для моментов времени t_1, \dots, t_{n-1} , следует просуммировать (4.54) по m_n :

$$P_{n-1}(m_{n-1}, t_{n-1}; \dots; m_1, t_1) = \sum_{m_n} P_n. \quad (4.55)$$

Интерес представляет также вероятность того, что частица в момент t_n находится в положении m_n , а в момент t_1 — в положении m_1 вне зависимости от местонахождения частицы в

промежуточные моменты времени. Эта вероятность находится суммированием (4.54) по всем промежуточным положениям

$$P_2(m_n, t_n; m_1, t_1) = \sum_{m_2 m_3 \dots m_{n-1}} P_n(m_n t_n; m_{n-1}, t_{n-1}; \dots; m_1, t_1). \quad (4.56)$$

Рассмотрим теперь исход эксперимента (реализацию случайного процесса), в котором в моменты t_1, \dots, t_{n-1} частица обнаруживается в соответствующих точках m_1, \dots, m_{n-1} . Чему равна вероятность обнаружения ее в момент t_n в точке m_n ? Обозначим условную вероятность как

$$P(m_n, t_n | m_{n-1}, t_{n-1}; m_{n-2}, t_{n-2}; \dots; m_1, t_1). \quad (4.57)$$

В соответствии с рассмотрением в разд. 2.8 эта условная вероятность равна

$$P(m_n, t_n | m_{n-1}, t_{n-1}; m_{n-2}, t_{n-2}; \dots; m_1, t_1) = \frac{P_n(m_n, t_n; m_{n-1}, t_{n-1}; \dots; m_1, t_1)}{P_{n-1}(m_{n-1}, t_{n-1}; \dots; m_1, t_1)}. \quad (4.58)$$

До сих пор наше рассмотрение было применимо к любому процессу. Однако на частном примере (см. разд. 4.1 и 4.2) можно убедиться, что вероятность нахождения частицы в конечном положении m_n зависит только от распределения вероятностей в момент t_{n-1} и не зависит от более ранних моментов времени. Другими словами, частица забывает свое прошлое. В этом случае условная вероятность (4.57) зависит только от аргументов в моменты t_n и t_{n-1} , так что можно записать

$$P(m_n, t_n | m_{n-1}, t_{n-1}; \dots; m_1, t_1) = p_{t_n, t_{n-1}}(m_n, m_{n-1}). \quad (4.59)$$

Если условная вероятность определяется формулой (4.59), то соответствующий процесс называется *марковским процессом*. Теперь мы выведем несколько общих соотношений, справедливых для марковских процессов.

Правую часть (4.59) часто называют вероятностью перехода. Выразим теперь совместную вероятность (4.54) через вероятность перехода (4.59). Для этого сначала умножим (4.58) на P_{n-1} :

$$P_n = p_{t_n, t_{n-1}}(m_n, m_{n-1}) P_{n-1}. \quad (4.60)$$

Заменяя в этом уравнении n на $n-1$, находим

$$P_{n-1} = p_{t_{n-1}, t_{n-2}}(m_{n-1}, m_{n-2}) P_{n-2}. \quad (4.61)$$

Уменьшая индекс n снова и снова, окончательно получаем

$$P_2 = p_{t_2, t_1}(m_2, m_1) P_1 \quad (4.62)$$

и

$$P_1 \equiv P_1(m_1, t_1). \quad (4.63)$$

Последовательно меняя P_{n-1} на P_{n-2} , P_{n-2} на P_{n-3} и т. д., приходим к следующей формуле:

$$\begin{aligned} P_n(m_n, t_n; m_{n-1}, t_{n-1}; \dots; m_1, t_1) = \\ = p_{t_n, t_{n-1}}(m_n, m_{n-1}) p_{t_{n-1}, t_{n-2}}(m_{n-1}, m_{n-2}) \dots \\ \dots p_{t_2, t_1}(m_2, m_1) P_1(m_1, t_1). \end{aligned} \quad (4.64)$$

Таким образом, совместную вероятность марковского процесса можно получить простым перемножением вероятностей переходов. Так, например, вероятность нахождения частицы в точках m_j в последовательности моментов времени t_j можно найти, проследив траекторию частицы и используя отдельные вероятности переходов из одной точки в соседнюю точку.

Чтобы вывести уравнение Чепмена — Колмогорова, рассмотрим три произвольных момента времени, удовлетворяющих неравенству

$$t_1 < t_2 < t_3. \quad (4.65)$$

Запишем уравнение (4.56) для этого случая:

$$P_2(m_3, t_3; m_1, t_1) = \sum_{m_2} P_3(m_3, t_3; m_2, t_2; m_1, t_1). \quad (4.66)$$

Воспользуемся снова формулой (4.62), которая справедлива для любой последовательности моментов времени. В частности, для левой части (4.65) находим

$$p_{t_3, t_1}(m_3, m_1) P_1(m_1, t_1). \quad (4.67)$$

С помощью (4.64) запишем P_3 в правой части (4.66) в виде

$$\begin{aligned} P_3(m_3, t_3; m_2, t_2; m_1, t_1) = \\ = p_{t_3, t_2}(m_3, m_2) p_{t_2, t_1}(m_2, m_1) P_1(m_1, t_1). \end{aligned} \quad (4.68)$$

Подставляя (4.67) и (4.68) в (4.66), получаем равенство, в котором с обеих сторон фигурирует в качестве множителя $P_1(m_1, t_1)$. Так как начальное распределение можно выбрать произвольно, это соотношение должно быть справедливым и без множителя $P_1(m_1, t_1)$. В конечном результате получаем уравнение Чепмена — Колмогорова

$$p_{t_3, t_1}(m_3, m_1) = \sum_{m_2} p_{t_3, t_2}(m_3, m_2) p_{t_2, t_1}(m_2, m_1). \quad (4.69)$$

Заметим, что формула (4.69) не так проста, как это может показаться, поскольку она должна выполняться для любой последовательности моментов времени, заключенных между начальным и конечным моментами.

Формулу (4.69) можно обобщить в нескольких отношениях. Прежде всего m_1 можно заменить M -мерным вектором \mathbf{m}_1 . Далее, m_1 можно заменить непрерывной переменной \mathbf{q}_1 , так что P становится функцией распределения (плотностью вероятности). В качестве упражнений читателю предлагается показать, что в этом последнем случае (4.69) принимает вид

$$p_{t_3, t_1}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_1) = \int \dots \int p_{t_3, t_2}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2) p_{t_2, t_1}(\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1) d^M q_2. \quad (4.70)$$

Другую форму уравнения Чепмена — Колмогорова получим, если (4.69) умножим на $P(m_1, t_1)$ и просуммируем по m_1 . Используя соотношение

$$p_{t_3, t_1}(m_3, m_1) P_1(m_1, t_1) = P_2(m_3, t_3; m_1, t_1) \quad (4.71)$$

и соответствующим образом изменяя индексы, находим

$$P(m, t) = \sum_{m'} p_{t, t'}(m, m') P(m', t') \quad (4.72)$$

в дискретном случае и

$$P(\mathbf{q}, t) = \int \dots \int p_{t, t'}(\mathbf{q}, \mathbf{q}') P(\mathbf{q}', t') d^M q' \quad (4.73)$$

для непрерывных переменных (здесь и далее индекс 1 у P опущен).

Перейдем теперь к бесконечно малым временным интервалам, положив $t = t' + \tau$. Образует следующее выражение:

$$\frac{1}{\tau} \{P(m, t + \tau) - P(m, t)\}, \quad (4.74)$$

и устремим τ к нулю, или, другими словами, возьмем производную от (4.72) по времени t ; это дает

$$\dot{P}(m, t) = \sum_{m'} \dot{p}_t(m, m') P(m', t), \quad (4.75)$$

где

$$\dot{p}_t(m, m') = \lim_{\tau \rightarrow 0} \tau^{-1} (p_{t+\tau, t}(m, m') - p_{t, t}(m, m')).$$

Анализировать \dot{p}_t следует с некоторой осторожностью. Если $m' \neq m$, то \dot{p}_t есть не что иное, как число переходов из m' в m в секунду:

$$\dot{p}_t(m, m') = \omega(m, m'); \quad (4.76)$$

другими словами, ω — это вероятность перехода в секунду (или единицу времени). При совпадающих индексах $m = m'$, поскольку никаких переходов здесь не происходит, интерпретировать $\dot{p}_t(m, m)$ сложнее. Вернемся к определению p по формуле (4.59) и рассмотрим разность условных вероятностей

$$P(m, t + \tau | m, t) - P(m, t | m, t). \quad (4.77)$$

Эта разность представляет собой изменение вероятности нахождения частицы в точке m в более поздний момент времени $t + \tau$, если в момент t она была в той же самой точке. Это изменение вероятностей обусловлено всеми процессами, благодаря которым частица покидает исходную точку m . Следовательно, если разделить (4.77) на τ и устремить τ к нулю, то (4.77) представит собой сумму по всем скоростям переходов (4.76) из m во все другие состояния

$$\dot{p}_t(m, m) = - \sum_{m'} \omega(m', m). \quad (4.78)$$

Подставляя теперь (4.76) и (4.78) в (4.75), приходим к так называемому *кинетическому уравнению*

$$\dot{P}(m, t) = \sum_{m'} \omega(m, m') P(m', t) - P(m, t) \sum_{m'} \omega(m', m). \quad (4.79)$$

При переходе от (4.75) к этому уравнению мы провели определенное обобщение, заменив m вектором \mathbf{m} .

Пример совместной вероятности: интеграл по траектории как решение диффузионного уравнения

Наше довольно абстрактное рассмотрение совместного распределения для различных моментов времени можно проиллюстрировать примером, который уже несколько раз встречался в этой книге. Это пример случайного одномерного движения. Пусть пространственная координата q изменяется непрерывным образом. Соответствующее диффузионное уравнение (4.52) было приведено в разд. 4.2. Здесь мы запишем его в несколько измененной форме, обозначая функцию $f(q)$ из (4.52) через $p_{tt'}(q, q')$:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{D}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} \right) p_{tt'}(q, q') = 0, \quad t > t'. \quad (4.80)$$

Причина этого нового обозначения заключается в следующем: мы подчиняем решение (4.80) начальному условию

$$p_{tt'}(q, q') = \delta(q - q'), \quad t = t', \quad (4.81)$$

т. е. допускаем, что в момент t , равный начальному моменту t' , частица с определенностью находится в точке q' . Следовательно, $p_{tt'}(q, q')$ — это условная вероятность нахождения частицы в момент t в интервале $q \dots q + dq$ при условии, что в момент t' она была в точке q' , или, другими словами, $p_{tt'}(q, q')$ — вероятность перехода, введенная выше. Имея в виду дальнейшее рассмотрение, введем замены

$$q' \rightarrow q_j \quad (4.82)$$

и

$$q \rightarrow q_{j+1}, \quad (4.83)$$

где j — индекс, соответствующий временной последовательности t_j . К счастью, решения (4.80) и (4.81) уже известны в явном виде. Действительно, в разд. 4.1 была получена условная вероятность обнаружить частицу, совершающую случайное блуждание, в момент t в точке q при условии, что в начальный момент она находилась в точке $q' = 0$. Смещая систему координат: $q \rightarrow q - q' \equiv q_{j+1} - q_j$ и положив $t_{j+1} - t_j = \tau$, можно представить решение (4.29) в виде

$$p_{tt'}(q_{j+1}, q_j) = (2\pi D\tau)^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2D\tau}(q_{j+1} - q_j)^2\right\}. \quad (4.84)$$

Подставляя (4.84) в (4.80), легко убедиться в том, что (4.84) удовлетворяет этому уравнению. Заметим далее, что при $\tau \rightarrow 0$ правая часть (4.84) превращается в δ -функцию (см. фиг. 2.10). Теперь уже просто найти явное выражение для совместной вероятности (4.54). Для этого требуется лишь подставить (4.84) (с $j = 1, 2, \dots$) в общую формулу (4.64), что дает

$$P(q_n, t_n; q_{n-1}, t_{n-1}; \dots; q_1, t_1) = \\ = (2\pi D\tau)^{-(n-1)/2} \exp\left\{-\frac{1}{2D\tau} \sum_{j=1}^{n-1} (q_{j+1} - q_j)^2\right\} P(q_1, t_1). \quad (4.85)$$

Это выражение можно интерпретировать следующим образом: формула (4.85) описывает вероятность того, что частица движется вдоль траектории $q_1 q_2 q_3 \dots$. Перейдем теперь к шкале непрерывного времени, проведя замену

$$\tau \rightarrow dt \quad (4.86)$$

и

$$\frac{1}{\tau} (q_{j+1} - q_j) = \frac{dq}{dt}, \quad (4.87)$$

что позволяет записать экспоненциальную функцию (4.85) в виде

$$\exp\left\{-\frac{1}{2D} \int_{t_1}^{t_n} \left(\frac{dq}{dt}\right)^2 dt\right\}. \quad (4.88)$$

Выражение (4.88) вместе с нормировочным множителем представляет собой простейший вид распределения вероятностей для траекторий. Если нас интересует только вероятность в конце пути, в момент $t_n = t$, найти частицу в точке $q_n = q$ независимо от выбранной траектории, то следует провести интегрирование по всем промежуточным координатам q_{n-1}, \dots, q_1 [см. (4.56)]. Эта вероятность теперь задается формулой

$$P(q_n, t) = \lim_{\tau \rightarrow 0, n \rightarrow \infty} (2\pi D\tau)^{-(n-1)/2} \times \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_1 \dots dq_{n-1} \exp \left\{ -\frac{1}{2D\tau} \sum_{j=1}^{n-1} (q_{j+1} - q_j)^2 \right\} P(q_1, t_1); \quad (4.89)$$

она называется *интегралом по траектории*. В статистической физике интегралы по траекториям играют все большую и большую роль. Позже в этой книге мы еще возвратимся к ним.

Упражнение к разд. 4.3

Определите

$$P_3(m_3, t_3; m_2, t_2; m_1, t_1), \quad t_2 = t_1 + \tau, \quad t_3 = t_1 + 2\tau$$

для модели случайных блужданий, рассмотренной в разд. 4.1, при начальных условиях $P(m_1, t_1) = 1$, если $m_1 \equiv 0$, и $P(m_1, t_1) = 0$, если $m_1 \neq 0$.

4.4*. Как использовать совместные распределения вероятностей. Моменты. Характеристическая функция. Гауссовы процессы

В предыдущем разделе мы ознакомились с совместной вероятностью для процессов, зависящих от времени,

$$P(m_n, t_n; m_{n-1}, t_{n-1}; \dots; m_1, t_1), \quad (4.90)$$

где индекс n при P_n мы опустили. С помощью (4.90) можно определить моменты, обобщая концепции, введенные в разд. 2.7:

$$\langle m_n^{\nu_n} \dots m_1^{\nu_1} \rangle = \\ = \sum_{m_1 \dots m_n} m_n^{\nu_n} \dots m_1^{\nu_1} P(m_n, t_n; m_{n-1}, t_{n-1}; \dots; m_1, t_1). \quad (4.91)$$

В этом выражении некоторые из ν могут быть равны нулю. Особенно важен случай

$$\langle m_n^{\nu_n} \cdot m_1^{\nu_1} \rangle, \quad (4.92)$$

когда существует произведение лишь двух степеней m , взятых в различные моменты времени. Если в соответствии с определением (4.91) провести суммирование по всем остальным значениям m , то получим распределение вероятностей, которое зависит лишь от индексов l и n . Тогда (4.91) примет вид

$$\langle m_n^{\nu} m_l^{\nu'} \rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_n} m_n^{\nu} m_1^{\nu'} P(m_n, t_n; m_1, t_1). \quad (4.93)$$

Отметим другие формы записи. Так как индексы $j = 1, \dots, n$ соответствуют моментам времени, (4.22) можно записать как

$$\langle m^{\nu_n}(t_n) m^{\nu_1}(t_1) \rangle. \quad (4.94)$$

Это не следует понимать так, что m — заданная функция времени. Здесь t_n и t_1 следует интерпретировать как индексы. Если считать t_l непрерывной временной последовательностью, то можно опустить индексы j и в качестве индексов использовать t или t' , так что (4.94) запишется в виде

$$\langle m^{\nu}(t) m^{\nu'}(t') \rangle. \quad (4.95)$$

Совершенно аналогично эти рассуждения можно повторить для (4.93), так что в результате получим выражение

$$\langle m^{\nu}(t) m^{\nu'}(t') \rangle = \sum_{m(t), m(t')} m^{\nu}(t) m^{\nu'}(t') P(m(t), t; m(t'), t'). \quad (4.96)$$

Можно также вместо $m(t)$ писать m_t . Как уже отмечалось выше, m можно считать непрерывной переменной q ; тогда P становится плотностью вероятности. Если снова взять случай двух моментов времени, то (4.96) примет вид

$$\langle q_t^{\nu} q_{t'}^{\nu'} \rangle = \int \int q_t^{\nu} q_{t'}^{\nu'} P(q_{t'}, t' | q_t, t) P(q_t, t) dq_t dq_{t'}. \quad (4.97)$$

По аналогии с разд. 2.10 введем *характеристическую функцию* в форме

$$\left\langle \exp \left\{ i \sum_{l=1}^n u_l q_l \right\} \right\rangle = \Phi(u_n, t_n; u_{n-1}, t_{n-1}; \dots; u_1, t_1) \quad (4.98)$$

в случае дискретной временной последовательности и в форме

$$\left\langle \exp \left\{ i \int_{t_0}^t dt' u_t q_{t'} \right\} \right\rangle = \Phi(\{u_t\}) \quad (4.99)$$

в случае непрерывной временной последовательности. Взяв обычные или функциональные производные, можно легко получить *моменты* для одной величины

$$\frac{1}{i^{\nu}} \frac{\delta^{\nu}}{\delta u_{t_1}^{\nu}} \Phi(\{u_t\}) |_{u=0} = \langle q_{t_1}^{\nu} \rangle \quad (4.100)$$

и для величин, взятых в разные моменты времени,

$$(-i)^{v_1 + \dots + v_n} \frac{\delta^{v_1 + \dots + v_n}}{\delta u_{t_1}^{v_1} \delta u_{t_2}^{v_2} \dots \delta u_{t_n}^{v_n}} \Phi|_{u=0} = \langle q_{t_n}^{v_n} \dots q_{t_1}^{v_1} \rangle. \quad (4.101)$$

Определим далее *кумулянты*¹⁾:

$$\begin{aligned} \Phi(u_n, t_n; \dots, u_1, t_1) = \\ = \exp \left\{ \sum_{s=1}^{\infty} \frac{i^s}{s!} \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_s=1}^n k_s(t_{\alpha_1}, \dots, t_{\alpha_s}) u_{\alpha_1} \dots u_{\alpha_s} \right\}. \end{aligned} \quad (4.102)$$

Процесс называется *гауссовым*, если все кумулянты, кроме первых двух, обращаются в нуль, т. е. если выполняется условие

$$k_3 = k_4 = \dots = 0. \quad (4.103)$$

Таким образом, в случае гауссова процесса, характеристическую функцию можно записать в виде

$$\begin{aligned} \Phi(u_n, t_n; \dots; u_1, t_1) = \\ = \exp \left\{ i \sum_{\alpha=1}^n k_1(t_{\alpha}) u_{\alpha} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^n k_2(t_{\alpha}, t_{\beta}) u_{\alpha} u_{\beta} \right\}. \end{aligned} \quad (4.104)$$

В соответствии с (4.101) все моменты можно выразить через первые два кумулянта или, поскольку k_1 и k_2 можно выразить через первый и второй моменты, все высшие моменты можно выразить через первые два момента. Совместная вероятность и корреляционные функции дают возможность рассматривать корреляции, зависящие от времени. Рассмотрим корреляционную функцию

$$\langle q_t, q_{t'} \rangle, \quad t > t' \quad (4.105)$$

и предположим, что средние значения в два момента времени t и t' равны нулю

$$\langle q_t \rangle = 0, \quad \langle q_{t'} \rangle = 0. \quad (4.106)$$

Если между значениями q , взятыми в различные моменты времени, корреляции отсутствуют, совместную вероятность можно

¹⁾ Кумулянты — кумулянтная производящая функция — определяются соотношением $k(u) = \ln F(S)$, где $S = e^u$, так что для n -го кумулянта случайной величины

$$\Phi_n = \frac{d^n}{du^n} \left[\ln \sum_{x=0}^{\infty} p(x) e^{ux} \right]_{u=0} = \left[\frac{d^n k(u)}{du^n} \right]_{u=0}. \quad \text{— Прим. ред.}$$

представить как произведение вероятностей для двух моментов времени. В результате (4.105) обращается в нуль. С другой стороны, при наличии корреляционных эффектов совместную вероятность нельзя представить в виде произведений, и в общем случае корреляционная функция (4.105) отлична от нуля. В дальнейшем мы воспользуемся этим формализмом при исследовании скорости убывания флуктуаций или продолжительности состояния упорядоченного движения. Если средние значения q не равны нулю, то для проверки степени коррелированности (4.105) можно представить

$$\langle (q_t - \langle q_t \rangle)(q_{t'} - \langle q_{t'} \rangle) \rangle. \quad (4.107)$$

Упражнения к разд. 4.4

Вычислите следующие моменты (или корреляционные функции) для диффузионного процесса при начальных условиях

$$1) P(q, t=0) = \delta(q),$$

$$2) P(q, t=0) = (\beta/\pi)^{1/2} \exp(-\beta q^2),$$

$$\langle q(t) \rangle, \langle q^2(t) \rangle, \langle q(t)q(t') \rangle, \langle q^2(t)q^2(t') \rangle.$$

Указание:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} q^v e^{-\alpha q^2} dq = 0,$$

если v нечетно;

$$\sqrt{\alpha/\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} q^2 e^{-\alpha q^2} dq = \frac{1}{2\alpha},$$

$$\sqrt{\alpha/\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} q^4 e^{-\alpha q^2} dq = \frac{3}{4} \alpha^{-2}.$$

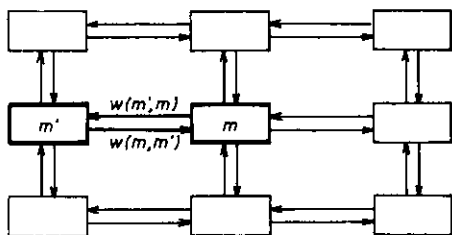
Используйте в $\langle \dots \rangle$ замену $q_t \rightarrow q_t + q_{t'}$.

4.5. Кинетическое уравнение

Этот раздел можно читать, не зная предыдущих. Читателю следует все же ознакомиться с примером из разд. 4.2. Кинетическое уравнение (типа Больцмана), которое будет получено в этой главе, — одно из важных средств нахождения распределения вероятностей процесса. В разд. 4.2 мы уже встречались с примером, когда частица испытывает случайные толчки впе-

ред или назад. Движение частицы описывалось стохастическим уравнением, определяющим изменение распределения вероятностей как функции времени. Рассмотрим теперь общий случай, когда система описывается дискретными величинами, которые в совокупности можно обозначить вектором m . Для наглядности можно представить себе частицу, движущуюся в трехмерной решетке.

Вероятность нахождения системы в момент t в точке m увеличивается благодаря переходам из других точек m' в рассматриваемую и уменьшается благодаря переходам из этой точки, т. е. в общем случае мы имеем соотношение



Фиг. 4.5. Пример структуры кинетического уравнения.

$$\dot{P}(m, t) = \text{«Скорость» прихода} - \text{«Скорость» ухода}. \quad (4.108)$$

Так как скорость прихода содержит все переходы из начальных точек m' в точку m , она составлена из суммы по всем исходным точкам. Каждый член суммы дается вероятностью обнаружить частицу в точке m' , умноженной на вероятность перехода из m' в m в единицу времени. Таким образом, мы получаем

$$\text{Скорость прихода} = \sum_{m'} w(m, m') P(m', t). \quad (4.109)$$

Аналогичным образом для переходов из данной точки находим

$$\text{Скорость ухода} = P(m, t) \sum_{m'} w(m', m). \quad (4.110)$$

Подставляя (4.109) и (4.110) в (4.108), получаем

$$\dot{P}(m, t) = \sum_{m'} w(m, m') P(m', t) - P(m, t) \sum_{m'} w(m', m). \quad (4.111)$$

Это уравнение называется *кинетическим уравнением* (фиг. 4.5). Основная трудность при выводе кинетического уравнения заключается не столько в получении выражений (4.109) и (4.110), которые довольно очевидны, сколько в нахождении в явном виде вероятностей переходов w . Их можно найти двумя способами. Можно записать выражения для w , используя разумные соображения, — так мы поступали в примере, рассмотренном в разд. 4.2. Другие важные примеры из химии и социологии будут

приведены в дальнейшем. Другой путь состоит в выводе ω из первых принципов. При этом в основном используются квантостатистические методы.

Упражнение к разд. 4.5

Почему для записи (4.109) и (4.110) процесс следует считать марковским?

4.6. Точное стационарное решение кинетического уравнения для систем с детальным равновесием

В этом разделе будет доказано следующее утверждение: если кинетическое уравнение имеет единственное стационарное решение ($\dot{P} = 0$) и удовлетворяет принципу детального равновесия, то в явном виде это решение можно получить простым суммированием или в случае непрерывных переменных путем интегрирования. *Принцип детального равновесия* требует, чтобы число переходов из состояния m в состояние n в единицу времени было равно числу обратных переходов из n в m . В математической форме это выражается так:

$$\omega(n, m) P(m) = \omega(m, n) P(n). \quad (4.112)$$

В физике для систем, находящихся в тепловом равновесии, принцип детального равновесия во многих случаях можно вывести, используя принцип микрообратимости. В физических системах, далеких от теплового равновесия, или в нефизических системах он справедлив только в специальных случаях (пример невыполнения принципа детального равновесия приведен в упр. 1 к разд. 4.6).

Формула (4.112) представляет собой систему однородных уравнений, которые могут быть решены лишь в случае, когда ω удовлетворяет определенным условиям. Эти условия можно получить, например, из соображений симметрии или для случая, когда ω может быть заменена дифференциальными операторами. Здесь мы не будем заниматься этими вопросами, покажем лишь, как (4.112) приводит к явному решению. Предположим, что $P(n) \neq 0$. Тогда (4.112) можно записать в виде

$$\frac{P(m)}{P(n)} = \frac{\omega(m, n)}{\omega(n, m)}. \quad (4.113)$$

Записывая $m = n_{j+1}$, $n = n_j$, мы переходим от n_0 к n_N по цепочке промежуточных состояний. Поскольку существует единственное решение, должна существовать по крайней мере одна

такая цепочка. Тогда находим

$$\frac{P(n_N)}{P(n_0)} = \prod_{j=0}^{N-1} \frac{\omega(n_{j+1}, n_j)}{\omega(n_j, n_{j+1})}. \quad (4.114)$$

Далее, положив

$$P(m) = \mathcal{N}^2 \exp(\Phi(m)), \quad (4.115)$$

где \mathcal{N}^2 — нормировочный множитель, (4.114) можно переписать в виде

$$\Phi(n_N) - \Phi(n_0) = \sum_{j=0}^{N-1} \ln \{ \omega(n_{j+1}, n_j) / \omega(n_j, n_{j+1}) \}. \quad (4.116)$$

Поскольку решение предполагается единственным, $\Phi(n_N)$ не зависит от выбранной траектории. Переходя к соответствующему пределу, формулу (4.116) можно применять к непрерывным переменным.

В качестве примера рассмотрим линейную цепочку с переходами между соседними узлами. Поскольку здесь выполняется принцип детального равновесия (см. упр. 2), можно воспользоваться формулой (4.114). Обозначая вероятности переходов

$$\omega(m, m-1) = \omega_+(m), \quad (4.117)$$

$$\omega(m, m+1) = \omega_-(m), \quad (4.118)$$

получаем

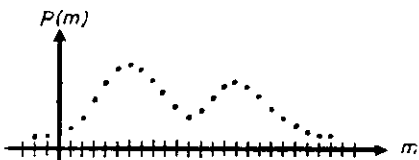
$$P(m) = P(0) \prod_{m'=0}^{m-1} \frac{\omega(m'+1, m')}{\omega(m', m'+1)} = P(0) \prod_{m'=0}^{m-1} \frac{\omega_+(m'+1)}{\omega_-(m')}. \quad (4.119)$$

Во многих практических приложениях ω_+ и ω_- — «гладкие» функции m , поскольку в интересующей нас области m в общем велико по сравнению с единицей. При этом график $P(m)$ представляет собой гладкую кривую с экстремумами (ср. фиг. 4.6). Определим условия появления экстремумов. Экстремум (или стационарное значение) возникает, когда

$$P(m_0) = P(m_0 + 1). \quad (4.120)$$

Поскольку $P(m_0 + 1)$ получается из $P(m_0)$ при умножении $P(m_0)$ на

$$\omega_+(m_0 + 1) / \omega_-(m_0),$$



Фиг. 4.6. Пример распределения $P(m)$ с максимумами и минимумами.

из (4.120) следует условие

$$\omega_+(m_0 + 1)/\omega_-(m_0) = 1. \quad (4.121)$$

$P(m_0)$ максимально, если

$$P(m) < P(m_0) \quad \left. \begin{array}{l} \text{для } m < m_0, \\ \text{для } m > m_0. \end{array} \right\} \quad (4.122)$$

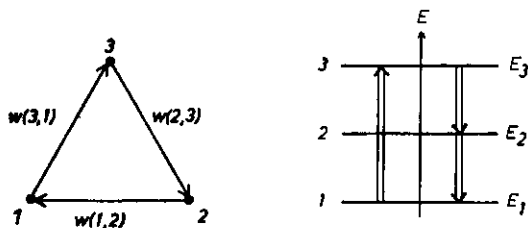
Эквивалентным образом $P(m_0)$ максимально в том и только в том случае, если

$$\begin{aligned} \frac{\omega_+(m+1)}{\omega_-(m)} &> 1 \quad \text{для } m < m_0, \\ \frac{\omega_+(m+1)}{\omega_-(m)} &< 1 \quad \text{для } m > m_0. \end{aligned} \quad (4.123)$$

В обоих случаях, (4.122) и (4.123), точки m принадлежат конечной окрестности точки m_0 .

Упражнения к разд. 4.6

1. Проверьте, действительно ли для процесса, изображенного на фиг. 4.7, принцип детального равновесия не выполняется.



Фиг. 4.7. Циклические переходы, нарушающие принцип детального равновесия, например, в трехуровневом атоме (справа) $1 \rightarrow 3$: накачка от внешнего источника; $3 \rightarrow 2$, $2 \rightarrow 1$: рекомбинация электрона.

2. Покажите, что для линейной цепочки с переходами между ближайшими соседними точками $m \rightarrow m \pm 1$ принцип детального равновесия справедлив.

3. Определите условие минимума $P(m_0)$.

4. Обобщите условие наличия экстремума на случай нескольких измерений, т. е. при $m \rightarrow \mathbf{m} = (m_1, m_2, \dots, m_N)$, когда переходы осуществляются между ближайшими соседями.

5. Определите экстремумы и найдите явный вид $P(m)$ в случае

$$\begin{aligned} \text{а) } \omega(m, m \pm 1) &= \omega, \\ \omega(m, m + n) &= 0, \quad n \neq \pm 1. \end{aligned}$$

Замечание. Нормализуйте P лишь в конечной области $-M \leq m \leq M$, а вне ее пределов положите $P(m) = 0$.

$$\text{б) } \omega(m, m + 1) = \frac{m+1}{N} \omega_0 \quad \text{при } 0 \leq m \leq N-1,$$

$$\omega(m, m-1) = \frac{N-m+1}{N} \omega_0 \quad \text{при } 1 \leq m \leq N.$$

$$\omega(m, m') = 0 \quad \text{в противном случае.}$$

$$\begin{aligned} \text{в) } \omega(m+1, m) &= \omega_+(m+1) = \alpha(m+2)m \geq 0, \\ \omega(m, m+1) &= \omega_-(m) = \beta(m+1)(m+2). \end{aligned}$$

Покажите, что $P(m)$ представляет собой распределение Пуассона

$$\pi_{k, \mu} (\equiv \alpha_k) \text{ [см. 2.57]} \quad \text{при } k \leftrightarrow \mu \text{ и } \mu \leftrightarrow \alpha/\beta.$$

Указание. Определите P_0 из условия нормировки

$$\sum_{m=0}^{\infty} P(m) = 1.$$

г) Начертите график $P(m)$ для случаев «а»—«в».

4.7*. Кинетическое уравнение для системы с детальным равновесием. Симметризация. Собственные значения и собственные состояния

Запишем кинетическое уравнение (4.111) в виде

$$\sum_n L_{mn} P(n) = \dot{P}(m), \quad (4.124)$$

где использовано обозначение

$$L_{m, n} = \omega(m, n) - \delta_{m, n} \sum_l \omega(l, n). \quad (4.125)$$

Кинетическое уравнение представляет собой систему линейных дифференциальных уравнений первого порядка. Чтобы свести это уравнение к обычному алгебраическому уравнению, положим

$$P(m) = e^{-\lambda t} \varphi_m, \quad (4.126)$$

где φ_m не зависит от времени. Подставив (4.126) в (4.124), получим

$$\sum_n L_{mn} \varphi_n^{(\alpha)} = -\lambda_n \varphi_m^{(\alpha)}. \quad (4.127)$$

Дополнительный индекс α возникает вследствие того, что эти алгебраические уравнения допускают набор собственных значений λ и собственных состояний φ_n , которые и обозначаются индексом α . Поскольку в общем случае матрица L_{mn} не симметрична, собственные векторы сопряженной задачи

$$\sum_m \chi_m^{(\alpha)} L_{mn} = -\lambda_\alpha \chi_n^{(\alpha)} \quad (4.128)$$

отличаются от собственных векторов (4.127). Однако в соответствии с хорошо известными результатами линейной алгебры φ и χ образуют биортонормированную систему, так что

$$(\chi^{(\alpha)}, \varphi^{(\beta)}) \equiv \sum_n \chi_n^{(\alpha)} \varphi_n^{(\beta)} = \delta_{\alpha, \beta}. \quad (4.129)$$

Левая часть (4.129) — это сокращенная форма записи суммы по n . Матрицу L_{mn} с помощью собственных векторов φ и χ можно записать в виде

$$L_{mn} = - \sum_\alpha \lambda_\alpha \varphi_m^{(\alpha)} \chi_n^{(\alpha)}. \quad (4.130)$$

Покажем теперь, что матрицу, фигурирующую в (4.127), можно симметризовать. Определим сначала симметризованную матрицу

$$L_{m, n}^s = \omega(m, n) P^{1/2}(n) / P^{1/2}(m) \quad (4.131)$$

для $m \neq n$. Для $m = n$ элементы матрицы совпадают с (4.125). $P(n)$ — стационарное решение кинетического уравнения. Предполагается, что условие детального равновесия выполняется, т. е.

$$\omega(m, n) P(n) = \omega(n, m) P(m). \quad (4.132)$$

Для доказательства симметричности матрицы L^s (4.131) поменяем в ней местами индексы n и m :

$$L_{n, m}^s = \omega(n, m) P^{1/2}(m) / P^{1/2}(n). \quad (4.133)$$

Используя (4.132), находим

$$(4.133) = \omega(m, n) \frac{P(n)}{P(m)} \cdot \frac{P^{1/2}(m)}{P^{1/2}(n)}, \quad (4.134)$$

что сразу же дает

$$L_{m, n}^s = L_{n, m}^s, \quad (4.135)$$

а значит, симметричность L доказана. Теперь покажем, к чему приводит такая симметризация в (4.127). Положим

$$\varphi_n^{(\alpha)} = P_n^{1/2} \tilde{\varphi}_n^{(\alpha)}; \quad (4.136)$$

тогда

$$\sum_n L_{mn} P_{(n)}^{1/2} \tilde{\varphi}_n^{(\alpha)} = -\lambda_\alpha P_{(m)}^{1/2} \tilde{\varphi}_m^{(\alpha)}. \quad (4.137)$$

Разделив это уравнение на $P_{(m)}^{1/2}$, найдем симметризованное уравнение

$$\sum_n L_{mn}^s \cdot \tilde{\varphi}_n^{(\alpha)} = -\lambda_\alpha \tilde{\varphi}_m^{(\alpha)}. \quad (4.138)$$

Преобразуем (4.128) аналогичным образом. Положим

$$\chi_n^{(\alpha)} = P_n^{-1/2} \tilde{\chi}_n^{(\alpha)}, \quad (4.139)$$

подставив (4.139) в (4.128). После умножения на $P^{1/2}(n)$ получаем

$$\sum_m \tilde{\chi}_m^{(\alpha)} L_{mn}^s = -\lambda_\alpha \tilde{\chi}_n^{(\alpha)}. \quad (4.140)$$

Коэффициенты $\tilde{\chi}$ теперь можно отождествить с $\tilde{\varphi}$, поскольку матрица L_{mn}^s симметрична. Это обстоятельство при учете (4.136) и (4.139) приводит к соотношению

$$\varphi_n^{(\alpha)} = P(n) \chi_n^{(\alpha)}. \quad (4.141)$$

Поскольку матрица L^s симметрична, собственные значения λ , как можно показать с помощью хорошо известной теоремы линейной алгебры, определяются из вариационного принципа. λ является экстремумом выражения

$$-\lambda = \text{Extr} \left\{ \frac{(\tilde{\chi} L^s \tilde{\chi})}{(\tilde{\chi} \tilde{\chi})} \right\} = \text{Extr} \left\{ \frac{(\chi L \varphi)}{(\chi \varphi)} \right\}. \quad (4.142)$$

$\tilde{\chi}_n$ следует выбирать так, чтобы они были ортогональны всем низшим собственным функциям. Кроме того, если выбрать $\chi_n^{(0)} = 1$, то благодаря свойству

$$\sum_m L_{m,n} = 0 \quad (4.143)$$

сразу получим, что со стационарным решением связано собственное значение $\lambda = 0$. Покажем теперь, что все собственные значения λ неотрицательны. Для этого числитель в (4.142), равный

$$\sum_{m,n} \chi_m L_{m,n} P(n) \chi_n \quad (4.144)$$

[ср. (4.139), (4.141) и (4.131)], представим в виде, из которого следует, что это выражение неположительно. Умножив $\omega(m, n) P(n) \geq 0$ на $-1/2(\chi_m - \chi_n)^2 \leq 0$, получим

$$-\sum_{m,n} \frac{1}{2} (\chi_m - \chi_n)^2 \omega(m, n) P(n) \leq 0. \quad (4.145)$$

Раскрывая скобки, приходим к выражению

$$-\frac{1}{2} \sum_{m, n} \chi_m^2 \omega(m, n) P(n) - \frac{1}{2} \sum_{m, n} \chi_n^2 \omega(m, n) P(n) +$$

(1)

(2)

$$+ \sum_{m, n} \chi_m \chi_n \omega(m, n) P(n). \quad (4.146)$$

(3)

Если во второй сумме мы поменяем местами индексы m, n и воспользуемся условием детального равновесия (4.132), то увидим, что вторая сумма равна первой сумме, так что (4.146) согласуется с (4.144). Таким образом, вариационный принцип (4.142) можно написать в виде

$$\lambda = \text{Extr} \left\{ \frac{\frac{1}{2} \sum_{m, n} (\chi_m - \chi_n)^2 \omega(m, n) P(n)}{\sum_n \chi_n^2 P(n)} \right\} \geq 0, \quad (4.147)$$

откуда с очевидностью следует, что λ неотрицательна. Кроме того, очевидно, что если выбрать $\chi = \text{const}$, то собственное значение $\lambda = 0$.

4.8*. Метод Кирхгофа решения кинетического уравнения

Рассмотрим сначала пример, для которого принцип детального равновесия не выполняется. Пусть система имеет три состояния 1, 2, 3, причем отличны от нуля лишь вероятности переходов $\omega(1, 2)$, $\omega(2, 3)$ и $\omega(3, 1)$ (такой системой является, например, трехуровневый атом, возбуждаемый накачкой с первого на третий уровень, с которого он переходит на второй уровень, а затем на первый; см. фиг. 4.7). Из физических соображений очевидно, что $P(1)$ и $P(2)$ не равны нулю, но благодаря условию $\omega(2, 1) = 0$ равенство

$$\omega(2, 1) P(1) = \omega(1, 2) P(2), \quad (4.148)$$

требуемое принципом детального равновесия, не может быть выполнено. Поэтому для решения кинетического уравнения следует использовать другие методы. Мы ограничимся рассмотрением стационарного случая, когда кинетическое уравнение (4.111) сводится к линейному алгебраическому уравнению. Один метод решения следует из линейной алгебры. Однако он приводит к довольно утомительной процедуре, которая не использует свойств, характерных для специальной формы кинетического

уравнения. Вместо этого мы рассмотрим более элегантный метод, развитый Кирхгофом первоначально для электрических цепей. Для нахождения стационарного решения $P(n)$ кинетического уравнения¹⁾

$$\sum_{n=1}^N \omega(m, n) P(n) - P(m) \sum_{n=1}^N \omega(n, m) = 0, \quad (4.149)$$

удовлетворяющего условию нормировки

$$\sum_{n=1}^N P(n) = 1, \quad (4.150)$$

нам понадобятся начальные сведения из теории графов.

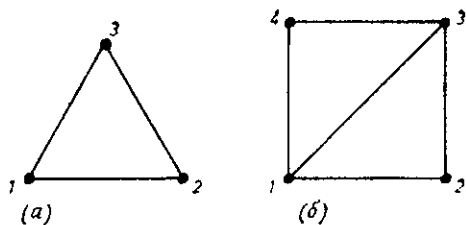
Определим граф (или, другими словами, геометрическую фигуру), соответствующий (4.149). Этот граф G содержит все те вершины и ребра, которые соответствуют $\omega(m, n) \neq 0$. Примеры графов с тремя или четырьмя вершинами и ребрами представлены на фиг. 4.8. Для нахождения решения мы должны рассмотреть определенные части графа G , которые остаются от него после удаления определенных ребер. Такой подграф, называемый максимальным деревом $T(G)$, определяется следующим образом:

- 1) $T(G)$ покрывает граф так, что
 - а) все ребра $T(G)$ являются ребрами G ,
 - б) $T(G)$ содержит все вершины G ;
- 2) $T(G)$ связный;
- 3) $T(G)$ не содержит циклов (циклической последовательности ребер).

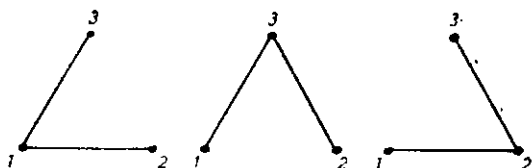
Это определение, кажущееся довольно абстрактным, лучше всего понять на примерах. Из сравнения фиг. 4.9 и 4.10 становится ясным, что для получения $T(G)$ следует опустить определенное минимальное число ребер графа G . Например, чтобы получить максимальные деревья, соответствующие графу фиг. 4.8, б, на нем следует убрать либо одну сторону и диагональ, либо две стороны.

Определим теперь направленное максимальное дерево с индексом n , а именно $T_n(G)$. Оно получается из $T(G)$, если все ребра $T(G)$ направить к вершине с индексом n . Направленные максимальные деревья с вершиной $n=1$ (фиг. 4.9) показаны на фиг. 4.11. Теперь после предварительных сведений можно дать рецепт конструирования стационарного решения $P(n)$. Сначала каждому направленному максимальному дереву нуж-

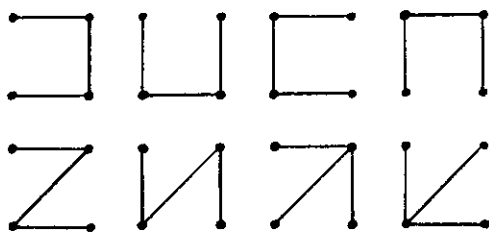
¹⁾ Если используется обозначение n вместо векторного обозначения, это не является ограничением, поскольку какой-либо дискретный набор всегда можно представить в виде некоторой последовательности отдельных чисел.



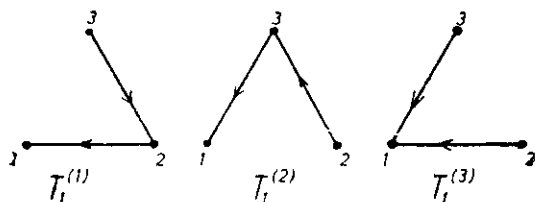
Фиг. 4.8. Примеры графов с 3 или 4 вершинами.



Фиг. 4.9. Максимальные деревья $T(G)$, соответствующие графу G фиг. 4.8, а.



Фиг. 4.10. Максимальные деревья $T(G)$, соответствующие графу G фиг. 4.8, б.



Фиг. 4.11. Направленные максимальные деревья T_l , соответствующие фиг. 4.9 и $l=1$.

но приписать численное значение; обозначим его через A . $A(T_n(G))$ равно произведению всех вероятностей перехода $w(n, m)$, для которых соответствующие ребра дерева $T_n(G)$ направлены к вершине n . В примере, показанном на фиг. 4.11, мы получаем следующие различные направленные максимальные деревья:

$$T_1^{(1)}: w(1, 2) w(2, 3) = A(T_1^{(1)}), \quad (4.151)$$

$$T_1^{(2)}: w(1, 3) w(3, 2) = A(T_1^{(2)}), \quad (4.152)$$

$$T_1^{(3)}: w(1, 2) w(1, 3) = A(T_1^{(3)}). \quad (4.153)$$

(Аргументы удобнее читать справа налево.) Отметим, что в нашем примере на фиг. 4.11 $w(3, 2) = w(1, 3) = 0$. Делаем следующий шаг. Определим S_n как сумму всех максимальных направленных деревьев с одним и тем же индексом n , т. е.

$$S_n = \sum_{\text{по всем } T_n(G)} A(T_n(G)). \quad (4.154)$$

Для треугольника, например:

$$\begin{aligned} S_1 &= w(1, 2) w(2, 3) + w(1, 3) w(3, 2) + w(1, 2) w(1, 3) = \\ &= w(1, 2) w(2, 3) \text{ (поскольку } w(3, 2) = w(1, 3) = 0). \end{aligned} \quad (4.155)$$

В результате формула Кирхгофа для распределения вероятностей P_n принимает вид

$$P_n = \frac{S_n}{\sum_{i=1}^N S_i}. \quad (4.156)$$

И для системы с тремя состояниями, о которой шла речь в начале раздела, используя (4.151) и др. формулы, получаем

$$P_1 = \frac{w(1, 2) w(2, 3)}{w(1, 2) w(2, 3) + w(2, 3) w(3, 1) + w(3, 1) w(1, 2)}. \quad (4.157)$$

Хотя при большем числе вершин эта процедура и становится довольно утомительной, все же во многих практических случаях она дает возможность глубоко проанализировать вид решения. Кроме того, она позволяет разложить задачу на составные части, например, для случая, когда уравнение содержит какие-либо замкнутые циклы, связанные друг с другом только одной линией.

Упражнение к разд. 4.8

Рассмотрите цепочку, в которой перескоки частиц могут происходить лишь между ближайшими соседними узлами. Покажите, что в этом случае при наличии детального равновесия формула Кирхгофа приводит точно к формуле (4.119).

4.9*. Теоремы о решениях кинетического уравнения

Приведем несколько теорем, важных для применений кинетического уравнения. Мы опускаем чисто математические доказательства, которые не дают более глубокого понимания сущности процессов. Предположим, что ω не зависят от времени.

1. Всегда существует по крайней мере одно стационарное решение $P(m)$, $P(m) = 0$.

2. Это стационарное решение единственное при условии, что граф G , соответствующий кинетическому уравнению, связный [т. е. любые две пары точек m, n могут быть соединены по крайней мере одной последовательностью линий (проходящих через другие точки)].

3. Если в начальный момент $t = 0$ для всех m

$$0 \leq P(m, 0) \leq 1 \quad (4.158)$$

и

$$\sum_m P(m, 0) = 1, \quad (4.159)$$

то для всех последующих моментов времени

$$0 \leq P(m, t) \leq 1 \quad (4.160)$$

и

$$\sum_m P(m, t) = 1. \quad (4.161)$$

Таким образом, для всех моментов времени гарантируются свойства нормированности и *положительности* распределения вероятностей.

4. Подстановка $P(m, t) = a_m \exp(-\lambda t)$ в кинетическое уравнение приводит к системе линейных алгебраических уравнений для a_m с собственными значениями λ . Эти собственные значения λ обладают следующими свойствами:

а) действительная часть λ неотрицательна: $\operatorname{Re} \lambda \geq 0$,

б) если справедлив принцип детального равновесия, то все λ действительны.

5. Если стационарное решение единственное, то зависящее от времени решение $P(m, t)$ стремится к стационарному решению при $t \rightarrow \infty$ при любом начальном условии $P_m^{(0)} (P(m, 0)) = P_m^{(0)}$. Для доказательства с использованием прироста информации ср. упр. 1 к разд. 5.3.

4.10. Смысл случайных процессов. Стационарное состояние флуктуации, время возвращения

В предыдущих разделах мы изучали процессы, вызываемые случайными силами. В этом разделе мы обсудим некоторые общие аспекты случайных процессов в основном на примере конкретной модели. Рассмотрим, что происходит, когда соединяются два сосуда, наполненные газом. Атомы газа из одного сосуда диффундируют в другой сосуд и наоборот. Переходы можно рассматривать как совершенно случайные, поскольку они происходят под действием многих толчков, испытываемых атомами газа. Другой пример — химические процессы, где реакция происходит в том случае, если сталкиваются две соответствующие молекулы, что является случайным событием. Следовательно, не удивительно, что с такими случайными процессами встречаются в различных дисциплинах, и для понимания явлений упорядочения важно их знать.

Для пояснения основных идей рассмотрим очень простую модель — так называемую урновую модель Эренфестов. Эта модель первоначально была введена при обсуждении смысла так называемой H -теоремы в термодинамике (см. упр. 1 и 2 к разд. 5.3). Здесь, однако, мы рассмотрим эту модель для иллюстрации некоторых типичных свойств, присущих случайным процессам и процессам установления равновесия. Рассмотрим два ящика (урны) A, B , наполненные N шарами. Шары занумеруем индексами $1, 2, \dots, N$. Пусть в начальный момент распределение шаров таково, что в ящике A находится N_1 шаров, а в ящике B — N_2 шаров. Предположим теперь, что существует устройство, которое случайным образом с одной и той же вероятностью $1/N$ выбирает одно из чисел $1, \dots, N$ и регулярно повторяет этот процесс выборки через интервал времени τ . Когда некоторое число выбрано, соответствующий шар вынимают из ящика, где он находился, и перекалывают в другой ящик. Нас собственно интересует изменение чисел N_1 и N_2 со временем. Поскольку N_2 равно $N - N_1$, то можно рассматривать единственную переменную N_1 . Вероятность найти N_1 шаров после s шагов в момент времени t ($t = s\tau$) обозначим через $P(N_1, s)$.

Сначала выведем уравнение, которое описывает изменение со временем распределения вероятностей, а затем обсудим некоторые важные свойства. Распределение вероятностей P изменяется из-за того, что один шар либо поступает в ящик A , либо удаляется из него. Таким образом, полная вероятность $P(N_1, s)$ есть сумма вероятностей, соответствующих этим двум событиям. В первом случае (добавление шара в ящик A) мы

должны исходить из ситуации, когда в A находилось $N_1 - 1$ шаров. Обозначим через $w(N_1, N_1 - 1)$ вероятность того, что один шар добавляется. Если шар удаляется, то в исходном положении в «момент» $s - 1$ в A содержится $N_1 + 1$ шаров. Обозначим вероятность перехода, соответствующую удалению шара, через $w(N_1, N_1 + 1)$. Таким образом, находим

$$P(N_1, s) = w(N_1, N_1 - 1)P(N_1 - 1, s - 1) + w(N_1, N_1 + 1)P(N_1 + 1, s - 1). \quad (4.162)$$

Поскольку вероятность выбора определенного числа равна $1/N$, а в урне B находится $N_2 + 1 = N - N_1 + 1$ шаров, вероятность перехода $w(N_1, N_1 - 1)$ дается формулой

$$w(N_1, N_1 - 1) = \frac{N_2 + 1}{N} = \frac{N - N_1 + 1}{N}. \quad (4.163)$$

Соответствующая вероятность перехода с удалением шара из урны A равна

$$w(N_1, N_1 + 1) = \frac{N_1 + 1}{N}. \quad (4.164)$$

В результате (4.162) приобретает вид

$$P(N_1, s) = \frac{N - N_1 + 1}{N} P(N_1 - 1, s - 1) + \frac{N_1 + 1}{N} P(N_1 + 1, s - 1). \quad (4.165)$$

Если распределение шагов по урнам задано в начальный момент, то можно спросить, каково будет конечное распределение. В соответствии с рассмотрением разд. 4.9 существует только одно конечное стационарное решение, и к нему стремится любое начальное распределение. Это решение имеет вид

$$\lim_{s \rightarrow \infty} P(N_1, s) = P(N_1) = \frac{N!}{N_1!(N - N_1)!} \alpha = \frac{N!}{N_1! N_2!} \alpha, \quad (4.166)$$

где нормировочный множитель α определяется из условия

$$\sum_{N_1} P(N_1, s) = 1 \quad (4.167)$$

и равен

$$\alpha = 2^{-N}. \quad (4.168)$$

В качестве упражнения читателю предлагается проверить правильность решения в виде (4.166), подставляя его в (4.165). (Отметим, что P более не зависит от s .) С такой функцией распределения мы уже встречались раньше, рассматривая другую задачу. Именно, в разд. 3.1 мы определяли число конфигу-

раций, в которые может реализоваться макросостояние с N_1 шарами в A и N_2 шарами в B при различных микросостояниях, в которых отличаются индексы шаров, но общее число шаров N_1 и N_2 остается постоянным. Эта модель позволяет сделать ряд очень важных и довольно общих выводов.

Прежде всего следует проводить различие между одной системой и ансамблем систем. Когда мы следим за одной системой во времени, то находим, что число N_1 (которое как раз является случайной переменной) приобретает определенные значения

$$N_1^{(1)}(s=1), N_1^{(2)}(s=2), \dots, N_1^{(s)}, \dots \quad (4.169)$$

Таким образом, на языке теории вероятностей одно событие состоит из последовательности (4.169). Как только эта последовательность выбрана, элемент случайности исчезает. С другой стороны, когда говорят о вероятности, то рассматривают совокупность событий — выборку (выборочное пространство). В термодинамике эта совокупность называется «ансамблем» (он может изменяться со временем). Каждая индивидуальная система соответствует определенной точке выборки.

В термодинамике, а также в других дисциплинах рассматривается следующий вопрос: если система участвует в случайном процессе в течение долгого времени, то совпадает ли среднее по времени со средним по ансамблю? В нашей книге, если другое не оговорено, рассматривается усреднение по ансамблю. Среднее по ансамблю определяем как среднее значение любой функции от случайных переменных, вычисляемое с помощью совместной вероятности (определенной в разд. 4.3).

При дальнейшем чтении читатель должен четко различать случаи рассмотрения одной системы и целого ансамбля. Принимая это во внимание, обсудим некоторые наиболее важные выводы: функция, соответствующая стационарному решению, вовсе не является δ -функцией, т. е. мы не находим с вероятностью единица $N/2$ шаров в ящике A и $N/2$ шаров в ящике B ; благодаря процессу отбора всегда имеется определенная возможность нахождения другого числа $N_1 \neq N/2$ в ящике A . Таким образом, имеют место флуктуации. Более того, если первоначально в ящике содержалось некоторое заданное число N_1 шаров, то можно показать, что по истечении определенного времени система может возвратиться к этому числу. Действительно, для каждого индивидуального процесса, скажем $N_1 \rightarrow N_1 + 1$, существует конечная вероятность того, что происходит обратный процесс $N_1 \rightarrow N_1 - 1$. (Эту задачу, очевидно, можно сформулировать математически в более строгом виде, но здесь нас интересует другое.) Таким образом, полная система не приближается к единственному равновесному состоянию $N_1 = N/2$

Это, как нам кажется, находится в поразительном противоречии с тем, что можно было бы ожидать исходя из термодинамики, и в этом заключается трудность, которая долго занимала физиков. Однако эти выводы не так уж трудно привести в соответствие с выводами термодинамики относительно приближения к равновесию. Рассмотрим случай, когда N — очень большое число; это — типичное допущение, принимаемое в термодинамике (допускают даже, что $N \rightarrow \infty$). Рассмотрим сначала стационарную функцию распределения. Если N очень велико, то легко убедиться в том, что эта функция размазана в очень узкой области вблизи $N_1 = N/2$. Или, другими словами, функция распределения по существу становится δ -функцией. Это обстоятельство проливает новый свет на смысл энтропии. Поскольку состояние N_1 реализуется $N!/N_1!N_2!$ способами, энтропия равна

$$S = k_B \ln \frac{N!}{N_1! N_2!}, \quad (4.170)$$

или

$$S = k_B (-N_1 \ln N_1 - N_2 \ln N_2 + N \ln N). \quad (4.171)$$

Разделив выражение на N (т. е. в расчете на один шар), получаем

$$S/N = -k_B (p_1 \ln p_1 + p_2 \ln p_2), \quad (4.172)$$

где

$$p_i = N_i/N. \quad (4.173)$$

Поскольку распределение вероятностей $P(N_1)$ — очень острая функция (во всех практических случаях $N_1 = N/2$), при выборе функции распределения можно ожидать, что энтропия принимает максимальное значение, когда $p_1 = p_2 = 1/2$. С другой стороны, можно построить другие начальные состояния, для которых N_1 равно данному числу $N_0 \neq N/2$. Если N_0 задано, то наше знание начального состояния максимальное. С течением времени P эволюционирует к новому распределению и весь процесс носит характер *необратимого процесса*. Для иллюстрации этого замечания рассмотрим эволюцию такого начального распределения, при котором все шары находятся в одном ящике. Вероятность того, что один шар удаляется, равна единице. Эта вероятность все еще будет близка к единице и после того, как вынута малое число шаров. Таким образом, система очень быстро удаляется от своего первоначального состояния. С другой стороны, если оба ящика одинаково заполнены, вероятность перехода шара из ящика A в ящик B становится приблизительно равной вероятности обратного перехода. Но вероятности переходов ни в коем случае не обращаются в нуль, т. е. по-прежнему имеют место флуктуации чисел ча-

стиц в каждом ящике. Если ждать очень долгое время t_r , то вероятность возвращения системы к своему начальному состоянию будет конечной. Это время возвращения t_r оказывается равным

$$t_r \sim \tau/P(N_1), \quad (4.174)$$

где t_r определяется как среднее время между появлением двух идентичных макросостояний.

В заключение можно сделать следующее утверждение: даже если N велико, N_1 не фиксировано и может флуктуировать. Правда, большие отклонения от $N_1 = N/2$ редки. Наиболее вероятно состояние $N_1 = N/2$. Если информация о состоянии системы отсутствует, или, другими словами, систему не готовят специально, мы должны допускать, что система находится в стационарном состоянии. По соображениям, приведенным выше, противоречие между необратимым процессом, идущим только в одном направлении (к «равновесному состоянию»), и флуктуациями, которые могут вернуть отдельную систему даже к исходному состоянию, устраняется. Могут иметь место оба процесса, и какой из них происходит на самом деле, зависит от вероятности, определяемой тем, как приготовлено начальное состояние. Та важная роль, которую флуктуации играют в системах различных типов, станет ясной в последующих главах.

Упражнения к разд. 4.10

1. Почему $\sigma^2 = \langle N_1^2 \rangle - \langle N_1 \rangle^2$ есть мера флуктуации N_1 ? Какова величина σ^2 ?
2. Рассмотрите броуновское движение в терминах одной системы и ансамбля систем.

4.11*. Кинетическое уравнение и ограниченность термодинамики необратимых процессов

Предположим, что система, составленная из подсистем, описывается кинетическим уравнением. Мы хотим показать, что подход, используемый термодинамикой необратимых процессов (см. разд. 3.5), содержит в себе весьма ограничительное допущение. Суть дела можно продемонстрировать уже на примере двух подсистем. Не обязательно, чтобы эти подсистемы были разнесены в пространстве (например, в лазере двумя подсистемами являются атомы и световое поле). В соответствии с введенными ранее обозначениями возьмем для одной подсистемы

индекс i , а для другой — индекс i' . Тогда распределение вероятностей будет с индексами ii' . Соответствующее кинетическое уравнение (4.111) для $P_{ij} \equiv P(j, i', t)$, ($j, i' \leftrightarrow m$) имеет вид

$$\dot{P}_{ij} = \sum_{j'} \omega_{ij'; j} P_{j'j} - P_{ij} \sum_{j'} \omega_{j'i'; i}. \quad (4.175)$$

Подобные индексы уже встречались в разд. 3.3 и 3.4. В частности, мы видели (разд. 3.5), что энтропия S выражается через распределение вероятностей p_i , в то время как энтропия системы S' определяется другим распределением вероятностей p'_i . Кроме того, предполагалось, что энтропии аддитивны. Аддитивность означает, что P_{ij} факторизуется (см. упр. 1 к разд. 3.5):

$$P_{ij} = p_i p'_i. \quad (4.176)$$

Подстановка (4.176) в (4.175) показывает, что решение (4.175) имеет вид (4.176) лишь при весьма специальном условии, а именно:

$$\omega_{ij'; j} = \delta_{i'j'} \omega_{ij}^{(1)} + \delta_{ij'} \omega_{i'j'}^{(2)}. \quad (4.177)$$

Формула (4.177) означает, что эти две подсистемы не взаимодействуют. Условие (4.177) относительно вида решения (4.175) можно понимать лишь в смысле аппроксимации, подобной аппроксимации Хартри — Фока в квантовой теории (ср. упражнение к разд. 4.11). Наш пример показывает, что термодинамика необратимых процессов справедлива лишь в случае, когда корреляции между двумя подсистемами несущественны и могут быть учтены на макроскопическом уровне в приближении самосогласованного поля.

Упражнение к разд. 4.11

Сформулируйте вариационный принцип и выведите уравнения для p_i , p'_i в случае, когда кинетическое уравнение подчиняется принципу детального равновесия.

Указание. Принимая гипотезу (4.176), преобразуйте оператор кинетического уравнения к самосогласованному виду (в соответствии с разд. 4.7) и проварьируйте получаемое для рассматриваемого случая выражение (4.142) по отношению к $p_i p'_i = \tilde{\chi}_{ij}$. Те, кто знаком с процедурой Хартри — Фока, могут убедиться в том, что данная процедура идентична методу самосогласованного поля Хартри — Фока в квантовой механике.

Необходимость

СТАРЫЕ СТРУКТУРЫ УСТУПАЮТ МЕСТО НОВЫМ

В этой главе рассматриваются полностью детерминированные процессы, в которых центральную роль играет вопрос об устойчивости движения. При изменении определенных параметров устойчивое движение может стать неустойчивым, и появляются совершенно новые типы движения (или структуры). Хотя многие концепции заимствованы из механики, они применимы и ко многим другим дисциплинам.

5.1. Динамические процессы

а) Пример: передемпфированный ангармонический осциллятор

Практически во всех дисциплинах, где возможно количественное рассмотрение, имеют дело с изменением определенных величин в зависимости от времени. Эти изменения возникают вследствие определенных причин. Для описания подобных процессов используются понятия, возникшие большей частью из механики. Рассмотрим в качестве примера ускорение частицы с массой m под действием силы F . Скорость v частицы изменяется со временем в соответствии с уравнением Ньютона

$$m \frac{dv}{dt} = F_0. \quad (5.1)$$

Предположим далее, что силу F_0 можно представить в виде суммы «движущей силы» F и силы трения, которая по предположению пропорциональна скорости v :

$$F_0 = F - \gamma v. \quad (5.2)$$

Соответствующее уравнение движения имеет вид

$$m \frac{dv}{dt} + \gamma v = F. \quad (5.3)$$

Во многих практических случаях F является функцией координаты частицы q . В случае гармонического осциллятора

(фиг. 5.1) F пропорциональна смещению q от положения равновесия. Обозначая постоянную Гука через k , имеем (ср. фиг. 5.1, б)

$$F(q) = -kq. \quad (5.4)$$

Знак минус отражает то, что упругая сила стремится возвратить частицу в положение равновесия. Выразим скорость через производную от координаты по времени, которую будем обозначать точкой над q ,

$$v = \frac{dq}{dt} \equiv \dot{q}. \quad (5.5)$$

С учетом (5.2) и (5.5) формула (5.1) приводится к виду

$$m\ddot{q} + \gamma\dot{q} = F(q). \quad (5.6)$$

На основе этого уравнения будет сделано несколько важных общих выводов, справедливых для других систем и объясняющих используемую терминологию. В основном мы сосредоточим внимание на частном случае, когда t очень мало, а постоянная затухания γ очень велика, так что в левой части (5.6) можно пренебречь первым членом по сравнению со вторым.

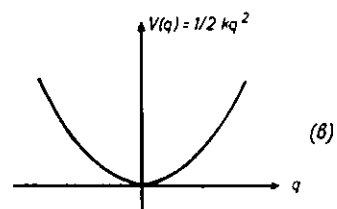
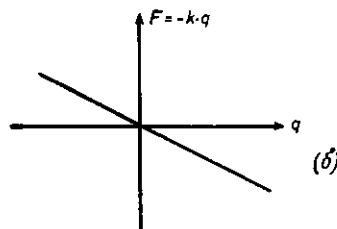
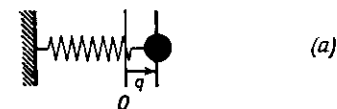
Другими словами, мы рассмотрим случай так называемого передемпфированного движения. Заметим далее, что с помощью соответствующего изменения масштаба времени

$$t = \gamma t' \quad (5.7)$$

можно избавиться от постоянной γ . Тогда уравнение (5.6) принимает вид

$$\dot{q} = F(q). \quad (5.8)$$

Уравнения такого вида встречаются во многих дисциплинах. Приведем несколько примеров: в химии q может обозначать плотность числа молекул определенного типа Q , которые возникают в результате химической реакции с участием молекул



Фиг. 5.1. Гармонический осциллятор. a — осциллятор состоит из пружины и точечной массы m . Точка «0» соответствует равновесному положению; b — сила как функция растяжения q ; c — потенциал [см. (5.14) и (5.15)].

двух других типов A и B с концентрациями соответственно a и b . Скорость образования молекул с плотностью q дается формулой

$$\dot{q} = kab, \quad (5.9)$$

где k — константы скорости реакции. Позже мы встретимся еще с одним важным классом химических реакций. Это так называемые автокаталитические реакции, в которых один из реагентов, например B , идентичен Q , так что (5.9) приобретает вид

$$\dot{q} = kaq. \quad (5.10)$$

Уравнения типа (5.10) встречаются и в биологии, где они описывают размножение клеток бактерий, или в экологии, где q обозначает число животных данного вида. Мы возвратимся к подобным примерам в разд. 5.4 и позже, в гл. 8—11, где рассмотрение проводится в гораздо более общем виде. Здесь же мы рассмотрим пример из механики. Введем понятие «работы», которая определяется как сила, умноженная на расстояние. Рассмотрим, например, тело весом G (вес определяется гравитационной силой, действующей на тело со стороны Земли). Таким образом, G можно отождествить с силой F . Если поднять тело на высоту h (\equiv расстояние q), то будет «произведена работа»

$$W = G \cdot h = F \cdot q. \quad (5.11)$$

В общем случае F зависит от координаты q . Тогда (5.11) справедливо лишь для бесконечно малого смещения dq , и вместо (5.11) следует писать

$$dW = F(q) dq. \quad (5.12)$$

Чтобы найти работу, когда смещение конечное, нужно провести суммирование или интегрирование:

$$W = \int_{q_0}^{q_1} F(q) dq. \quad (5.13)$$

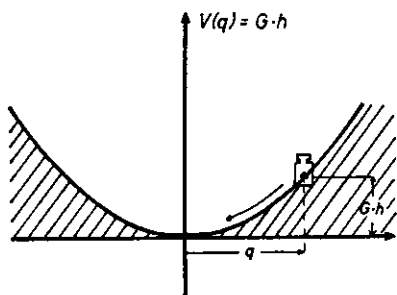
Работа W , взятая со знаком минус, называется потенциалом V . Используя (5.12), находим

$$F(q) = -\frac{dV}{dq}. \quad (5.14)$$

Рассмотрим пример гармонического осциллятора с силой F , задаваемой (5.4). Легко определить, что при этом потенциал имеет вид

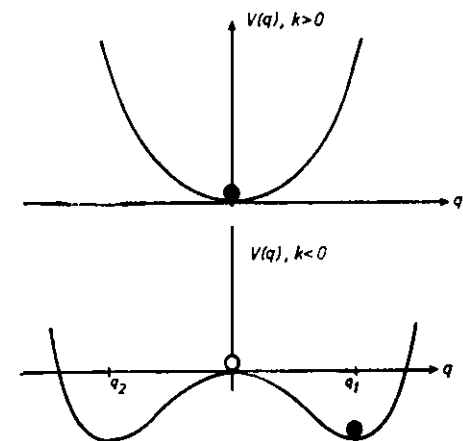
$$V(q) = \frac{1}{2} kq^2 \quad (5.15)$$

(с точностью до аддитивной постоянной, которую мы положили равной нулю). Для интерпретации потенциала V , представленного для данного примера на фиг. 5.1, в, сравним его



Фиг. 5.2. Потенциальная кривая, интерпретируемая как склон холма.

Частица находится в точке равновесия. Так как после смещения частицы вдоль склона она возвращается к равновесной точке, это положение является *устойчивым*.



Фиг. 5.3. Потенциал, соответствующий силе (5.16), при $k > 0$ (а) и $k < 0$ (б).

Соответствующий потенциал показан на фиг. 5.3 для двух различных случаев, именно для $k > 0$ и $k < 0$ ($k_1 > 0$). Положения равновесия определяются условием

$$\dot{q} = 0. \quad (5.18)$$

с работой, производимой при подъеме груза. Это наводит на мысль интерпретировать потенциальную кривую на фиг. 5.2 как склон холма. Когда мы поднимаем частицу в определенную точку на склоне и отпускаем ее, она скатывается вниз по склону и в конце концов оказывается в положении равновесия у подножия холма. Здесь при $q = 0$ наклон к горизонтали равен нулю, $F(q)$ [см. (5.14)] обращается в нуль и поэтому $\dot{q} = 0$.

Рассмотрим теперь несколько более сложную систему, которая будет играть очень важную роль при рассмотрении проблемы самоорганизации (хотя сейчас это вовсе не очевидно). Мы рассмотрим так называемый ангармонический осциллятор. Сила, действующая на него, помимо линейного члена содержит и кубический член

$$F(q) = -kq - k_1q^3. \quad (5.16)$$

Уравнение движения записывается в виде

$$\dot{q} = -kq - k_1q^3. \quad (5.17)$$

Из фиг. 5.3 сразу же становится ясным, что ситуации, соответствующие случаям $k > 0$ или $k < 0$, совершенно различные. Это подтверждается алгебраическим рассмотрением (5.17) при условии (5.18). Единственным решением в случае

$$а) k > 0, k_1 > 0 \text{ является решение } q = 0 \text{ (устойчивое),} \quad (5.19)$$

тогда как в случае

$$б) k < 0, k_1 > 0$$

мы находим три решения, именно $q = 0$, которое, очевидно, неустойчиво, и два устойчивых решения $q_{1,2}$, так что

$$q = 0 \text{ (неустойчивое), } q_{1,2} = \pm \sqrt{|k|/k_1} \text{ (устойчивое).} \quad (5.20)$$

Теперь физически устойчивых положений два (фиг. 5.4). В каждом из них частица находится в положении равновесия и остается там в течение всего времени.

Воспользуемся (5.17) и введем понятие симметрии. Если в каждом члене (5.17) заменить q на $-q$, то получится

$$(-\dot{q}) = -k(-q) - k_1(-q^3). \quad (5.17а)$$

После деления обеих частей на (-1) снова получается выражение (5.17). Таким образом, (5.17) остается неизменным (инвариантным) при преобразовании

$$q \rightarrow -q, \quad (5.17б)$$

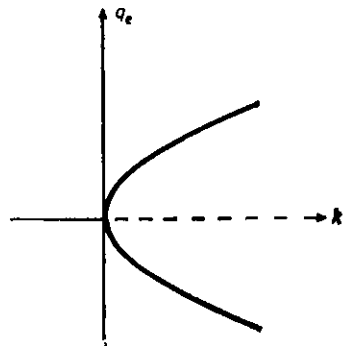
или, другими словами, (5.17) симметрично по отношению к инверсии $q \rightarrow -q$. Одновременно потенциал

$$V(q) = \frac{1}{2} kq^2 + \frac{1}{4} k_1 q^4 \quad (5.21)$$

остается инвариантным по отношению к этому преобразованию:

$$V(q) \rightarrow V(-q) = V(q). \quad (5.17в)$$

Хотя система, описываемая (5.17), совершенно симметрична по отношению к инверсии $q \rightarrow -q$, в реально существующих решениях такая симметрия нарушается. Когда мы постепенно

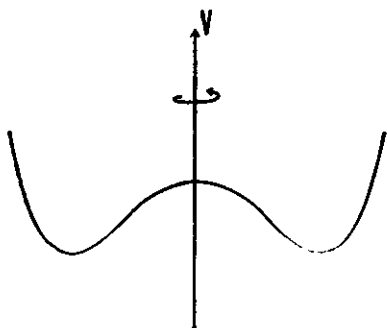


Фиг. 5.4. Равновесная координата q_e как функция k [см. (5.19) и (5.20)]. При $k > 0$, $q_e = 0$, но при $k < 0$ точка $q_e = 0$ становится неустойчивой (штриховая линия) и заменяется двумя устойчивыми положениями (сплошные, расходящиеся вилкой кривые).

изменяем k , переходя от положительных значений к отрицательным, мы проходим точку $k=0$, где устойчивое состояние $q=0$ становится неустойчивым. Возникающую при этом неустойчивость можно назвать *неустойчивостью, нарушающей симметрию*. Это явление можно описать и в других терминах. Когда k переходит от значений $k > 0$ к значению $k < 0$, положения устойчивого равновесия меняются местами: мы имеем *обмен устойчивостями*. В окрестности $q=0$ кривая потенциальной энергии при переходе от $k > 0$ к $k < 0$ становится все более пологой. Благодаря этому частица скатывается по потенциальной кривой все более медленно — это явление называется *критическим замедлением*. В дальнейшем координату q будем обозначать через r . При переходе от $k > 0$ к $k < 0$ устойчивое положение $r=0$ сменяется неустойчивым положением $r=0$ и устойчивое положение возникает в точке $r=r_0$. Этот процесс можно представить в виде следующей схемы:

$$\text{Устойчивая точка} \left\{ \begin{array}{l} \text{Неустойчивая точка} \\ \text{Устойчивая точка} \end{array} \right. \quad (5.22)$$

Из-за того что такая диаграмма имеет форму вилки (fork), само явление называется «бифуркацией». Другой пример бифуркации приведен ниже на фиг. 5.7, где происходит исчезновение двух точек (устойчивой r_1 и неустойчивой r_0) при деформации кривой потенциальной энергии.



Фиг. 5.5. Вращение симметричной кривой потенциала.

б) Предельные циклы

Перейдем теперь от одномерной задачи к задаче двух измерений. Представим себе, что потенциальная поверхность образуется вращением кривой $V(r)$ вокруг оси V , как это показано на фиг. 5.5.

Рассмотрим случай, когда частица движется по дну желоба с постоянной скоростью в тангенциальном направлении. Здесь можно использовать либо декартовы координаты q_1 и q_2 , либо полярные координаты (радиус r и угол ϕ)¹⁾. Поскольку угловая скорость $\dot{\phi}$ постоянная, уравнения движения

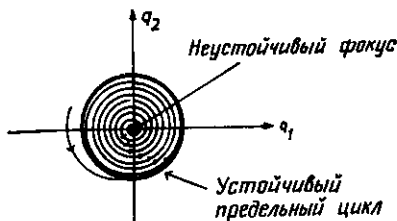
¹⁾ В механике через q_1 и q_2 иногда обозначают координату q и импульс p частицы.

имеют вид

$$\begin{aligned} \dot{r} &= F(r), \\ \dot{\phi} &= \omega. \end{aligned} \quad (5.23)$$

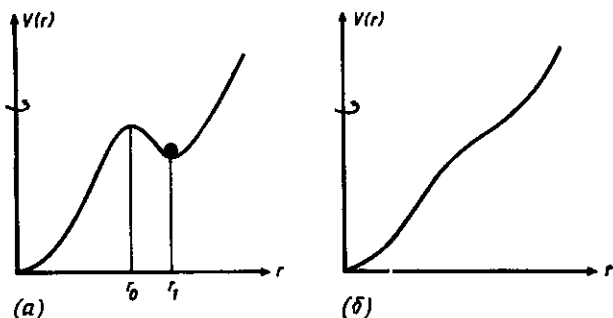
Мы здесь вовсе не утверждаем, что подобные уравнения могут быть получены для чисто механических систем. Мы просто используем то обстоятельство, что интерпретация V как механического потенциала чрезвычайно полезна для наглядного представления наших результатов. Уравнения движения часто записывают не в полярных, а в декартовых координатах. Связь между двумя системами координат задается формулами

$$\begin{aligned} q_1 &= r \cos \varphi, \\ q_2 &= r \sin \varphi. \end{aligned} \quad (5.24)$$



Фиг. 5.6. Неустойчивый фокус и предельный цикл.

Поскольку частица движется по круговому желобу, ее траектория — окружность. Пусть частица, движущаяся в потенциале, соответствующем фиг. 5.5, начинает свое движение вблизи точки



Фиг. 5.7. a — неустойчивый предельный цикл (r_0) и устойчивый предельный цикл (r_1); b — предельные циклы сливаются и исчезают.

$q = 0$. Тогда ее траектория на плоскости (q_1, q_2) будет представлять собой раскручивающуюся спираль, приближающуюся к окружности, как показано на фиг. 5.6. Точка $q = 0$, из которой спираль начинает раскручиваться, называется *неустойчивым фокусом*. Окружность, к которой она в пределе приближается, называется *предельным циклом*. Поскольку наша частица переходит на этот цикл также и тогда, когда ее движение начинается снаружи цикла, этот предельный цикл является

устойчивым. Конечно, могут встречаться потенциалы и другого типа, иначе зависящие от r (см., например, фиг. 5.7, *a*, где показаны устойчивый и неустойчивый предельные циклы). Когда этот потенциал деформируется, два цикла сходятся, и предельные циклы исчезают. Это можно проиллюстрировать следующей схемой бифуркации:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Устойчивый предельный цикл} \\ \text{Неустойчивый предельный цикл} \end{array} \right\} \text{— Отсутствие предельного цикла} \quad (5.25)$$

в) Мягкие и жесткие моды, мягкие и жесткие возбуждения

Если под координатой q подразумевать удлинения маятника, то с помощью настоящего формализма можно описывать работу часов. Подобным же образом эти уравнения могут описывать колебания в радиолампах или лазерах (разд. 8.1). Огромное значение предельных циклов заключается в том, что с их помощью мы можем понять и математически описать автоколебания (самоподдерживающиеся осцилляции). Как ясно показывают приведенные примеры, конечная кривая (траектория), по которой движется частица, не зависит от начальных условий. Рассмотрим примеры, приведенные на фиг. 5.5 или 5.6. Если система начинает движение вблизи неустойчивого фокуса $q = 0$, осцилляции возникают спонтанно — случай *самовозбуждения*. Так как, чтобы движение началось, достаточно бесконечно мало возмущения, этот тип возбуждения называется *мягким самовозбуждением*. Ручные и настенные часы начинают ход сразу же после их завода. На фиг. 5.7, *a* приведен пример так называемого *жесткого возбуждения*.

Чтобы перевести частицу (ее координату) из равновесного положения $q = 0$ ($\equiv r = 0$) на устойчивый предельный цикл $r \equiv r_1$, нужно преодолеть потенциальный барьер в окрестности $r = r_0$, т. е. превзойти определенное пороговое значение $V(r)$. В литературе возникло много путаницы по поводу терминов «мягкие» и «жесткие» моды и «мягкие» и «жесткие» возбуждения. В принятом здесь смысле мягкая и жесткая моды относятся к случаям, когда для частот колебаний имеют место соотношения $\omega = 0$ и $\omega \neq 0$ соответственно. Какой тип возбуждения реализуется — мягкий или жесткий — зависит от формы потенциала, определяемой его зависимостью от координаты r . Если система совершает вращательное движение, бифуркационная схема (5.22) должна быть заменена следующей:

$$\text{Устойчивый фокус} \begin{cases} \nearrow \text{Устойчивый предельный цикл} \\ \searrow \text{Неустойчивый фокус} \end{cases} \quad (5.26)$$

В соответствии с (5.26) бифуркацию предельных циклов можно представить себе так. Пусть $F(r)$ в (5.23) задается некоторым полиномом. При круговом движении требуется, чтобы $dr/dt = 0$, т. е. $F(r)$ должно иметь действительные положительные корни. Бифуркация (или обратная бифуркация) происходит, если при определенных значениях внешних параметров (в нашем случае параметр k) один двойной (или кратный) действительный корень r_0 становится комплексным, так что условие действительности корня r_0 не может быть выполнено. В вышеприведенных примерах мы смогли легко найти замкнутые «траектории», определяющие предельные циклы. В других случаях основной проблемой является определение того, допускает данное дифференциальное уравнение устойчивые или же неустойчивые предельные циклы. Отметим, что предельные циклы не обязательно представляют собой окружности; они могут быть и замкнутыми траекториями другого вида (разд. 5.2, 5.3). Важный инструмент исследования здесь — теорема Пуанкаре — Бендиксона, которая изложена в разд. 5.2.

5.2*. Критические точки и траектории на фазовой плоскости. Еще раз о предельных циклах

В этом разделе мы рассмотрим систему дифференциальных уравнений первого порядка

$$\dot{q}_1 = F_1(q_1, q_2), \quad (5.27)$$

$$\dot{q}_2 = F_2(q_1, q_2). \quad (5.28)$$

Обычное уравнение механического движения частицы с массой m

$$m\ddot{q} - F(q, \dot{q}) = 0 \quad (5.29)$$

можно также представить в форме (5.27), (5.28). Положив для этого

$$m\dot{q} = p \quad (p \text{ — импульс}), \quad (5.30)$$

запишем (5.29) в виде

$$m\ddot{q} = \dot{p} = F_2(q, p) \equiv F(q, p) \quad (5.31)$$

и дополним его уравнением (5.30), которое имеет вид

$$\dot{q} = \frac{p}{m} \equiv F_1(q, p). \quad (5.32)$$

Эта форма записи совпадает с (5.27), если положить $q_1 = q$ и $q_2 = p$. Ограничимся рассмотрением так называемых *автономных систем*, в которых F_1 и F_2 не зависят явно от времени.

Записывая дифференциалы в левых частях (5.27) и (5.28) и деля (5.28) на (5.27), сразу получаем¹⁾

$$\frac{dq_2}{dq_1} = \frac{F_2(q_1, q_2)}{F_1(q_1, q_2)}. \quad (5.33)$$

Смысл (5.27) и (5.28) становится более ясным, если записать \dot{q}_1 в виде

$$\dot{q}_1 = \frac{dq_1}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta q_1}{\Delta t}, \quad (5.34)$$

где

$$\Delta q_1 = q_1(t + \tau) - q_1(t) \quad (5.35)$$

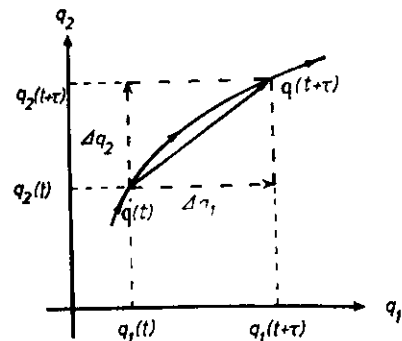
и

$$\Delta t = \tau. \quad (5.36)$$

Таким образом, (5.27) можно представить как

$$q_1(t + \tau) = q_1(t) + \tau F_1(q_1(t), q_2(t)). \quad (5.37)$$

Эта форма записи (и эквивалентная для q_2) дает возможность следующей интерпретации: если q_1 и q_2 заданы в момент t , то их значения в более поздний момент $t + \tau$ можно



Фиг. 5.8. Каждую траекторию можно аппроксимировать ломаной, что помогает построить траекторию. Здесь мы показали аппроксимацию с помощью секущих. Другой хорошо известный подход состоит в продвижении от $q(t)$ к $q(t + \tau)$ по касательным к истинной траектории с использованием правил (5.37) и (5.38).

определить через правую часть (5.37) и

$$q_2(t + \tau) = q_2(t) + \tau F_2(q_1(t), q_2(t)) \quad (5.38)$$

единственным образом (что можно показать совершенно строго). Итак, если в начальный момент q_1 и q_2 заданы, то можно перейти от одной точки к следующей. Повторяя эту процедуру, находим единственную траекторию в плоскости (q_1, q_2) (фиг. 5.8). Траектории мы можем начинать из точек, соответствующих различным начальным условиям. Каждая данная траектория — это одна из множеств траекторий, отличающихся друг от друга «фазой» [или начальным значением $q_1(0)$, $q_2(0)$].

Выберем теперь другие точки q_1 , q_2 , не лежащие на данной траектории, но находящиеся вблизи нее. Через них проходят другие траектории. Мы получаем «поле» траекторий, которые можно интерпретировать как линии потоков жидкости.

¹⁾ «Деление» произведено здесь формальным образом, но его можно обосновать математически строго. Здесь мы не будем заниматься этим вопросом.

Обсудим важный вопрос о форме этих траекторий. Прежде всего ясно, что траектории нигде не пересекаются, поскольку в точке пересечения траектория расщеплялась бы на две или более траекторий, в то время как каждая траектория должна быть единственной. Геометрическую форму траекторий можно определить, исключая из (5.27), (5.28) зависимость от времени, что приводит к (5.33). Эту процедуру, однако, нельзя использовать, если одновременно для пары координат q_1^0 и q_2^0

$$F_1(q_1^0, q_2^0) = F_2(q_1^0, q_2^0) = 0. \quad (5.39)$$

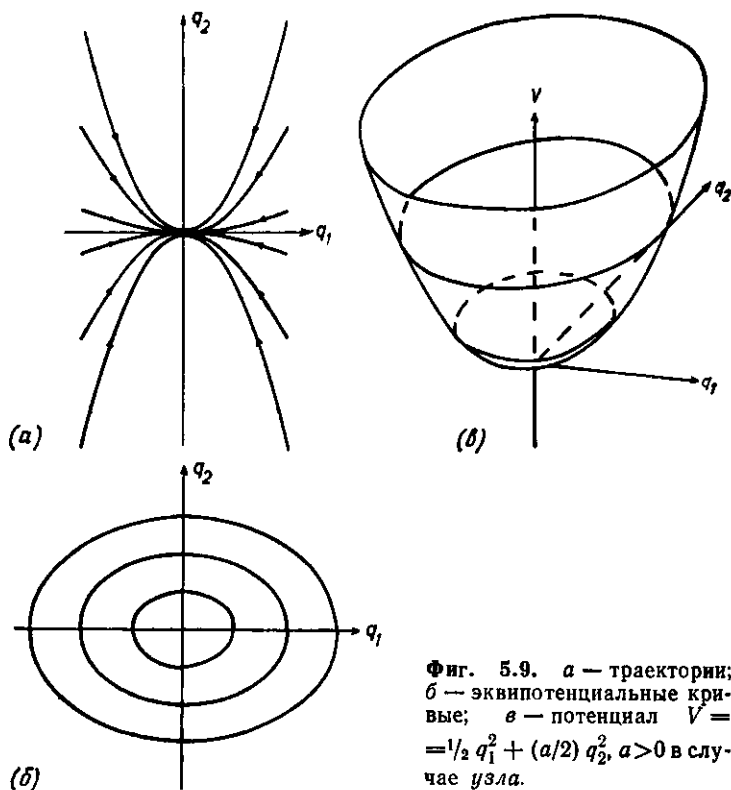
В этом случае (5.33) дает выражение $0/0$, не имеющее смысла. Такая точка называется *особой (или критической) точкой*. Координаты ее определяются из (5.39). Формула (5.39) благодаря (5.27) и (5.28) подразумевает, что $\dot{q}_1 = \dot{q}_2 = 0$, т. е. особая точка есть также и точка равновесия. Для определения характера равновесия (устойчивое, неустойчивое, безразличное) следует рассмотреть траектории, проходящие вблизи особой точки. Любая особая точка называется асимптотически устойчивой, если все траектории, начинающиеся достаточно близко от нее, приближаются к ней асимптотически при $t \rightarrow \infty$ (ср. фиг. 5.9, а). Особая точка называется асимптотически неустойчивой, если все достаточно близкие к ней траектории асимптотически ($t \rightarrow -\infty$) удаляются от нее. Если интерпретировать траектории как потоки жидкости, то асимптотически устойчивые особые точки можно назвать «стоками», поскольку в них сходятся потоки. Соответственно асимптотически неустойчивые особые точки называются «источниками».

Проведем классификацию траекторий вблизи критических точек. Чтобы определить различные типы траекторий, рассмотрим несколько частных случаев. Допустим, что особая точка лежит в начале координат, чего всегда можно достичь, перемещая начало отсчета. Допустим далее, что F_1 и F_2 можно разложить в ряд Тейлора и что по крайней мере F_1 или F_2 имеет низший член разложения, линейный по q_1 и q_2 . Пренебрегая высшими степенями q_1 , q_2 , мы приходим к рассмотрению (5.27) и (5.28), где F_1 и F_2 линейны по q_1 и q_2 . Рассмотрим, какие типы траекторий могут при этом встретиться.

1) Узлы и седловые точки

Для этого типа уравнения (5.27) и (5.28) имеют вид

$$\begin{aligned} \dot{q}_1 &= q_1, \\ \dot{q}_2 &= aq_2, \end{aligned} \quad (5.40)$$



Фиг. 5.9. *a* — траектории; *b* — эквипотенциальные кривые; *c* — потенциал $V = \frac{1}{2} q_1^2 + (a/2) q_2^2$, $a > 0$ в случае узла.

и допускают решение

$$\begin{aligned} q_1^0 &= q_2^0 = 0, \\ q_1 &= c_1 e^t, \quad q_2 = c_2 e^{at}. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Подобным же образом уравнения

$$\begin{aligned} \dot{q}_1 &= -q_1, \\ \dot{q}_2 &= -aq_2 \end{aligned} \quad (5.42)$$

имеют решения

$$\begin{aligned} q_1 &= c_1 e^{-t}, \\ q_2 &= c_2 e^{-at}. \end{aligned} \quad (5.43)$$

При $q_1 \neq 0$ (5.33) принимает вид

$$\frac{dq_2}{dq_1} = \frac{aq_2}{q_1} \quad (5.44)$$

с решением

$$q_2 = Cq_1^a, \quad (5.45)$$

которое можно также получить из (5.41) и (5.43), исключив зависимость от времени. При $a > 0$ получаются параболические интегральные кривые (фиг. 5.9, а). В этом случае для крутизны наклона dq_2/dq_1 получаем

$$\frac{dq_2}{dq_1} = Caq_1^{a-1}. \quad (5.46)$$

Проведем теперь различие между случаями положительных и отрицательных показателей степени в q_1 . Если $a > 1$, то при $q_1 \rightarrow 0$ $dq_2/dq_1 \rightarrow 0$. Каждая интегральная кривая, за исключением оси q_2 , приближается к особой точке вдоль оси q_1 . При $a < 1$ сразу видим, что q_1 и q_2 меняются местами. Особые точки, которые окружены кривыми типа изображенных на фиг. 5.9, а, называются *узлами*. При $a = 1$ интегральные кривые — это полупрямые, сходящиеся к особой точке или исходящие из нее. В случае узла направленность каждой интегральной кривой в сингулярной точке определяется в смысле предела.

Рассмотрим случай $a < 0$. Теперь интегральные кривые имеют гиперболическую форму

$$q_2q_1^{|a|} = C. \quad (5.47)$$

При $a = -1$ получаются обычные гиперболы. Соответствующие кривые изображены на фиг. 5.10. Здесь только четыре траектории тяготеют к особой точке, именно A_S, D_S при $t \rightarrow \infty$, D_S, C_S при $t \rightarrow -\infty$. Такая особая точка называется *седлом*.

2) Фокус и центр

Рассмотрим уравнения вида

$$dq_1/dt = -aq_1 - q_2, \quad (5.48)$$

$$dq_2/dt = +q_1 - aq_2. \quad (5.49)$$

При $a > 0$, используя полярные координаты [ср. (5.24)], приводим (5.48), (5.49) к виду

$$\dot{r} = -ar, \quad (5.50)$$

$$\dot{\phi} = 1. \quad (5.51)$$

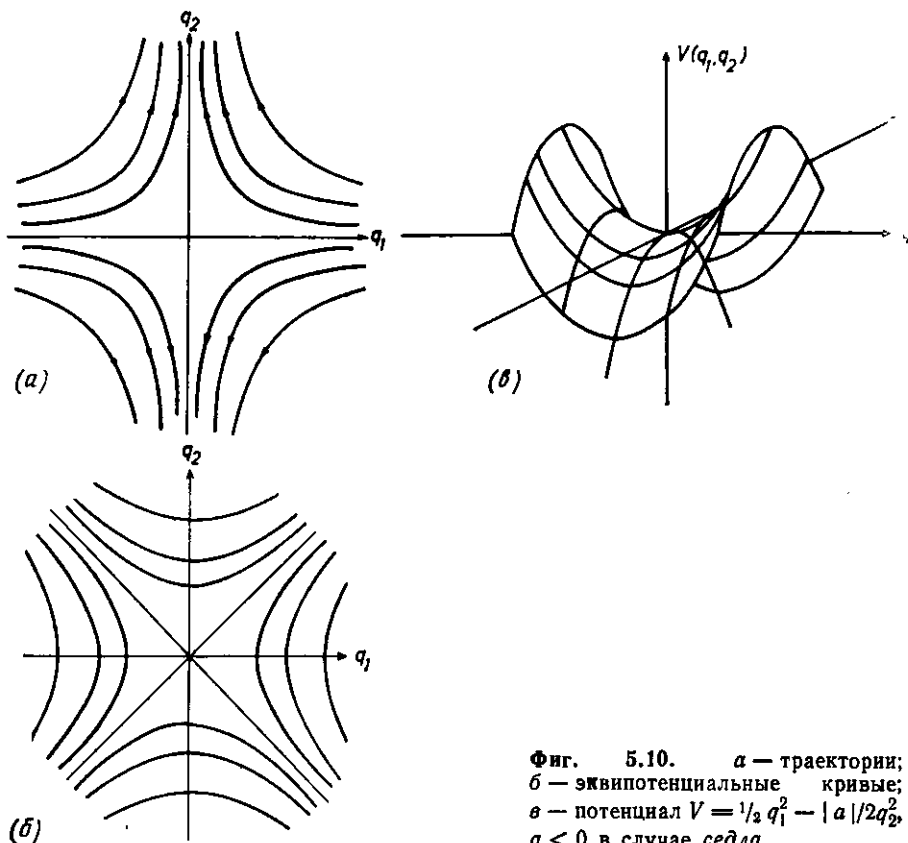
Решения этих уравнений — это

$$r = C_1 e^{-at}, \quad (5.52)$$

$$\phi = t + C_2, \quad (5.53)$$

где C_1, C_2 — постоянные интегрирования. С траекториями такого вида мы уже встречались в разд. 5.1. Они представляют собой

спирали, приближающиеся к особой точке в начале координат. Радиус-вектор вращается против часовой стрелки с частотой (5.51). Эта точка называется *устойчивым фокусом* (фиг. 5.11). В случае $a < 0$ движение сопровождается удалением интеграль-



Фиг. 5.10. a — траектории; b — эквипотенциальные кривые; v — потенциал $V = \frac{1}{2} q_1^2 - |a|/2q_2^2$, $a < 0$ в случае седла.

ной кривой от фокуса: мы имеем *неустойчивый фокус*. При $a = 0$ особая точка называется *центром* (фиг. 5.12).

Перейдем к общему случаю. Как говорилось выше, мы предполагаем, что в окрестности $q_1^0 = 0$ и $q_2^0 = 0$ F_1 и F_2 можно разложить в ряд Тейлора и что в качестве основных членов можно оставить только члены, линейные по q_1 и q_2 , т. е.

$$\dot{q}_1 = aq_1 + bq_2, \quad (5.54)$$

$$\dot{q}_2 = cq_1 + dq_2. \quad (5.55)$$

Проведем линейное преобразование

$$\begin{aligned}\xi &= \alpha q_1 + \beta q_2, \\ \eta &= \gamma q_1 + \delta q_2,\end{aligned}\tag{5.56}$$

так, чтобы (5.54) и (5.55) преобразовать к виду

$$\dot{\xi} = \lambda_1 \xi,\tag{5.57}$$

$$\dot{\eta} = \lambda_2 \eta.\tag{5.58}$$

Если λ_1, λ_2 действительны, то дальнейшее рассмотрение можно проводить так же, как и ранее. Если $\lambda_1 (= \lambda_2^*)$ комплексное, то подстановка $\xi = \eta^* = re^{i\varphi}$ в (5.57), (5.58) с последующим разделением действительных и мнимых частей дает уравнения типа (5.50), (5.51) (где $a = -\operatorname{Re} \lambda_1$ и $+1$ заменяется на $\operatorname{Im} \lambda_1$).

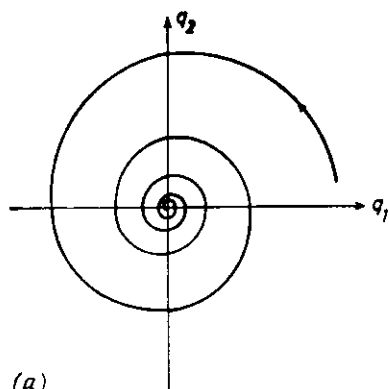
Обсудим теперь другую интересную проблему, а именно: как находить предельные циклы на плоскости, т. е. теорему Пуанкаре — Бендиксона. Выберем точку $q^0 = (q_1^0, q_2^0)$, которую будем считать неособой, и возьмем ее в качестве начального значения для решения (5.27), (5.28). В последующие моменты времени $t > t_0$ точка $q(t)$ будет двигаться вдоль той части траектории, которая начинается при $q(t_0) = q^0$. Назовем эту часть *полутраекторией*. Теорема Пуанкаре — Бендиксона утверждает следующее: если полутраектория остается в конечной области, не приближаясь к особым точкам, то эта полутраектория либо есть предельный цикл, либо приближается к такому циклу. (В литературе даются также и другие формулировки этой теоремы.) Здесь, не приводя доказательства теоремы, мы обсудим несколько способов ее применения, привлекая аналогию между траекториями и потоками в гидродинамике. Рассмотрим конечную область D , которая ограничена внешней и внутренней кривыми (ср. фиг. 5.13). Такая область в математике называется *двухсвязной*. Если все траектории входят в область и внутри ее или на ее границах нет особых точек, то условия теоремы выполняются¹⁾. При стягивании внутренней границы в точку условия теоремы Пуанкаре — Бендиксона по-прежнему выполняются, если эта точка является источником.

Потенциальный случай (n переменных)

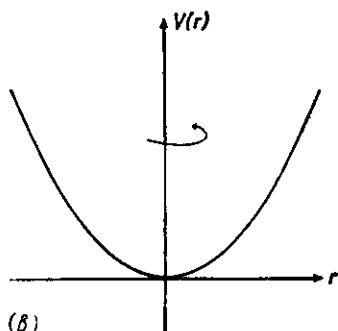
Рассмотрим теперь n переменных q_i , которые подчиняются уравнениям

$$\dot{q}_i = F_i(q_1, \dots, q_n).\tag{5.59}$$

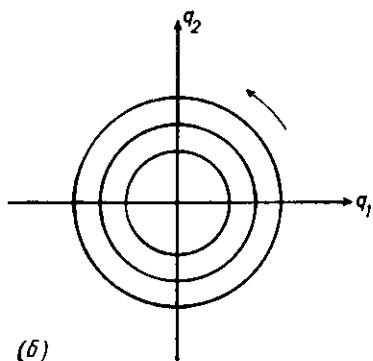
¹⁾ Для тех, кто хорошо знаком с проблемой, заметим, что, когда движение в *тангенциальном направлении* отсутствует, фиг. 5.5 отражает «патологический случай». Линии потоков проходят перпендикулярно окружности. Эта окружность представляет собой линию критических точек, а не предельный цикл.



(a)

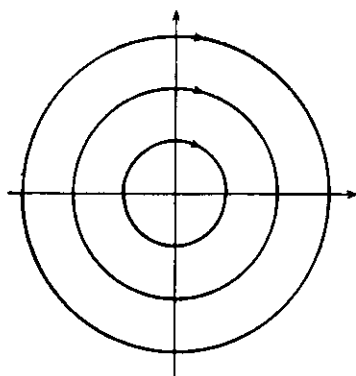


(б)

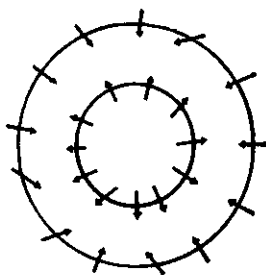


(б)

Фиг. 5.11. Траектории замыкаются на *устойчивом фокусе*. В данном случае потенциал существует только во вращающейся системе отсчета (б) и (в).



Фиг. 5.12. *Центр*. Потенциал существует только во вращающейся системе отсчета. В ней $V = \text{const}$.



Фиг. 5.13. (Ср. текст.)

Случай, когда силы F_j можно получить из потенциала

$$F_j = -\partial V(q_1 \dots q_n) / \partial q_j, \quad (5.60)$$

есть прямое обобщение одномерного случая, рассмотренного в разд. 5.1. Это можно непосредственно проверить с помощью сил F_j , когда их можно получить из потенциала. Силы должны удовлетворять условиям

$$\frac{\partial F_j}{\partial q_k} = \frac{\partial F_k}{\partial q_j} \quad \text{для всех } j, k = 1, \dots, n. \quad (5.61)$$

Если (5.60) обращается в нуль, система находится в равновесии. Это может иметь место в определенных точках q_1^0, \dots, q_n^0 , а также на кривых или на гиперповерхностях. Если V зависит от параметров, то при их изменении из каждой гиперповерхности равновесного состояния могут возникать гиперповерхности совершенно других типов, что приводит к бифуркациям более сложных видов. Теория некоторых бифуркаций была развита Томом (разд. 5.5).

Упражнение к разд. 5.2

Обобщите теорему Пуанкаре—Бендиксона на случай инверсии времени, обращая направления линий потоков.

5.3*. Устойчивость

Состояние системы может существенно измениться, если она теряет устойчивость.

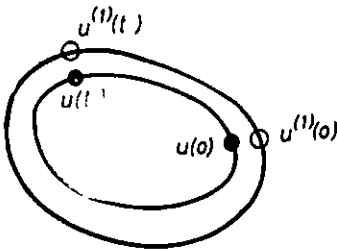
В разд. 5.1 приводились простые примеры, когда деформация потенциала вызывала неустойчивость первоначального состояния и приводила некую абстрактную частицу к новому равновесному состоянию. В последующих главах мы увидим, что подобные изменения на макроскопическом уровне приводят к появлению новых структур. Поэтому желательно обсудить вопрос об устойчивости, более подробно обсудить и прежде всего точно определить само понятие устойчивости. Примеры, приведенные выше, относились к критическим точкам, в которых $\dot{q}_j = 0$. Однако идея устойчивости может быть выражена в гораздо более общей форме, которую мы сейчас и обсудим.

Рассмотрим систему дифференциальных уравнений

$$\dot{q}_j = F_j(q_1, \dots, q_n), \quad (5.62)$$

которые определяют траектории в q -пространстве. Рассмотрим решение $q_j = u_j(t)$ уравнений (5.62), которое наглядно можно представить себе как траекторию частицы в q -пространстве.

Это решение единственным образом определено значениями, взятыми в начальный момент времени $t = t_0$. В реальных системах начальные значения подвержены возмущениям. Рассмотрим, что происходит с траекторией «частицы», если ее начальные условия несколько отличаются от взятых вначале. Интуиция подсказывает, что траектория $u_j(t)$ *устойчивая*, если другие траектории, которые вначале находились рядом с ней, остаются вблизи нее и в последующие моменты времени. Другими словами, если мы зададим окрестность $u_j(t)$, то траектория $u_j(t)$ будет устойчивой, если все другие решения, которые



Фиг. 5.14. Пример устойчивой траектории u . $u^{(1)}$ — близлежащая траектория.

исходят из областей, достаточно близких к $u_j(0)$, остаются в заданной окрестности (фиг. 5.14). Если нельзя найти такую начальную окрестность S_0 , чтобы этот критерий мог выполняться, то траектория $u_j(t)$ называется *неустойчивой*. Отметим, что это определение устойчивости не подразумевает, что траектории $v_j(t)$, первоначально близкие к $u_j(t)$, приближаются к ней, так чтобы расстояние между u_j и v_j стремилось к нулю. Чтобы учесть эту возможность, определим понятие

асимптотической устойчивости. Траектория u_j называется *асимптотически устойчивой*, если для всех $v_j(t)$, удовлетворяющих критерию устойчивости, выполняется дополнительное условие

$$|u_j(t) - v_j(t)| \rightarrow 0 \quad (t \rightarrow \infty) \quad (5.63)$$

(см. фиг. 5.6, где предельный цикл асимптотически устойчив). До сих пор мы следили за движением определенной точки (частицы, движущейся по траектории). Если рассматривать не зависимость u от времени, а интересоваться лишь формой траекторий, то можно определить *орбитальную устойчивость*. Рассмотрим сначала качественную картину, а затем дадим математическую формулировку.

Понятие орбитальной устойчивости есть обобщение определения устойчивости, введенного выше. Анализ устойчивости мы начинали с рассмотрения окрестности траектории. Устойчивость означала, что движущиеся точки всегда остаются в определенной окрестности траектории. В случае орбитальной устойчивости мы не следим за отдельными точками, а рассматриваем траекторию S целиком. Орбитальная устойчивость означает, что траектория, находящаяся в достаточно близкой окрестности S , остается в определенной окрестности с течением времени. Это

условие не означает с необходимостью, что две точки, принадлежащие двум различным траекториям и находившиеся первоначально близко друг от друга, обязательно остаются рядом и в более поздние моменты времени (см. фиг. 5.15). Математически это можно выразить следующим образом: траектория C орбитально устойчива тогда, когда для заданного $\epsilon > 0$ найдется $\eta > 0$ такое, что если R — точка, движущаяся вдоль другой траектории, — находится в момент τ на расстоянии от C , не большем $\eta(C)$, то при $t > \tau$ R остается на расстоянии, не большем ϵ . Когда такого числа η не существует, C — неустойчивая траектория.

Можно определить далее *асимптотическую орбитальную устойчивость* условием, что траектория C орбитально устойчива и, кроме того, расстояние между R и C стремится к нулю при стремлении t к бесконечности. Для пояснения различия между устойчивостью и орбитальной устойчивостью рассмотрим следующие дифференциальные уравнения:

$$\dot{\theta} = r, \tag{5.64a}$$

$$\dot{r} = 0. \tag{5.64б}$$

В соответствии с (5.64б) орбитами являются окружности, а из (5.64а) следует, что угловая скорость увеличивается с расстоянием. Таким образом, две точки, которые первоначально находились на двух соседних окружностях, в более поздние моменты времени расходятся. Поэтому устойчивости движения нет. Тем не менее траектории остаются близкими и орбитально устойчивыми.

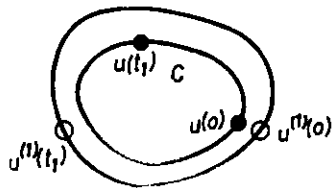
Одна из самых фундаментальных проблем — это определение того, являются ли траектории в заданной задаче устойчивыми. Существуют два основных подхода к этой проблеме — локальный критерий и глобальный критерий.

1) Локальный критерий

Пусть задана траектория $q_j(t) = u_j(t)$, асимптотическую устойчивость которой мы хотим исследовать. Рассмотрим соседнюю траекторию

$$q_j(t) = u_j(t) + \xi_j(t), \tag{5.65}$$

которая отличается от u_j на малую величину ξ_j . Очевидно, что мы имеем асимптотическую устойчивость, если при $t \rightarrow \infty$



Фиг. 5.15. Пример орбитальной устойчивости

рассмотрим следующие

$\xi_j \rightarrow 0$. Подстановка (5.65) в (5.62) дает

$$\dot{u}_j(t) + \dot{\xi}_j(t) = F_j(u_1(t) + \xi_1(t), \dots, u_n(t) + \xi_n(t)). \quad (5.66)$$

Поскольку по предположению ξ малы, правую часть (5.66) можно разложить в ряд Тейлора. Низший член разложения сокращается с \dot{u}_j в левой части. Оставляя лишь следующий член разложения, получаем

$$\dot{\xi}_j(t) = \sum_k \frac{\partial F_j}{\partial \xi_k} \Big|_0 \xi_k(t). \quad (5.67)$$

В общем случае решать (5.67) все еще очень сложно, поскольку $dF/d\xi$ зависит от времени через $u_j(t)$. Можно рассмотреть несколько частных случаев. Один из них — это случай, когда u_j представляют собой периодические функции. Просто рассмотреть также случай, когда траектории u_j состоят из сингулярной точки, так что $u_j = \text{const}$. Тогда можно положить

$$\partial F_j / \partial q_k = A_{kj}, \quad (5.68)$$

где A_{jk} — константы. Вводя матрицу

$$A = (A_{jk}), \quad (5.69)$$

запишем систему уравнений (5.67) в виде

$$\dot{\xi} = A\xi, \quad \xi = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_n \end{pmatrix}. \quad (5.70)$$

Эту систему линейных дифференциальных уравнений первого порядка можно решить стандартным способом — подстановкой

$$\xi = \xi_0 e^{\lambda t}. \quad (5.71)$$

Подставляя (5.71) в (5.70), дифференцируя по времени и деля уравнение на $e^{\lambda t}$, получаем систему линейных однородных алгебраических уравнений относительно ξ_0 . Условие разрешимости требует, чтобы ее детерминант обращался в нуль:

$$\begin{vmatrix} A_{11} - \lambda & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ \vdots & A_{22} - \lambda & & \\ & & \ddots & \\ \vdots & & & A_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (5.72)$$

Раскрывая детерминант, приходим к характеристическому уравнению n -го порядка:

$$f(\lambda) \equiv C_0 \lambda^n + C_1 \lambda^{n-1} + \dots + C_n = 0. \quad (5.73)$$

Если действительные части всех λ отрицательны, все возможные решения (5.71) затухают во времени, так что по определению особая точка асимптотически устойчива. Если действительная часть какого-либо корня λ положительна, всегда можно найти такую начальную траекторию, которая отходит от $u_j(t)$, так что особая точка оказывается неустойчивой. Если корни λ имеют неположительные действительные части, но одна или несколько из них равны нулю, существует так называемая маргинальная устойчивость. Для практических применений отметим следующее. К счастью, не требуется находить решения (5.73). Существует целый ряд критериев, среди них *критерий Гурвица*, которые, исходя непосредственно из свойств A , позволяют определить, выполняется ли условие $\operatorname{Re} \lambda < 0$.

Критерий Гурвица

Приведем этот критерий без доказательства. Все нули полинома $f(\lambda)$ (5.73), коэффициенты которого C_i действительны, лежат на левой полуплоскости комплексной λ -плоскости (т. е. $\operatorname{Re} \lambda < 0$) тогда и только тогда, когда выполняются следующие условия:

а) $\frac{C_1}{C_0} > 0, \frac{C_2}{C_0} > 0, \dots, \frac{C_n}{C_0} > 0;$

б) главные миноры H_j (детерминанты Гурвица) квадратной матрицы

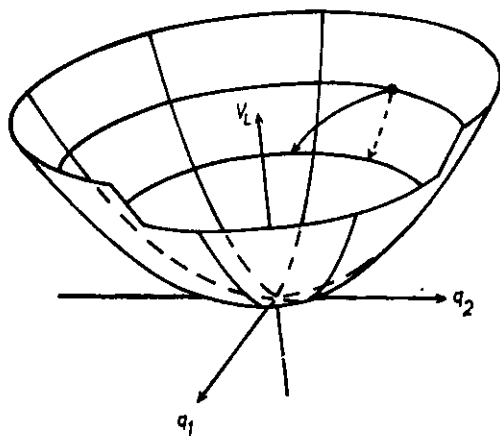
$$\begin{array}{cccccccc} C_1 & C_0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \\ C_3 & C_2 & C_1 & C_0 & \dots & 0 & 0 & \\ C_5 & C_4 & C_3 & C_2 & \dots & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & C_{n-1} & C_{n-2} & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & C_n & \end{array}$$

(т. е. величины $H_1 = C_1, H_2 = C_1 C_2 - C_0 C_3, \dots, H_{n-1}, H_n = C_n H_{n-1}$) удовлетворяют неравенствам $H_1 > 0, H_2 > 0; \dots; H_n > 0$.

а) Глобальная устойчивость (функция Ляпунова)

Раньше мы проверяли положение точки на устойчивость, исследуя непосредственную окрестность этой точки. С другой стороны, потенциальные кривые, приведенные в разд. 5.1, позволили исследовать устойчивость непосредственно путем рассмотрения формы потенциала, т. е. с использованием некоего

глобального критерия. Таким образом, когда для системы можно записать выражение для потенциала (ср. разд. 5.2), ее можно сразу же исследовать на устойчивость. Однако существует большое число систем, которые потенциалом не обладают. Именно в этих случаях используется метод Ляпунова. Ляпунов ввел функцию, которая имеет свойства потенциала, дающие возможность исследования на устойчивость, но не связана с требованием, чтобы силы определялись из потенциала. Определим сначала эту функцию Ляпунова $V_L(q)$ (фиг. 5.16).



Фиг. 5.16. Пример функции Ляпунова V_L в двумерном случае. В отличие от потенциального случая (см. 147), где «частица» всегда проходит по *наиболее крутому* спуску (штриховая линия со стрелкой), в данном случае она может двигаться по произвольному пути (сплошная линия со стрелкой) при условии, что он не идет вверх (устойчивость) и везде направлен вниз (асимптотическая устойчивость).

1) $V_L(q)$ и ее первые производные непрерывны в некоторой окрестности Ω начала координат. (5.74а)

2) $V_L(0) = 0$. (5.74б)

Без потери общности мы помещаем критическую точку в начало координат.

3) Для $q \neq 0$ $V_L(q)$ положительна в Ω . (5.75)

4) Примем теперь во внимание то, что аргумент q функции V_L зависит от времени, подчиняясь дифференциальным уравнениям (5.62). Благодаря этому V_L сама становится функцией, зависящей от времени. Беря производную от V_L по времени, получаем

$$\dot{V}_L = \text{grad } V_L \cdot \dot{q}, \quad (5.76)$$

где для \dot{q} можно использовать (5.62). Теперь потребуем, чтобы в Ω

$$\dot{V}_L = F(q) \text{grad } V_L \leq 0. \quad (5.77)$$

Огромная важность V_L заключается в том, что для проверки условия (5.77) не требуется решать дифференциальных уравнений — нужно просто подставить функцию Ляпунова V_L в (5.77). Теперь мы можем сформулировать теорему Ляпунова об устойчивости.

А) Теорема об устойчивости

Если в некоторой окрестности Ω начала координат существует функция Ляпунова $V_L(q)$, то точка в начале координат устойчива.

Б) Теорема об асимптотической устойчивости

Если $-\dot{V}_L$ — функция, положительно определенная в Ω , устойчивость асимптотическая. С другой стороны, можно также сформулировать теоремы о неустойчивости. Упомянем два важных случая. Первый рассмотрен Ляпуновым, а второй есть обобщение, проведенное Четаевым.

В) Теорема Ляпунова о неустойчивости

Пусть при $V(0) = 0$ $V(q)$ имеет в Ω непрерывные частные производные первого порядка. Пусть также \dot{V} положительно определена и V принимает положительные значения в точках, сколько угодно близких к началу координат; тогда точка в начале координат неустойчива.

Г) Теорема Четаева о неустойчивости

Пусть Ω — окрестность начала координат. Пусть задана функция $V(q)$ и область Ω_1 внутри Ω со следующими свойствами:

- 1) первые частные производные $V(q)$ в Ω_1 непрерывны;
- 2) в Ω_1 $V(q)$ и $\dot{V}(q)$ положительны;
- 3) на границе Ω_1 , внутри Ω , $V(q) = 0$;
- 4) начало координат — граничная точка Ω_1 .

Тогда начало координат — неустойчивая точка.

До сих пор мы рассматривали автономные системы, для которых F в (5.62) не зависит явно от времени. В заключение отметим, что теорию Ляпунова можно простым образом

распространить и на неавтономные системы, для которых

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{F}(\mathbf{q}, t). \quad (5.78)$$

При этом следует предполагать, что решения (5.78) существуют и они единственны и что

$$\mathbf{F}(0, t) = 0 \quad \text{для } t \geq 0. \quad (5.79)$$

Хотя в литературе читатель довольно часто может встретиться с функциями Ляпунова, задач, в которых функцию Ляпунова можно определить явно, совсем немного. Таким образом, сама теория очень красива, но ее практическое применение пока оставалось ограниченным.

Упражнения к разд. 5.3

1) Покажите, что прирост информации (3.38)

$$K(P, P') = \sum_{\mathbf{m}} P(\mathbf{m}) \ln(P(\mathbf{m})/P'(\mathbf{m})) \quad (У.1)$$

есть функция Ляпунова для кинетического уравнения (4.111), $P'(\mathbf{m})$ — стационарное решение (4.111) и $P(\mathbf{m}) = P(\mathbf{m}, t)$ — решение, зависящее от времени.

Указание. отождествите $P(\mathbf{m})$ с q_i , введенными в этой главе (т. е. $P \leftrightarrow q$, $\mathbf{m} \leftrightarrow j$), и покажите, что (У.1) удовлетворяет аксиомам, определяющим функцию Ляпунова. Перейдите от $\mathbf{q} = 0$ к $\mathbf{q} = \mathbf{q}^0 \equiv \{P'(\mathbf{m})\}$. Для проверки (5.75) используйте свойство (3.41). Для проверки (5.77) используйте (4.111) и неравенство $\ln x \geq 1 - 1/x$. Что этот результат означает по отношению к $P(\mathbf{m}, t)$? Покажите, что $P'(\mathbf{m})$ — асимптотически устойчивая функция.

2) Если имеет место микрообратимость, то вероятности перехода $w(\mathbf{m}, \mathbf{m}')$ из (4.111) симметричны:

$$w(\mathbf{m}, \mathbf{m}') = w(\mathbf{m}', \mathbf{m}).$$

Тогда стационарным решением (4.111) является $P'(\mathbf{m}) = \text{const}$. Используя упр. 1, покажите, что в такой системе энтропия S возрастает до своего максимального значения (знаменитая H -теорема Больцмана).

5.4. Примеры и упражнения на бифуркацию и устойчивость

Наш пример с частицей в потенциальной яме, взятый из механики, оказывается довольно поучительным, поскольку с его помощью можно объяснить много общих свойств, присущих дифференциальным уравнениям. С другой стороны, он не про-

ливаает света на применимость проведенного рассмотрения для других дисциплин. Поэтому рассмотрим еще несколько примеров. В последующих главах их будет приведено еще больше. Важность бифуркации заключается в том, что даже небольшое изменение параметра (в нашем случае силовой постоянной k) приводит к серьезным изменениям в системе.

Рассмотрим сначала простую модель лазера. Лазер — это устройство, в котором в процессе стимулированного излучения порождаются фотоны (более подробно см. разд. 8.1). Для нас сейчас важны только несколько фактов. Изменение со временем числа фотонов n , или, другими словами, скорость порождения фотонов, определяется уравнением вида

$$\dot{n} = \text{„Прирост“} - \text{„Потери“}. \quad (5.80)$$

Прирост обусловлен так называемым стимулированным излучением. Он пропорционален числу уже имеющихся фотонов и числу возбужденных атомов N . (*Замечание для специалистов.* Предполагается, что основной уровень, на который происходят переходы с испусканием света, поддерживается пустым.) Таким образом,

$$\text{Прирост} = GNn; \quad (5.81)$$

здесь G — коэффициент усиления, который может быть получен из микроскопической теории. Член, описывающий потери, обусловлен уходом фотонов через торцы лазера. Единственное допущение, которое мы принимаем, — это то, что скорость ухода пропорциональна числу имеющихся фотонов. Следовательно,

$$\text{Потери} = 2\kappa n; \quad (5.82)$$

$2\kappa = 1/t_0$, где t_0 — время жизни фотона в лазере. Теперь следует учесть одно важное обстоятельство, которое делает (5.80) нелинейным уравнением. Число возбужденных атомов уменьшается за счет испускания фотонов. Так, если в отсутствие лазерной генерации число возбужденных атомов поддерживается внешней накачкой на постоянном уровне N_0 , то благодаря процессу генерации истинное число возбужденных атомов будет меньшим. Это уменьшение ΔN пропорционально числу имеющихся в лазере фотонов, поскольку эти фотоны постоянно заставляют атомы возвращаться в основное состояние. Таким образом, число возбужденных атомов равно

$$N = N_0 - \Delta N, \quad \Delta N = an. \quad (5.83)$$

Подставляя (5.81) — (5.83) в (5.80), получаем основное уравнение нашей упрощенной лазерной модели:

$$\dot{n} = -kn - k_1 n^2, \quad (5.84)$$

где постоянная k дается выражением

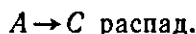
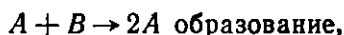
$$k = 2\kappa - GN_0 \geq 0. \quad (5.85)$$

Если число возбужденных атомов N_0 (создаваемых накачкой) невелико, то k положительно, в то время как при достаточно больших N_0 k может стать отрицательным. Изменение знака происходит, когда

$$GN_0 = 2\kappa. \quad (5.86)$$

Это условие есть условие порога лазерной генерации. Из теории бифуркации следует, что при $k > 0$ лазерной генерации нет, в то время как при $k < 0$ лазер испускает фотоны. Ниже или выше порога лазер работает в совершенно разных режимах. В последующих главах мы обсудим этот вопрос более подробно, и читателя, который интересуется более полной теорией, мы отсылаем к этим главам.

Точно такое же уравнение (5.84) или (5.80) с членами (5.81)—(5.82) и (5.83) используется в совершенно иных областях, например в химии. Рассмотрим автокаталитическую реакцию между молекулами двух типов A , B с концентрациями соответственно n и N :



Молекулы A создаются в процессе, в котором эти же молекулы участвуют, так что скорость образования молекул пропорциональна n [ср. (5.81)]. Кроме того, скорость образования пропорциональна N . Если поступление молекул B происходит не бесконечно быстро, то N снова уменьшается на величину, пропорциональную числу n имеющихся молекул типа A .

Те же уравнения применимы к определенным проблемам экологии и динамики популяций. Если в качестве n взять число животных определенного вида, то N будет мерой доступного количества пищи, которое постоянно, но с определенной скоростью обновляется. Много других примеров будет приведено в гл. 9 и 10.

Упражнение

Убедитесь в том, что решение дифференциального уравнения (5.84) имеет вид

$$n(t) = -\frac{k}{2k_1} - \frac{|k|}{2} \frac{c \cdot e^{-|k|t} - 1}{c \cdot e^{-|k|t} + 1}, \quad (5.87)$$

где

$$c = \frac{|k/k_1| - k/k_1 - 2n_0}{|k/k_1| - k/k_1 + 2n_0}$$

и $n_0 = n(0)$ — начальное значение. Обсудите временное поведение этой функции и покажите, что она приближается к стационарному состоянию $n = 0$ или $n = |k/k_1|$ независимо от начального значения n_0 , но в зависимости от знаков k , k_1 . Исследуйте эту зависимость!

В двухмодовом лазере порождаются фотоны двух различных типов 1 и 2 в количестве n_1 и n_2 . По аналогии с (5.80) [с учетом (5.81)—(5.83)] скоростные уравнения записываются в виде

$$\dot{n}_1 = G_1 N n_1 - 2\kappa_1 n_1, \quad (5.88)$$

$$\dot{n}_2 = G_2 N n_2 - 2\kappa_2 n_2, \quad (5.89)$$

где число возбужденных атомов равно

$$N = N_0 - \alpha_1 n_1 - \alpha_2 n_2. \quad (5.90)$$

Условие стационарности

$$\dot{n}_1 = \dot{n}_2 = 0 \quad (5.91)$$

подразумевает, что при

$$\frac{G_1}{2\kappa_1} \neq \frac{G_2}{2\kappa_2} \quad (5.92)$$

по крайней мере n_1 или n_2 должно равняться нулю (докажите это).

Упражнение

Что произойдет, если

$$\frac{G_1}{2\kappa_1} = \frac{G_2}{2\kappa_2}. \quad (5.93)$$

Обсудите устойчивость (5.88) и (5.89). Существует ли потенциал?

Исследуйте критическую точку $n_1 = n_2 = 0$.

Имеются ли другие критические точки?

Уравнения (5.88)—(5.90) допускают простую, но важную интерпретацию в экологии. Пусть n_1 , n_2 — численности особей двух видов, которые питаются из одного и того же источника пищи N_0 . При условии (5.92) выживает только один вид, в то время как другой вымирает, поскольку вид с большей константой размножения G_1 поедает пищу гораздо быстрее, чем другой вид, и в конце концов завладевает всей доступной пищей. Следует отметить, что так же, как в (5.83), количество пищи не задается в начальный момент, но поступает постоянно с определенной скоростью. Сосуществование видов становится возможным, если количества подводимой пищи различны для разных видов (ср. разд. 10.1).

Упражнения

Рассмотрите уравнения общего вида

$$0 = \dot{n}_1 = a_{11}n_1 - a_{12}n_2, \quad (5.94)$$

$$0 = \dot{n}_2 = a_{21}n_1 - a_{22}n_2. \quad (5.95)$$

Другой интересный пример динамики популяций дается моделью Лотки—Вольтерра. Первоначально она была введена для объяснения временных осцилляций количества рыбы в Адриатическом море. В ней рассматриваются рыбы двух типов, именно рыбы-хищники и рыбы-жертвы. Скоростные уравнения снова имеют вид

$$\dot{n}_j = \text{Прирост}_j - \text{Потери}_j, \quad j = 1, 2. \quad (5.96)$$

Обозначим рыб-жертв индексом 1. Если хищников нет, то рыбы-жертвы размножаются по закону

$$\text{Прирост}_1 = a_1 n_1. \quad (5.97)$$

Число рыб-жертв, однако, уменьшается, поскольку они поедаются хищниками. Скорость убывания пропорциональна числу жертв и хищников:

$$\text{Потери}_1 = a n_1 n_2. \quad (5.98)$$

Рассмотрим теперь уравнение для $j = 2$ (рыб-хищников). Очевидно, что

$$\text{Прирост}_2 = \beta n_1 n_2. \quad (5.99)$$

Поскольку хищники живут за счет жертв, скорость размножения хищников пропорциональна их собственному числу и числу рыб-жертв, а поскольку хищники сами умирают, их число убывает пропорционально числу имеющихся рыб-хищников:

$$\text{Потери}_2 = 2\kappa_2 n_2. \quad (5.100)$$

Таким образом, уравнения модели Лотки—Вольтерра имеют вид

$$\begin{aligned} \dot{n}_1 &= a_1 n_1 - a n_1 n_2, \\ \dot{n}_2 &= \beta n_1 n_2 - 2\kappa_2 n_2. \end{aligned} \quad (5.101)$$

Упражнения к разд. 5.4

1) Приведите (5.101) к следующему безразмерному виду:

$$\begin{aligned} \frac{dn'_1}{dt'} &= n'_1 - n'_1 n'_2, \\ \frac{dn'_2}{dt'} &= a(-n'_2 + n'_1 n'_2). \end{aligned} \quad (5.102)$$

Указание. Положите

$$n_1 = 2 \frac{\alpha_2}{\beta} n'_1; \quad n_2 = \frac{\alpha_1}{\alpha} n'_2; \quad t = \frac{1}{\alpha_1} t'. \quad (5.103)$$

2) Определите стационарное состояние $\dot{n}_1 = \dot{n}_2 = 0$. Докажите следующий закон сохранения:

$$\sum_{j=1,2} \frac{1}{a_j} (n'_j - \ln n'_j) = \text{const}, \quad \begin{pmatrix} a_1 = 1 \\ a_2 = \alpha \end{pmatrix} \quad (5.104)$$

или

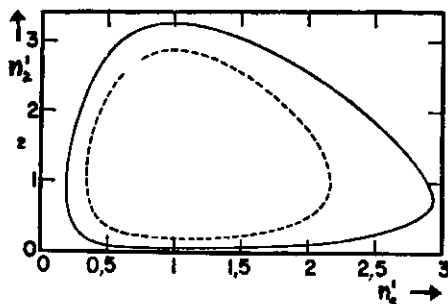
$$\prod_{j=1,2} (n'_j e^{-n'_j})^{1/a_j} = \text{const}. \quad (5.105)$$

Указание. Перейдите к новым переменным $v_j = \ln n'_j$, $j = 1, 2$ образуйте сумму

$$\sum_{j=1}^2 \frac{1}{a_j} \frac{dv_j}{dt} (e^{v_j} - 1) \quad (5.106)$$

и используйте (5.102).

Из фиг. 5.17 следует, что изменение n_1 , n_2 периодически (см. фиг. 5.18). Почему?



Фиг. 5.17. Две типичные траектории на n_1 , n_2 -плоскости в модели Лотки — Вольтерра при фиксированных параметрах (по работе [5.17]).

Указание. Используйте разд. 5.1.

Имеются ли в данном случае особые точки?

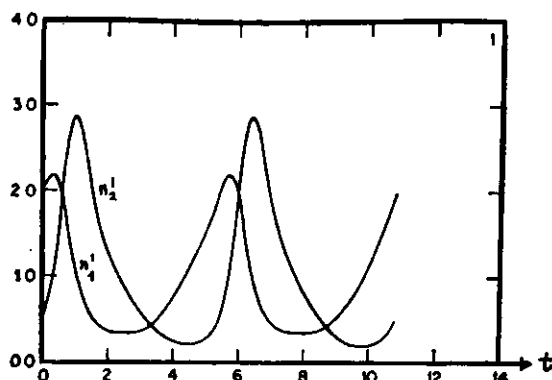
Являются ли траектории устойчивыми или асимптотически устойчивыми?

Ответ. Траектории устойчивы, но не асимптотически устойчивы. Почему?

Выбирая подходящие функции Ляпунова, исследуйте на устойчивость или неустойчивость следующие системы ($\lambda > 0$, $\mu > 0$):

а)

$$\begin{aligned} \dot{q}_1 &= -\lambda q_1, \\ \dot{q}_2 &= -\mu q_2. \end{aligned} \quad (5.107)$$



Фиг. 5.18. Изменение во времени населенностей n_1 , n_2 , соответствующее траектории фиг. 5.17.

Указание. Выберите в качестве функции Ляпунова

$$V_L = q_1^2 + q_2^2. \quad (5.108)$$

б)

$$\begin{aligned} \dot{q}_1 &= \lambda q_1, \\ \dot{q}_2 &= -\mu q_2. \end{aligned} \quad (5.109)$$

Указание. Выберите в качестве функции Ляпунова

$$V_L = q_1^2 + q_2^2. \quad (5.110)$$

в) Для комплексных величин q имеются уравнения

$$\begin{aligned} \dot{q} &= (a + bi)q, \\ \dot{q}^* &= (a - bi)q^*, \end{aligned} \quad (5.111)$$

причем

$$a, b \neq 0 \quad (5.112)$$

и

$$a < 0. \quad (5.113)$$

Указание. Выберите в качестве функции Ляпунова

$$V_L = qq^*. \quad (5.114)$$

Покажите, что в вышеприведенных примерах функции (5.108), (5.110) и (5.114) — функции Ляпунова. Сравните эти результаты с теми, что получены в разд. 5.2 (найдите в рассмотренных примерах случаи устойчивого узла, неустойчивого седла и устойчивого фокуса). Покажите, что потенциал ангармонического осциллятора обладает свойствами функции Ляпунова (в определенной области Ω).

Упражнение. Уравнение Ван-дер-Поля

Это уравнение, сыгравшее фундаментальную роль в рассмотрении работы электронной лампы, имеет вид

$$\ddot{q} + \varepsilon(q^2 - 1)\dot{q} + q = 0, \quad (5.115)$$

где

$$\varepsilon > 0. \quad (5.116)$$

Используя эквивалентные уравнения

$$\begin{aligned} \dot{q} &= p - \varepsilon(q^3/3 - q), \\ \dot{p} &= -q, \end{aligned} \quad (5.117)$$

покажите, что начало координат — единственная критическая точка типа источника. Для каких ε она является неустойчивым фокусом (узлом)?

Покажите, что (5.117) имеет по крайней мере один предельный цикл.

Указание. Используйте рассуждения, аналогичные изложенным после теоремы Пуанкаре — Бендиксона на стр. 147. Начертите достаточно большую окружность, охватывающую начало координат $q = 0, p = 0$, и покажите, что все траектории входят внутрь окружности. Для этого правую часть (5.117) рассматривайте как компоненты вектора, задающего локальное направление потока, проходящего через точку q, p . Затем постройте скалярное произведение этого вектора и вектора $\mathbf{q} = (q, p)$, направленного из начала координат в данную точку. Знак скалярного произведения укажет направление потока.

5.5*. Классификация статических неустойчивостей или элементарный подход к теории катастроф Тома

Выше мы рассмотрели примеры потенциальных кривых, у которых при изменении их формы вместо одного минимума возникали два минимума, что обуславливало явление бифуркации. В этой главе потенциал исследуется в окрестности тех точек, где нарушается линейная устойчивость. От рассмотрения

одномерного случая мы постепенно перейдем к общему n -мерному случаю. Нашей целью является проведение классификации критических точек.

А) Одномерный случай

Рассмотрим потенциал $V(q)$ и предположим, что его можно разложить в ряд Тейлора

$$V(q) = c^{(0)} + c^{(1)}q + c^{(2)}q^2 + c^{(3)}q^3 + \dots + c^{(m)}q^{(m)} + \dots \quad (5.118)$$

Коэффициенты этого разложения имеют обычный вид

$$c^{(0)} = V(0), \quad (5.119)$$

$$c^{(1)} = \left. \frac{dV}{dq} \right|_{q=0}, \quad (5.120)$$

$$c^{(2)} = \frac{1}{2} \left. \frac{d^2V}{dq^2} \right|_{q=0}; \quad (5.121)$$

общий вид коэффициентов определяется формулой

$$c^{(l)} = \frac{1}{l!} \left. \frac{d^l V}{dq^l} \right|_{q=0} \quad (5.122)$$

(при условии, что разложение производится в точке $q=0$). Поскольку форма потенциальной кривой не изменяется, если сдвинуть кривую на постоянную величину, можно положить

$$c^{(0)} = 0. \quad (5.123)$$

Пусть теперь $q=0$ — точка равновесия (которая может быть устойчивой, неустойчивой, метастабильной), так что

$$\left. \frac{dV}{dq} \right|_{q=0} = 0. \quad (5.124)$$

Из (5.124) следует, что

$$c^{(1)} = 0. \quad (5.125)$$

Перед тем как продолжить рассмотрение, сделаем несколько простых, но очень важных замечаний о порядке малости рассматриваемых величин. Далее в этом разделе будем всюду предполагать, что рассматриваемые величины безразмерны. Сравним теперь малости различных степеней q . Если $q=0,1$, то $q^2=0,01$, т. е. q^2 составляет лишь 10% от q . Выбирая далее $q=0,01$, получаем $q^2=0,0001$, т. е. оно составляет 1% от q . Этот вывод о малости справедлив, очевидно, и для последующих степеней, скажем q^n и q^{n+1} . Если рассматривать два соседних члена разложения при достаточно малом q , то q^{n+1} можно пренебречь по сравнению с q^n . Поэтому в разложении (5.118)

можно ограничиваться главными членами. Потенциал имеет локальный минимум при условии

$$\frac{1}{2} \frac{d^2V}{dq^2} \Big|_{q=0} \equiv c^{(2)} > 0 \quad (5.126)$$

(ср. фиг. 5.3, а).

Введем для дальнейшего несколько измененное обозначение

$$c^{(2)} = \mu. \quad (5.127)$$

Как будет показано далее на многих конкретных примерах, при изменении определенных параметров рассматриваемой системы μ может изменять свой знак. При этом устойчивая точка $q=0$ превращается в неустойчивую (при $\mu < 0$) или в точку безразличного равновесия (при $\mu = 0$). В окрестности такой точки поведение $V(q)$ определяется следующим не исчезающим членом разложения. Назовем точку $\mu=0$ точкой неустойчивости.

Допустим далее, что

$$1) \ c^{(2)} \neq 0, \text{ так что } V(q) = c^{(3)}q^3 + \dots \quad (5.128)$$

Ниже будет показано, что в практических случаях $V(q)$ возмущается либо внешними воздействиями, например нагрузками в механических конструкциях, либо внутренними дефектами (ср. примеры из гл. 8). Предположим, что эти возмущения малы. Какие из них изменят характер (5.128) в наибольшей степени? Вблизи $q=0$ более высокие степени q , например q^4 , много меньше чем (5.128), так что такой член вызывает пренебрежимо малое изменение (5.128). С другой стороны, дефекты или другие возмущения могут приводить к появлению членов с более низкими, чем кубические, степенями q , которые могут вызывать опасные возмущения (5.128). Слово «опасный» употреблено здесь в том смысле, что состояние системы меняется коренным образом.

В наиболее общем случае следует включить в рассмотрение все низшие члены разложения

$$V(q) = \alpha + \beta q + \gamma q^2 + c^{(3)}q^3. \quad (5.129)$$

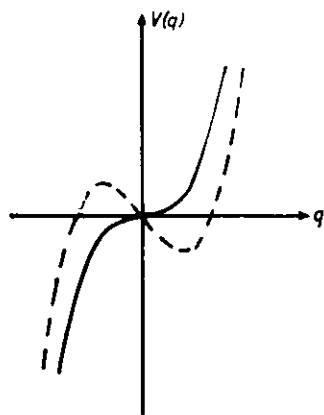
Добавление всех возмущений, изменяющих нетривиальным образом первоначальную сингулярность (5.128), называется в соответствии с Томом развертками (unfolding). Чтобы классифицировать все возможные развертки, избавимся в (5.128) от несущественных констант. Сначала, выбрав масштаб q подходящим образом, можно добиться того, что коэффициент $c^{(3)}$ в (5.128) станет равным единице. Далее можно перенести начало координат вдоль q -оси с помощью преобразования

$$q = q' + \delta, \quad (5.130)$$

чтобы избавиться от квадратичного члена в (5.129). Наконец, можно сдвинуть нулевую точку потенциала, так чтобы постоянный член в (5.129) обратился в нуль. Тогда $V(q)$ принимает «нормальную» форму

$$V(q) = q^3 + uq. \quad (5.131)$$

В такой форме $V(q)$ зависит от единственного свободного параметра u . Виды потенциальных кривых для случая $u = 0$ и $u < 0$ показаны на фиг. 5.19. При $u \rightarrow 0$ максимум и минимум сливаются в одну точку перегиба.



Фиг. 5.19. Потенциальная кривая $V(q) = q^3 + uq$ и соответствующая ей развертка (5.131) при $u < 0$.

2) $c^{(3)} = 0$, но $c^{(4)} \neq 0$.

Разложение потенциала в ряд теперь начинается с члена

$$V = q^4. \quad (5.132)$$

Развертка этого потенциала (фиг. 5.20) дается следующей формулой:

$$V(q) = \frac{q^4}{4} + \frac{uq^2}{2} + vq, \quad (5.133)$$

где мы уже соответствующим образом сместили начало (q, V) -системы координат. Множители $1/4$ и $1/2$ в первом и втором членах в (5.133) выбраны так, чтобы производная от V приняла простой вид

$$\frac{dV}{dq} = q^3 + uq + v. \quad (5.134)$$

Если правую часть (5.134) положить равной нулю, то получается уравнение, решение которого дает положения трех экстремумов на потенциальной кривой. В зависимости от параметров u и v можно провести различие между различными областями. Если $u^3/27 + v^2/4 > 0$, то имеется лишь один минимум, тогда как при $u^3/27 + v^2/4 < 0$ мы получаем два минимума, которые отличаются по глубине в зависимости от величины v . В физических системах реализуется только то состояние, которое имеет самый глубокий минимум. Поэтому, если изменять параметры u и v , система может перескочить из одного минимума в другой. Таким образом, на плоскости $(u - v)$ имеются различные области, местоположение которых зависит от того, какой именно минимум реализуется (фиг. 5.21) (критический комментарий по поводу таких перескоков см. в конце этого раздела).

3) Если $c^{(4)} = 0$, но коэффициент при следующем члене разложения не равен нулю, то потенциал в критической точке равен

$$V = q^5. \quad (5.135)$$

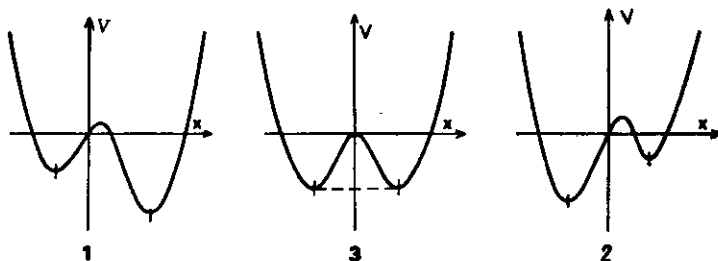
После соответствующей нормировки q развертка V записывается в виде

$$V = \frac{q^5}{5} + \frac{uq^3}{3} + \frac{vq^2}{2} + \omega q. \quad (5.136)$$

Экстремумы этого выражения определяются из уравнения

$$\frac{\partial V}{\partial q} = q^4 + uq^2 + vq + \omega = 0, \quad (5.137)$$

допускающего нулевое решение, два или четыре экстремума, один или два минимума. Если изменять u или v , или ω , или



Фиг. 5.20. Потенциал (5.133) при различных значениях u и v (по Тому).

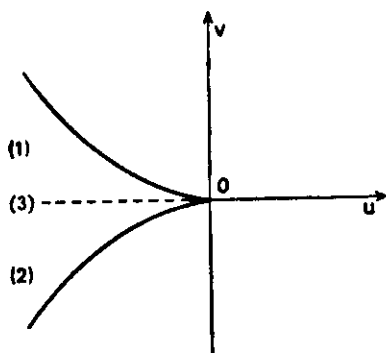
некоторые из них одновременно, то может случиться, что число минимумов изменится (точки бифуркации) или их глубины станут равными (конфликтные точки).

Оказывается, что такие изменения происходят в общем случае на определенных поверхностях в пространстве $u - v - \omega$, причем эти поверхности принимают весьма странные формы (ср. фиг. 5.22). Наконец, в качестве последнего примера укажем на потенциал вида

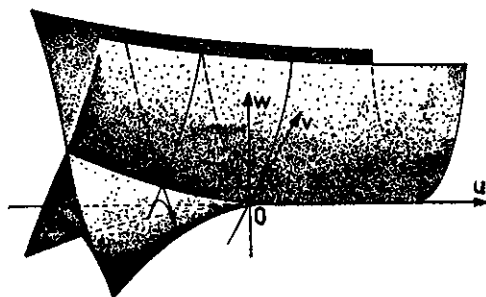
4) $V = q^6$, и его развертка представляет собой

$$V = \frac{q^6}{6} + \frac{tq^4}{4} + \frac{uq^3}{3} + \frac{vq^2}{2} + \omega q. \quad (5.138)$$

Перейдем теперь к рассмотрению двумерного случая.



Фиг. 5.21. Сплошная кривая на u, v -плоскости разделяет области с одним минимумом потенциала (правая область) и с двумя минимумами потенциала. Сплошная линия представляет собой *катастрофическое множество* в смысле Тома, т. е. состоит из *точек бифуркации*. Штриховая линия показывает, где два минимума имеют одинаковое значение. Эта линия представляет собой *катастрофическое множество*, состоящее из *конфликтных точек* (по Тому).



Фиг. 5.22. u, v, w -пространство разбивается поверхностями («катастрофические множества») на области с различным числом потенциальных минимумов. Поверхности, отделяющие области с одним минимумом от областей с двумя минимумами, имеют форму ласточкина хвоста (по Тому).

Б) Двумерный случай

Разложение потенциала V в ряд Тейлора имеет вид

$$V(q_1, q_2) = c^{(0)} + c_1^{(1)}q_1 + c_2^{(1)}q_2 + c_{11}^{(2)}q_1^2 + (c_{12}^{(2)} + c_{21}^{(2)})q_1q_2 + \\ + c_{22}^{(2)}q_2^2 + c_{11}^{(3)}q_1^3 + c_{112}^{(3)}q_1^2q_2 + \dots, \quad (5.139)$$

где по предположению

$$c_{12}^{(2)} = c_{21}^{(2)}. \quad (5.140)$$

Смещая координату V , можно снова добиться того, чтобы

$$c^{(0)} = 0. \quad (5.141)$$

Кроме того, допустим, что мы имеем дело с локальным экстремумом, т. е.

$$\left. \frac{\partial V}{\partial q_1} \right|_{q_1, q_2=0} = 0 \quad (5.142)$$

и

$$\left. \frac{\partial V}{\partial q_2} \right|_{q_1, q_2=0} = 0. \quad (5.143)$$

Таким образом, главные члены (5.139) имеют вид

$$V_{tr} = b_{11}q_1^2 + 2b_{12}q_1q_2 + b_{22}q_2^2. \quad (5.144)$$

Как известно из математики, при условии $V_{tr} = \text{const}$ (5.144) определяет гиперболу, параболу или эллипс. Линейным ортогональным преобразованием координат q_1 и q_2 можно привести ось координатной системы к главной оси эллипса и т. д. Таким образом, с помощью преобразования

$$\begin{aligned} q_1 &= A_{11}u_1 + A_{12}u_2, \\ q_2 &= A_{21}u_1 + A_{22}u_2 \end{aligned} \quad (5.145)$$

мы приводим V_{tr} к виду

$$V_{tr} = \mu_1 u_1^2 + \mu_2 u_2^2. \quad (5.146)$$

Если применить преобразование (5.145) не только к редуцированной форме V (5.144), но и к полной форме (5.139) (однако при $c^{(0)} = c_1^{(1)} = c_2^{(1)} = 0$), то получим новое выражение для потенциала в форме

$$V = \mu_1 u_1^2 + \mu_2 u_2^2 + \tilde{c}_{111} u_1^3 + \tilde{c}_{112} u_1^2 u_2 + \dots \quad (5.147)$$

Это выражение позволяет снова рассмотреть неустойчивости наиболее просто. Неустойчивости возникают при изменении

внешних параметров, когда μ_1 или μ_2 , или оба эти коэффициента обращаются в нуль.

Возьмем сначала случай $\mu_1 = 0$ и $\mu_2 > 0$, или, другими словами, случай, когда система теряет устойчивость по одной координате. Обозначим «неустойчивую» координату через x , а «устойчивую» — через y .

Тогда V принимает вид

$$V = V_1(x) + \mu_2 y^2 + yg(x) + y^2 h(x) + y^3 f(x), \quad (5.148)$$

где, в частности,

$$V_1(x) \sim x^3 + \text{Члены высших порядков}, \quad (5.149)$$

$$g(x) \sim x^2 + \text{Члены высших порядков},$$

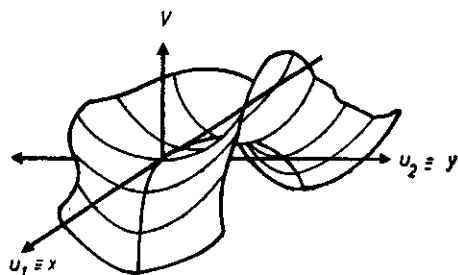
$$h(x) \sim x + \text{Члены высших порядков},$$

$$f(x) \sim 1 + \text{Члены высших порядков}. \quad (5.150)$$

Поскольку мы исследуем ближайшую окрестность точки неустойчивости $x=0$, то можем считать x малым и даже столь малым, что

$$h \ll \mu_2. \quad (5.151)$$

Кроме того, рассмотрение окрестности точки $y=0$ можно ограничить так, чтобы пренебречь членами, содержащими высокие



Фиг. 5.23. Потенциал (5.147) в случае $\mu_1 < 0$ имеет вид деформированного седла (ср. фиг. 5.24).

степени y . Типичная ситуация изображена на фиг. 5.23 и 5.24. Благодаря члену $g(x)$ в (5.148) y -минимум можно сдвинуть по оси y . Для целей дальнейшего обсуждения запишем главные члены (5.148) в виде

$$\hat{\mu}_2 \left(y^2 + \hat{\mu}_2^{-1} g y + \frac{1}{4} \hat{\mu}_2^{-2} g^2 \right) - \frac{1}{4} \hat{\mu}_2^{-2} g^2(x), \quad (5.152)$$

где добавлен и вычтен квадратичный член и использовано обозначение

$$\hat{\mu}_2 = \mu_2 + h(x). \quad (5.153)$$

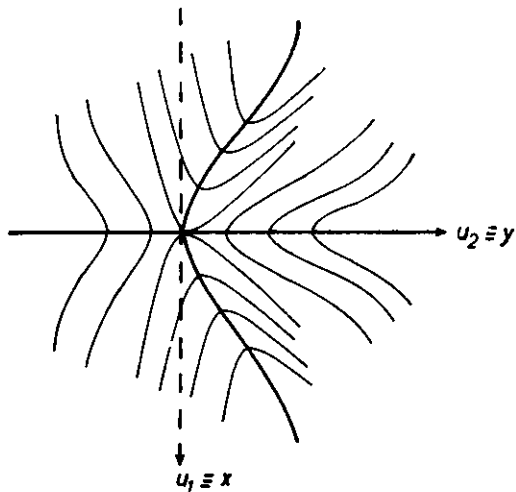
Введение новой координаты

$$\tilde{y} = y + \underbrace{\mu_2^{-1}g}_{-y^{(0)}} \frac{1}{2} \equiv y - y^{(0)} \quad (5.154)$$

позволяет привести (5.148) к виду [ср. (5.151)]

$$V = V_1(x) - \frac{1}{4} \hat{\mu}_2^{-2} g^2(x) + \hat{\mu}_2 \tilde{y}^2 + \text{Члены высшего порядка.} \quad (5.155)$$

При условии что члены высшего порядка достаточно малы, (5.155) представляет собой разложение потенциала, где один



Фиг. 5.24. Эквипотенциальные линии потенциала, изображенного на фиг. 5.23.

член зависит только от x , а другой — только от \tilde{y} . Рассмотрим теперь, как преобразование (5.154) влияет на члены высшего порядка. Возьмем, например, следующий член разложения третьей степени. Он имеет вид

$$f(x)(\tilde{y} + y^{(0)})^3 \equiv f(x)\tilde{y}^3 + 3f(x)\tilde{y}^2 y^{(0)} + 3f(x)\tilde{y} y^{(0)2} + f(x)y^{(0)3}. \quad (5.156)$$

Поскольку $y^{(0)} \sim g(x)$, а $g(x)$ — малая величина, члены более высокого порядка (в низшем приближении по y) дают вклад

$$\sim f(x)g^3(x).$$

Так как (5.156) содержит $g^3(x)$, а g — малая величина, мы находим, что члены более высокого порядка дают поправку более высокого порядка к части потенциала V , зависящей от x .

Конечно, если основные члены зависящей от x части потенциала равны нулю, этот член может оказаться важным. Однако мы можем привлечь метод итераций, вновь применяя процедуру (5.148) к (5.155) с включенными туда высшими членами, причем каждый последующий член дает уменьшающуюся по важности поправку. Такая итерационная процедура может быть утомительной, но, как мы убедились, возможно по крайней мере в принципе разложить V на часть, зависящую от x , и часть, зависящую от y (или \tilde{y}), при условии пренебрежения членами высшего порядка в рамках хорошо определенной процедуры.

Рассмотрим теперь проблему в совершенно общем виде без использования итерационной процедуры. Положим в потенциале $V(x, y)$

$$y = y^{(0)} + \tilde{y}. \quad (5.157)$$

Потребуем теперь, чтобы $y^{(0)}$ выбиралось с условием, что

$$V(x, y^0 + \tilde{y}) \quad (5.158)$$

имеет минимум при $\tilde{y} = 0$, или, другими словами, что

$$\left. \frac{\partial V}{\partial \tilde{y}} \right|_{\tilde{y}=0} = 0. \quad (5.159)$$

Это условие можно рассматривать как уравнение для $y^{(0)}$ вида

$$W(x, y^{(0)}) = 0. \quad (5.160)$$

Для любого заданного x мы можем, таким образом, определить $y^{(0)}$:

$$y^{(0)} = y^{(0)}(x). \quad (5.161)$$

Для малых $\tilde{y} \neq 0$ используем разложение

$$V(x, y^{(0)} + \tilde{y}) = \tilde{V}_1(x) + \tilde{y}^2 \tilde{\mu}_2 + \tilde{y}^3 \tilde{f}(x) + \dots, \quad (5.162)$$

где линейный член отсутствует из-за условия (5.159). Проведенный выше более явный анализ [ср. (5.155)] показал, что в окрестности $x = 0$ потенциал сохраняет устойчивость по координате y . Другими словами, используя представление

$$\tilde{\mu}_2 = \mu_2 + \tilde{h}(x), \quad (5.163)$$

можно удостовериться в том, что (5.163) остается положительным. Таким образом, единственная неустойчивость, которую следует обсудить, связана с $V_1(x)$, и мы снова возвращаемся к одномерному случаю, рассмотренному выше.

Рассмотрим теперь *двумерный случай* $\mu_1 = 0$, $\mu_2 = 0$. Первыми, не исчезающими в общем случае членами разложения

потенциала являются

$$V(x, y) = \bar{c}_{111}^{(3)}x^3 + 3\bar{c}_{112}^{(3)}x^2y + 3\bar{c}_{122}^{(3)}xy^2 + \bar{c}_{222}^{(3)}y^3 + \dots \quad (5.164)$$

Само выражение (5.164) мы можем не обсуждать; важно лишь что один или несколько коэффициентов $c^{(3)}$ не равны нулю. Совершенно аналогично одномерному случаю можно предположить, что для формы (5.164) определенные возмущения могут стать опасными. В общем случае такие возмущения даются членами со степенями, меньшими 3. Таким образом, развертка (5.164) наиболее общего вида получается при добавлении к (5.164) членов

$$b_{11}x^2 + 2b_{12}xy + b_{22}y^2 + a_1x + a_2y \quad (5.165)$$

(где уже опущен постоянный член).

Опишем теперь качественно, как оборвать разложения (5.164) и (5.165) с помощью линейного преобразования вида

$$\begin{aligned} x &= A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + B_1, \\ y &= A_{21}x_1 + A_{22}x_2 + B_2. \end{aligned} \quad (5.166)$$

Разложение (5.164) можно привести к простым формам, соответствующим эллипсам и т. д., при соответствующем выборе A . Выбирая подходящее B , можно преобразовать квадратичные или билинейные члены (5.165) к более простому виду. Наиболее общая форма (5.164) и (5.165) с постоянным членом V_0 содержит 10 констант. С другой стороны, преобразование (5.166) вводит 6 констант, которые вместе с $c^{(0)}$ составляют 7 констант. При вычитании из полного числа возможных констант числа 7 остаются 3 константы, которые еще надо определить. Это могут быть коэффициенты в (5.165). После некоторых преобразований получаем три основные формы, которые, следуя Тому, мы обозначим следующим образом.

*Гиперболическая омбилическая точка*¹⁾

$$V = x_1^3 + x_2^3 + \omega x_1x_2 - ix_1 - vx_2, \quad (5.167)$$

Эллиптическая омбилическая точка

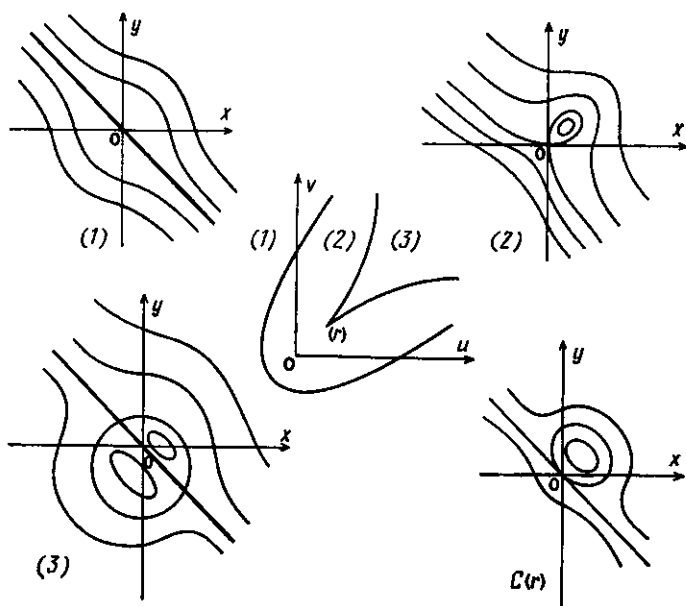
$$V = x_1^3 - 3x_1x_2^2 + \omega(x_1^2 + x_2^2) - ix_1 - vx_2. \quad (5.168)$$

Параболическая омбилическая точка

$$V = x_1^2x_2 + \omega x_2^2 + tx_2^3 - ix_1 - vx_2 + \frac{1}{4}(x_1^4 + x_2^4). \quad (5.169)$$

¹⁾ Подробнее об омбилических точках см.: Брёкер Г., Ландер Л. Дифференцируемые ростки и катастрофы. — М.: Мир, 1977. — Прим. ред.

В качестве примера параболической омбилической точки см. фиг. 5.25, где показаны сечения потенциальной поверхности при различных значениях параметров u , v , t . Видно, что при $t < 0$ параболическая омбилическая точка переходит в эллиптическую, в то время как при $t > 0$ получается гиперболическая омбилическая точка. И снова для каждого набора u , v , ω , t



Фиг. 5.25. Универсальная развертка гиперболической омбилической точки (в центре), окруженная локальными потенциалами в областях 1, 2 и 3 и в точке заострения C (по Тому).

минимумы потенциальной кривой различаются по глубине, причем один из них (или одновременно несколько) оказывается самым глубоким и определяет некоторое состояние системы. Поскольку при изменении параметров u , v , ω , t один наиболее глубокий минимум может заменяться другим, пространство (u, v, ω, t) разделено различными гиперповерхностями на подпространства. Здесь следует сделать замечание относительно того, что в (5.169) мы оставили член с четвертой степенью, а это, как кажется, находится в противоречии с нашим общим рассмотрением на стр. 164, где утверждалось, что важными могут быть лишь члены со степенями, меньшими, чем степень исходного сингулярного члена. Необходимость такого учета заключается в том, что развертка (5.169) включает в себя члены

tx_2^3 , которые имеют ту же степень, что и исходные, например x_1^3 или $x_1^2x_2$. Если теперь искать минимум V

$$\frac{\partial}{\partial x_2} V = 0 \quad (5.170)$$

и взять $u = v = 0$, это приведет к уравнению

$$x_1^2 + 2\omega x_2 + 3tx_2^2 = 0. \quad (5.171)$$

При $t \rightarrow 0$ по крайней мере одно решение квадратичного уравнения (5.171) стремится к бесконечности. Это противоречит нашему исходному допущению о том, что мы рассматриваем лишь непосредственную окрестность минимума $x_1 = x_2 = 0$. Если в соответствии с (5.169) учесть члены четвертой степени, то нули (5.171) не уходят из окрестности этого минимума.

В) Общий n -мерный случай

Допустим с самого начала, что потенциальная функция, зависящая от координат $q_1 \dots q_n$, разложена в ряд Тейлора

$$V(q_1, \dots, q_n) = c^{(0)} + \sum_I c_I^{(1)} q_I + \sum_{II'} c_{II'}^{(2)} q_I q_{I'} + \\ + \sum_{III''} c_{III''}^{(3)} q_I q_{I'} q_{I''} + \dots, \quad (5.172)$$

где первый коэффициент равен

$$c_I^{(1)} = \left. \frac{\partial V}{\partial q_I} \right|_0 \quad (5.173)$$

и

$$c_{II'}^{(2)} = \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 V}{\partial q_I \partial q_{I'}} \right|_0. \quad (5.174)$$

Пусть минимум V лежит в точке $q_I = 0$, т. е.

$$c_I^{(1)} = \left. \frac{\partial V}{\partial q_I} \right|_{q=0}. \quad (5.175)$$

Поскольку производные (взяты со знаком минус) от V по q_I дают силы $F_I = -\partial V / \partial q_I$, то в равновесном состоянии силы, действующие на «частицу», отсутствуют. Как и прежде, от $c^{(0)}$ можно избавиться и тогда благодаря (5.175) основными членами в (5.172) будут

$$\sum_{II'} c_{II'}^{(2)} q_I q_{I'}, \quad (5.176)$$

где c всегда можно выбрать в симметричной форме

$$c_{II'}^{(2)} = c_{I'I}^{(2)}. \quad (5.177)$$

Это дает возможность осуществить преобразование к главным осям

$$q_j = \sum A_{jk} u_k. \quad (5.178)$$

Из линейной алгебры известно, что в получаемой при этом квадратичной форме

$$\sum_j \mu_j \mu_j^2 \quad (5.179)$$

фигурируют только действительные значения μ_j . При условии что все $\mu_j > 0$, состояние $q = 0$ является устойчивым. Допустим теперь, что при изменении внешних параметров достигается состояние, в котором определенный набор μ обращается в нуль. Выберем такую нумерацию, чтобы эти μ оказались в числе первых $j = 1, \dots, k$, так чтобы

$$\mu_1 = 0, \quad \mu_2 = 0, \quad \dots, \quad \mu_k = 0. \quad (5.180)$$

Таким образом, имеются две группы координат — одна, обозначаемая индексами от 1 до k , включает координаты, по которым потенциал ведет себя критическим образом, другая, с индексами $k+1, \dots, n$, объединяет координаты, по которым критическое поведение отсутствует. Для простоты обозначим координаты так, чтобы легче различать эти два набора:

$$\begin{aligned} u_1, \dots, u_k &= x_1, \dots, x_k, \\ u_{k+1}, \dots, u_n &= y_1, \dots, y_{n-k}. \end{aligned} \quad (5.181)$$

В этих обозначениях исследуемый потенциал сводится к виду

$$\begin{aligned} V = & \sum_{j=1}^{n-k} \mu_j y_j^2 + \sum_{j=1}^{n-k} y_j g_j(x_1, \dots, x_k) + V_1(x_1, \dots, x_k) + \\ & + \sum_{j,j'=1}^{n-1} y_j y_{j'} h_{jj'}(x_1, \dots, x_k) + \end{aligned}$$

+ Члены более высокого порядка по y_1, \dots с коэффициентами, зависящими от x_1, \dots, x_k . (5.182)

Первая задача заключается в том, чтобы избавиться от членов, линейных по y_j , чего можно достичь следующим образом. Введем новые координаты

$$y_s = y_s^{(0)} + \tilde{y}_s, \quad s = 1, \dots, n; \quad (5.183)$$

$y_s^{(0)}$ определены тем требованием, что для $y_s = y_s^{(0)}$ потенциал достигает минимума

$$\left. \frac{\partial V}{\partial y_s} \right|_{y^{(0)}} = 0. \quad (5.184)$$

Выраженный в новых координатах \tilde{y}_s потенциал V принимает вид

$$V = \tilde{V}(x_1, \dots, x_k) + \sum_{j,j'} \tilde{y}_j \tilde{y}_{j'}(x_1, \dots, x_k) +$$

$$+ \text{Члены более высокого порядка } \tilde{y},$$

$$h_{j,j'} + \delta_{j,j'} \mu_j + \underbrace{\tilde{h}_{j,j'}(x_1, \dots, x_k)}_{\text{Малый член}}, \quad (5.185)$$

где $\tilde{h}_{j,j'}$ состоит из $\mu_j > 0$, возникающих из первого члена в (5.182), и поправочных членов, зависящих от x_1, \dots, x_k . Конечно, выражение (5.185) можно получить в гораздо более развернутом и детальном виде, однако, чтобы понять, как осуществляется вся процедура, оказывается достаточно сравнить этот случай с двумерным (стр. 169—173). Выражение (5.185) содержит члены более высокого (чем второй) порядка по \tilde{y} . Ограничимся пока рассмотрением устойчивой области по оси \tilde{y} . Мы видим, что V разбивается на критическую часть \tilde{V} , зависящую только от x_1, \dots, x_k , и некритическую часть, зависящую от y и x . Поскольку все критическое поведение обусловлено первым членом, зависящим от k координат x_1, \dots, x_k , проблема неустойчивости сводится к решению k -мерной задачи, где обычно k много меньше n . В этом и заключается фундаментальный результат приведенного рассмотрения.

В заключение сделаем несколько общих замечаний. Если мы, как и всюду, в гл. 5 рассматриваем полностью детерминированные процессы, то в этом случае система не может перескочить из одного минимума в другой, более глубокий, если их разделяет потенциальный барьер. Мы возвратимся к этому вопросу позже, в разд. 7.3. Полезность приведенного выше рассмотрения заключается в основном в выяснении того, как изменения параметров влияют на бифуркацию. Как станет ясно позднее, собственные значения μ_j в (5.182) идентичны (мнимым) частотам, фигурирующим в линеаризованных уравнениях для u . Поскольку $(c_{jj}^{(2)})$ — действительная симметричная матрица, в соответствии с линейной алгеброй μ_j действительны. Следовательно, осцилляции отсутствуют и критическими модами являются лишь *мягкие моды*.

Случайность и необходимость

РЕАЛЬНЫЙ МИР НУЖДАЕТСЯ И В ТОМ И В ДРУГОМ

6.1. Уравнения Ланжевена: пример

Рассмотрим такой случай. Игрок ведет по полю футбольный мяч. Скорость мяча v изменяется по двум причинам. Из-за трения о траву движение мяча замедляется, с другой стороны, игрок увеличивает скорость мяча случайными ударами по нему. Уравнение движения мяча определяется законом Ньютона: Масса · Ускорение = Сила, т. е.

$$m\dot{v} = F. \quad (6.1)$$

Определим явный вид F следующим образом. Предположим, как это обычно делается, что сила трения пропорциональна скорости. Обозначим постоянную трения через γ , так что сила трения равна $-\gamma v$. Знак минус учитывает, что сила трения направлена противоположно скорости частицы. Рассмотрим теперь эффект действия одиночных ударов игрока по мячу. Поскольку удар длится лишь очень короткое время, представим соответствующую силу δ -функцией с константой φ :

$$F = \varphi \delta(t - t_j), \quad (6.2)$$

где t_j — момент удара. Как этот удар изменяет скорость, можно определить следующим образом. Подставим (6.2) в (6.1):

$$m\dot{v} = \varphi \delta(t - t_j). \quad (6.3)$$

Возьмем интеграл по малому временному интервалу, внутри которого находится момент $t = t_j$,

$$\int_{t_j-0}^{t_j+0} m\dot{v} d\tau = \int_{t_j-0}^{t_j+0} \varphi \delta(t - t_j) d\tau. \quad (6.4)$$

После интегрирования получаем

$$mv(t_j + 0) - mv(t_j - 0) \equiv m \Delta v = \varphi. \quad (6.5)$$

Выражение (6.5) означает, что в момент t_j скорость v внезапно возрастает на величину φ/m . Полная сила, приложенная игро-

ком, получается путем суммирования (6.2) по последовательности j ударов:

$$\Phi(t) = \varphi \sum_j \delta(t - t_j). \quad (6.6)$$

Чтобы перейти к реальным задачам физики и многих других дисциплин, слегка видоизменим наше рассмотрение в одном пункте (что, кстати, справедливо и по отношению к футболу). Импульсы передаются не только в одном направлении, но случайным образом также и в обратном направлении. Поэтому заменяем Φ , задаваемое (6.6), функцией

$$\Psi(t) = \varphi \sum_j \delta(t - t_j) (\pm 1)_j, \quad (6.7)$$

в которой последовательность знаков плюс и минус случайная в том же смысле, в каком ранее в этой книге рассматривалось последовательное бросание монеты. Принимая во внимание как непрерывно действующую силу трения со стороны футбольного поля, так и случайные толчки футболиста, запишем полное уравнение движения мяча в виде

$$m\dot{v} = -\gamma v + \Psi(t)$$

или после деления на m

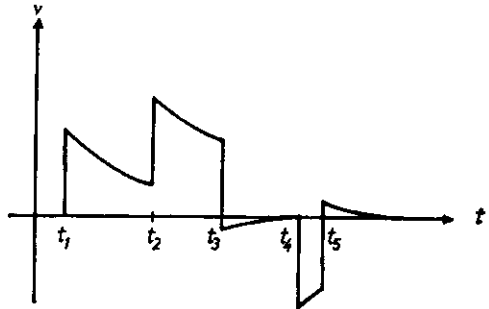
$$\dot{v} = -\alpha v + F(t), \quad (6.8)$$

где

$$\alpha = \gamma/m \quad (6.9a)$$

и

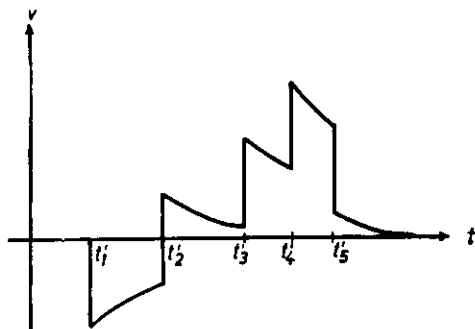
$$F(t) \equiv \frac{1}{m} \Psi = \frac{\varphi}{m} \sum_j \delta(t - t_j) (\pm 1)_j. \quad (6.9b)$$



Фиг. 6.1. Изменения скорости v благодаря толчкам (случайной силе) и силе трения.

Операция статистического усреднения требует некоторого размышления. В одном эксперименте, например в игре в футбол, частицу (мяч) подталкивают в определенные моменты времени t_j (вперед или назад), так что в течение эксперимента частица движется по определенной траектории. На фиг. 6.1 показано изменение скорости со временем благодаря импульсным воздействиям (резкие скачки) и благодаря силе трения (непре-

рывное изменение в промежутке между скачками). Во втором эксперименте частица испытывает толчки уже в другие моменты времени. Последовательность направлений толчков может быть другой, так что получится другая траектория (ср. фиг. 6.2). Поскольку последовательности событий по времени и направлениям случайные, каждую отдельную траекторию предсказать нельзя, можно предсказать лишь среднюю траекторию. Такие усреднения по различным последовательностям времен и на-



Фиг. 6.2. То же, что и на фиг 6.1, но для другой реализации.

правлений импульсов будут произведены далее для различных задач. Представим себе, что мы усредняем F по случайной последовательности знаков плюс и минус. Поскольку они встречаются с равной вероятностью, сразу же получаем

$$\langle F(t) \rangle = 0. \quad (6.10)$$

Возьмем далее F в момент t , умножим на F в момент t' и усредним это произведение по моментам толчков и их направлениям.

Вычисление этого случая оставляем читателю в качестве упражнения (см. конец этого параграфа). Считая процесс пуассоновским (ср. разд. 2.12), находим корреляционную функцию

$$\langle F(t) F(t') \rangle = \frac{\Phi^2}{m^2 t_0} \delta(t - t') = C \delta(t - t'). \quad (6.11)$$

Уравнение (6.8) вместе с (6.10) и (6.11) описывает хорошо известный физический процесс, называемый броуновским движением (гл. 4). При этом большая частица, погруженная в жидкость, испытывает случайные толчки со стороны сравнительно малых частиц жидкости, совершающих тепловое движение. Как будет показано далее в этой книге (см. гл. 8), теория броуновского движения играет фундаментальную роль не только в механике, но и во многих других областях физики и других дисциплинах. Дифференциальное уравнение (6.8) решается просто методом вариации постоянной. Решение имеет вид

$$v(t) = \int_0^t e^{-\alpha(t-\tau)} F(\tau) d\tau + v(0) e^{-\alpha t}. \quad (6.12)$$

Пренебрежем эффектами «включения». Поэтому последний член (6.11), который быстро затухает, исключим из рассмотрения.

Вычислим теперь среднюю кинетическую энергию, определяемую выражением

$$\frac{m}{2} \langle v^2 \rangle. \quad (6.13)$$

Скобки, как и прежде, обозначают усреднение по всем толчкам. Подставляя (6.12) в (6.13), получаем

$$\frac{m}{2} \left\langle \int_0^t e^{-\alpha(t-v)} F(v) dv \int_0^t e^{-\alpha(t-\tau')} F(\tau') d\tau' \right\rangle. \quad (6.14)$$

Поскольку усреднение проводится независимо от интегрирования, можно, поменяв местами операции усреднения и интегрирования, провести сначала усреднение. Используя (6.11), находим для (6.14)

$$\frac{m}{2} \langle v^2 \rangle = \frac{m}{2} \int_0^t \int_0^t dv d\tau' e^{-2\alpha t + \alpha(v+\tau')} \delta(v - \tau') C. \quad (6.15)$$

Благодаря δ -функции двойной интеграл сводится к однократному, который немедленно вычисляется, что дает

$$\frac{m}{2} \langle v^2 \rangle = \frac{m}{2} C \frac{1}{2\alpha} (1 - e^{-2\alpha t}). \quad (6.16)$$

Поскольку нас интересует стационарное состояние, рассмотрим столь большие времена t , чтобы в (6.16) можно было опустить экспоненциальный член. Тогда получим

$$\frac{m}{2} \langle v^2 \rangle = \frac{m^2 C}{4\gamma} \left(= \frac{mC}{4\alpha} \right). \quad (6.17)$$

Теперь воспользуемся фундаментальным выводом Эйнштейна. Можно считать, что частица, погруженная в жидкость, находится в тепловом равновесии с окружающей средой. Частица, совершающая одномерное движение, обладает одной степенью свободы, поэтому в соответствии с теоремой равнораспределения термодинамики она должна иметь среднюю энергию $\frac{1}{2} k_B T$, где k_B — постоянная Больцмана, а T — абсолютная температура:

$$\frac{m}{2} \langle v^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T. \quad (6.18)$$

Сравнение этого результата с (6.17) приводит к соотношению

$$C = \frac{2\gamma}{m^2} k_B T. \quad (6.19)$$

Напомним, что постоянная C фигурирует в корреляционной функции флуктуирующих сил (6.11). Поскольку в выражение для C входит постоянная затухания γ , корреляционная функция оказывается связанной с затуханием, или, другими словами, с диссипацией в системе. Соотношение (6.19) представляет собой один из простейших примеров флуктуационно-диссипационной теоремы: величина флуктуации ($\sim C$) определяется скоростью диссипации ($\sim \gamma$). Существенный фактор пропорциональности — абсолютная температура. В следующем разделе мы получим (6.8), опираясь не на правдоподобные рассуждения, а исходя из первых принципов.

Как уже указывалось выше, мы можем предсказывать только средние величины, а не индивидуальную траекторию. Одно из наиболее важных средних — двухвременная корреляционная функция

$$\langle v(t) v(t') \rangle, \quad (6.20)$$

которая определяет, как быстро скорость забывает свое прошлое, или, другими словами, дает меру времени, которое требуется, чтобы скорость существенно изменила свое значение от первоначального, заданного в момент t' значения. Для вычисления (6.20) подставим v из (6.12), именно:

$$v(t) = \int_0^t e^{-\alpha(t-\tau)} F(\tau) d\tau, \quad (6.21)$$

в (6.20), что дает

$$\int_0^t \int_0^{t'} e^{-\alpha(t-\tau)} e^{-\alpha(t'-\tau')} \langle F(\tau) F(\tau') \rangle d\tau d\tau'. \quad (6.22)$$

С учетом (6.11) это выражение сводится к виду

$$C \int_0^t \int_0^{t'} e^{-\alpha(t-\tau)-\alpha(t'-\tau')} \delta(\tau - \tau') d\tau d\tau'. \quad (6.23)$$

Интеграл вычисляется просто. Для $t > t'$ получаем

$$\frac{C}{2\alpha} \{e^{-\alpha(t-t')} - e^{-\alpha(t+t')}\}. \quad (6.24)$$

Если рассматривать стационарный процесс, то t и t' можно считать большими, но разность $t - t'$ малой. Это приводит к окончательному результату

$$\langle v(t) v(t') \rangle = \frac{C}{2\alpha} e^{-\alpha|t-t'|}. \quad (6.25)$$

Таким образом, скорость забывает прошлое за время $T = 1/\alpha$. Очевидно, что в случае $\alpha = 0$ в (6.25) возникает расходимость. Флуктуации становятся очень большими, иначе говоря, мы имеем дело с критическими флуктуациями. Обобщая (6.20), можно определить корреляционные функции более высокого порядка, зависящие от нескольких моментов времени

$$\langle v(t_n) v(t_{n-1}) \dots v(t_1) \rangle. \quad (6.26)$$

Для вычисления этих корреляционных функций тем же способом, что и ранее, подставим (6.21) в (6.26). Теперь мы должны знать корреляционные функции

$$\langle F(\tau_n) F(\tau_{n-1}) \dots F(\tau_1) \rangle. \quad (6.27)$$

Чтобы вычислить (6.27), необходимо ввести дополнительные гипотезы относительно функции F . Во многих практических случаях можно считать, что случайные силы F распределены по гауссову закону (разд. 4.4). В этом случае

$$\begin{aligned} \langle F(\tau_n) F(\tau_{n-1}) \dots F(\tau_1) \rangle &= 0 \quad \text{для нечетного } n, \\ \langle F(\tau_n) F(\tau_{n-1}) \dots F(\tau_1) \rangle &= \\ &= \sum_P \langle F(\tau_{\lambda_1}) F(\tau_{\lambda_2}) \rangle \dots \langle F(\tau_{\lambda_{n-1}}) F(\tau_{\lambda_n}) \rangle \quad \text{для четного } n, \end{aligned} \quad (6.28)$$

где \sum_P — сумма по всем перестановкам $(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ чисел $(1, \dots, n)$.

Упражнения к разд. 6.1

1) Вычислите левую часть (6.11) в предположении, что t_j — пуассоновский процесс.

Указание:

$$\langle \delta(t - t_j) \delta(t' - t_j) \rangle = \frac{1}{t_0} \delta(t - t').$$

2) Формула (6.28) дает прекрасный пример важности кумулянтов. Используя (4.101) и (4.102), докажите следующие соотношения между моментами $m_n(t_1, \dots, t_n)$ и кумулянтами $k_n(t_1, \dots, t_n)$:

$$m_1(t_1) = k_1 t_1,$$

$$m_2(t_1, t_2) = k_2(t_1, t_2) + k_1(t_1) k_1(t_2),$$

$$m_3(t_1, t_2, t_3) = k_3(t_1, t_2, t_3) + 3 \{k_1(t_1) k_2(t_2, t_3)\}_s + k_1(t_1) k_1(t_2) k_1(t_3),$$

$$\begin{aligned} m_4(t_1, t_2, t_3, t_4) &= k_4(t_1, t_2, t_3, t_4) + 3 \{k_2(t_1, t_2) k_2(t_3, t_4)\}_s + \\ &+ 4 \{k_1(t_1) k_3(t_2, t_3, t_4)\}_s + 6 \{k_1(t_1) k_1(t_2) k_2(t_3, t_4)\}_s + \\ &+ k_1(t_1) k_1(t_2) k_1(t_3) k_1(t_4), \end{aligned} \quad (У. 1)$$

где $\{\dots\}_s$ — симметризованные произведения. Эти соотношения можно использовать для записи (6.28) через кумулянты. Получаемое в результате выражение более просто и компактно.

3) Получите (6.28) с помощью (4.101) и (4.105) ($k_1 = 0$).

6.2*. Резервуары и случайные силы

В предыдущем разделе мы ввели случайную силу F с ее свойствами, а также силу трения, используя правдоподобные рассуждения. Покажем теперь, как обе эти величины можно получить последовательно, исходя из микроскопической физической модели. Проведем вывод так, чтобы было ясно, как его распространить на более общие случаи, не обязательно ограниченные рамками физики. Вместо свободной частицы рассмотрим гармонический осциллятор, т. е. точечную массу, прикрепленную к пружине. Смещение точечной массы от равновесного положения обозначим через q . Обозначив постоянную Гука через k , запишем уравнение движения гармонического осциллятора ($v = \dot{q}$):

$$m\ddot{q} = -kq. \quad (6.29)$$

Введем далее обозначение

$$\frac{k}{m} = \omega_0^2, \quad (6.30)$$

где ω_0 — частота осциллятора. Тогда уравнение движения принимает вид

$$\ddot{q} = -\omega_0^2 q. \quad (6.31)$$

Уравнение (6.31) можно заменить системой двух других уравнений, если сначала положить

$$\dot{q} = p, \quad (6.32)$$

а затем в (6.31) заменить \dot{q} на p , что дает

$$\dot{p} = -\omega_0^2 q \quad (6.33)$$

(ср. также разд. 5.2). Преобразуем теперь пару уравнений (6.32) и (6.33) в пару комплексно-сопряженных уравнений. Для этого введем новую переменную $b(t)$ и комплексно-сопряженную ей величину $b^*(t)$, которые связаны с p и q соотношениями

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{\omega_0} q + ip/\sqrt{\omega_0}) = b \quad (6.34)$$

и

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{\omega_0} q - ip/\sqrt{\omega_0}) = b^*. \quad (6.35)$$

Умножая (6.32) на $\sqrt{\omega_0}$ и (6.33) на $i/\sqrt{\omega_0}$ и складывая получающиеся уравнения, после элементарного преобразования имеем

$$\dot{b} = -i\omega_0 b,$$

где

$$\dot{b} \equiv \frac{db}{dt}. \quad (6.36)$$

Подобным же образом, вычитая (6.33) из (6.32), получаем уравнение, комплексно-сопряженное (6.36).

После этих предварительных замечаний перейдем к нашей основной задаче, а именно построим реалистическую модель, которая описывает диссипацию и флуктуации. Причина, по которой мы не вводим силу трения $-\gamma v$ с самого начала, заключается в следующем. Все фундаментальные (микроскопические) уравнения движения частиц инвариантны по отношению к обращению времени, т. е. движение полностью обратимо. В исходных уравнениях не может фигурировать сила трения, которая нарушает инвариантность по отношению к обращению времени. Поэтому мы будем исходить из обычных уравнений механики, инвариантных по отношению к обращению времени. Как уже отмечалось ранее в связи с броуновским движением, большая частица взаимодействует со многими другими, малыми частицами в жидкости. Эти частицы действуют как «резервуар» или «термостат»; они поддерживают среднюю кинетическую энергию большой частицы равной $\frac{1}{2}k_B T$ (в расчете на одну степень свободы). В нашей модели мы моделируем эффект «малых» частиц набором большого числа гармонических осцилляторов, действующих на «большую» частицу, которую мы описываем как осциллятор с помощью (6.36) и комплексно-сопряженного уравнения. Предполагается, что осцилляторы резервуара имеют различные частоты ω из интервала $\Delta\omega$ (этот интервал называется также шириной полосы частот). По аналогии с (6.34) и (6.35) используем для осцилляторов резервуара комплексные амплитуды B и B^* , которые зависят от индекса ω . В нашей модели мы описываем совместные действия B на «большой» осциллятор суммой по отдельным осцилляторам и допускаем, что каждый из них дает линейный вклад. (Это допущение означает введение линейной связи между осцилляторами.) Таким образом, в качестве исходного используем уравнение

$$\dot{b} = -i\omega_0 b + i \sum_{\omega} g_{\omega} B_{\omega}. \quad (6.37)$$

Коэффициенты g_{ω} задают степень связи между рассматриваемым осциллятором и другими осцилляторами. В свою очередь

«большой» осциллятор воздействует на другие осцилляторы, что описывается уравнением

$$\dot{B}_\omega = -i\omega B_\omega + ibg_\omega. \quad (6.38)$$

(Читателей, интересующихся выводом (6.37) и (6.38) в рамках обычного аппарата механики, мы отсылаем к упражнениям.) Решение (6.38) состоит из двух частей, именно из решения однородного уравнения (где $ibg_\omega = 0$) и частного решения неоднородного уравнения. Легко показать, что решение имеет вид

$$B_\omega(t) = e^{-i\omega t} B_\omega(0) + i \int_0^t e^{-i\omega(t-\tau)} b(\tau) g_\omega d\tau, \quad (6.39)$$

где $B_\omega(0)$ — начальное значение (при $t=0$) амплитуды осциллятора B_ω . Подставляя (6.39) в (6.37), находим уравнение для \dot{b} :

$$\dot{b}(t) = -i\omega_0 b(t) - \int_0^t \sum_\omega g_\omega^2 e^{-i\tilde{\omega}(t-\tau)} b(\tau) d\tau + i \sum_\omega g_\omega e^{-i\tilde{\omega}t} B_\omega(0), \quad (6.40)$$

B_ω входит лишь в последний член (6.40). Вводя новую переменную

$$b = \tilde{b} e^{-i\omega_0 t}, \quad (6.41)$$

избавляемся от члена $-i\omega_0 b(t)$ в (6.40). Используя далее обозначение

$$\tilde{\omega} = \omega - \omega_0, \quad (6.42)$$

запишем (6.40) в виде

$$\dot{\tilde{b}} = - \int_0^t \sum_\omega g_\omega^2 e^{-i\tilde{\omega}(t-\tau)} \tilde{b}(\tau) d\tau + i \sum_\omega g_\omega e^{-i\tilde{\omega}t} B_\omega(0). \quad (6.43)$$

Чтобы понять смысл этого уравнения, на время отождествим b со скоростью v , фигурирующей в (6.8). Интеграл линейно зависит от b , что указывает на возможную связь с релаксационным членом $-\gamma b$. Последний член в (6.43) — заданную функцию времени — отождествим со случайной силой F . Как же (6.43) привести к виду (6.8)? Очевидно, сила трения в (6.43) зависит не только от момента времени t , но также и от предыдущих моментов τ . При каких условиях эта память исчезает? Чтобы ответить на этот вопрос, перейдем от дискретных значений ω к непрерывно меняющимся величинам, т. е. заменим сумму интегралом

$$\sum_\omega g_\omega^2 e^{-i\tilde{\omega}(t-\tau)} \approx \int_{-\Delta\omega/2}^{\Delta\omega/2} g_{\omega_0+\tilde{\omega}}^2 e^{-i\tilde{\omega}(t-\tau)} d\tilde{\omega}. \quad (6.44)$$

При не слишком малых $t - \tau$ экспонента быстро осциллирует, если $\tilde{\omega} \neq 0$, так что существенный вклад в интеграл дает лишь $\tilde{\omega} \approx 0$. Предположим далее, что в окрестности ω_0 (т. е. в окрестности $\tilde{\omega} = 0$) коэффициенты связи g меняются очень слабо. Поскольку важны лишь малые значения $\tilde{\omega}$, мы можем распространить пределы интегрирования до бесконечности. Это позволяет вычислить интеграл (6.44):

$$(6.44) = 2\pi g^2 \delta(t - \tau) \quad (g = g_{\omega_0}). \quad (6.45)$$

Подставим теперь (6.45) в интеграл по времени в (6.43). Из-за δ -функции можно положить $\tilde{b}(\tau) = \tilde{b}(t)$ и вынести этот член за знак интеграла. Отметим далее, что δ -функция дает в интеграл вклад, равный $1/2$, поскольку интегрирование производится лишь до $\tau = t$. Поскольку δ -функция — симметричная функция, в пределы интегрирования попадает лишь ее половина. Таким образом, мы получаем

$$\int_0^t 2\pi g^2 \delta(t - \tau) d\tau = \pi g^2 = \kappa, \quad (6.46)$$

где κ введено как обозначение. Последний член в (6.43) обозначим через F :

$$\tilde{F} = e^{i\omega_0 t} \underbrace{\sum_{\omega} g_{\omega} e^{-i\omega t} B_{\omega}(0)}_F. \quad (6.47)$$

Используя полученные результаты, можно записать исходное уравнение (6.43) в виде

$$\dot{\tilde{b}} = -\kappa \tilde{b} + \tilde{F}(t). \quad (6.48)$$

Переходя от \tilde{b} к b [см. (6.41)], приходим к основному уравнению

$$\dot{b} = -i\omega b - \kappa b + F(t). \quad (6.49)$$

Это уравнение имеет как раз ту форму, которую мы искали. Остаются, конечно, некоторые вопросы, требующие внимательного рассмотрения. В модели разд. 6.1 мы предполагали, что сила F случайна. Как в данной модели появляется случайность? Из (6.47) видно, что единственные величины, которые могут внести сюда случайность, — это начальные значения B_{ω} . Таким образом, мы принимаем следующую точку зрения (которая очень близка к теории информации). Точные начальные значения «резервуарных» переменных не известны, однако известны их статические характеристики, например функция распределения. Следовательно, мы используем лишь некоторые

статистические свойства резервуара, характерные для начального момента времени. Прежде всего допустим, что среднее от амплитуд B_ω равно нулю, поскольку в противном случае неисчезающую часть всегда можно вычесть как детерминированную силу. Предполагается далее, что B_ω распределены по гауссову закону, что можно обосновать различными способами. В случае физической системы предположим, что осцилляторы резервуара находятся в состоянии теплового равновесия. Тогда распределение вероятностей задается больцмановским выражением (3.71): $P_\omega = \mathcal{N}_\omega e^{-E_\omega/k_B}$, где E_ω — энергия осциллятора T и $\mathcal{N}_\omega \equiv Z_\omega^{-1}$ — нормировочный множитель. Предположим, как обычно, что для гармонических осцилляторов энергия пропорциональна $p^2 + q^2$ (с соответствующими множителями), или, в нашем формализме, пропорциональна $B_\omega^* B_\omega$, т. е. $E_\omega = c_\omega B_\omega^* B_\omega$. Тогда немедленно находим, что B^* , B действительно описываются гауссовым распределением $f(B, B^*) = \mathcal{N}_\omega \exp(-c_\omega B_\omega^* B_\omega/k_B T)$. К сожалению, между частотой и энергией нет однозначного соответствия, которое позволило бы определить c_ω (этот недостаток устраняется лишь в квантовой теории).

Посмотрим теперь, обладает ли сила (6.47) свойствами (6.10) и (6.11), которые следует ожидать в соответствии с рассмотрением предыдущего раздела. Поскольку на этот раз силы сконструированы из отдельных импульсов в совершенно ином виде, вовсе не очевидно, что силы (6.47) удовлетворяют соотношениям (6.11). Проверим это. Образует

$$\langle \tilde{F}^*(t) \tilde{F}(t') \rangle \quad (6.50)$$

(отметим, что теперь силы являются комплексными величинами). Подставляя (6.47) в (6.50) и производя усреднение, получаем

$$\sum_{\tilde{\omega}} \sum_{\tilde{\omega}'} g_{\tilde{\omega}+\omega} g_{\tilde{\omega}'+\omega} e^{i\tilde{\omega}t - i\tilde{\omega}'t'} \langle B_{\tilde{\omega}+\omega}^*(0) B_{\tilde{\omega}'+\omega}(0) \rangle. \quad (6.51)$$

Предположим, что в начальный момент амплитуды B не коррелированы, т. е.

$$\langle B_\omega^*(0) B_{\omega'}(0) \rangle = N_\omega \delta_{\omega\omega'}, \quad (6.52)$$

где через N_ω обозначено $\langle B_\omega^*(0) B_\omega(0) \rangle$. Тогда (6.51) сводится к виду

$$\sum_{\tilde{\omega}} g_{\tilde{\omega}+\omega}^2 e^{i\tilde{\omega}(t-t')} \langle B_{\tilde{\omega}+\omega}^*(0) B_{\tilde{\omega}+\omega}(0) \rangle. \quad (6.53)$$

Сумма, фигурирующая в (6.53), очень напоминает сумму в левой части (6.44) с тем единственным отличием, что теперь появляется дополнительный множитель — среднее $\langle \dots \rangle$. Вычисляя

(6.33) точно так же, как мы пришли от (6.44) к (6.45), получаем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g_{\omega_0}^2 d\tilde{\omega} e^{i\tilde{\omega}(t-t')} N_{\omega_0} = g_{\omega_0}^2 N_{\omega_0} 2\pi\delta(t-t'). \quad (6.54)$$

Используя окончательный результат (6.54) вместо (6.51), получаем искомую корреляционную функцию в виде

$$\langle \tilde{F}^*(t) \tilde{F}(t') \rangle = 2\kappa N_{\omega_0} \delta(t-t'). \quad (6.55)$$

Это соотношение можно дополнить следующим:

$$\langle F^*(t) F^*(t') \rangle = \langle F(t) F(t') \rangle = 0, \quad (6.56)$$

если сделать соответствующие допущения относительно средних от начальных значений $B_{\omega}^* B_{\omega}^*$ или $B_{\omega} B_{\omega}$. Как определить константу N_{ω_0} ? При тепловой функции распределения $\sim \exp(-c_{\omega} B_{\omega}^* \times B_{\omega} / k_B T)$ N_{ω_0} должна быть пропорциональна $k_B T$. Коэффициент пропорциональности, однако, остается неопределенным или может быть определен косвенным образом через соотношение Эйнштейна (разд. 6.1). (В квантовой теории никаких трудностей не возникает. Здесь N_{ω_0} можно просто отождествить с числом тепловых квантов осциллятора ω_0 .)

В рассмотрении, проведенном выше, мы молчаливо обошли целый ряд вопросов. Прежде всего мы превратили систему уравнений, полностью инвариантных по отношению к обращению времени, в уравнение, нарушающее этот принцип. Причина этого заключается в переходе от суммы в (6.44) к интегралу и в аппроксимировании его выражением (6.45). На самом же деле происходит следующее: амплитуды осцилляторов резервуара B_{ω} расфазировываются, что приводит к быстрому затуханию члена (6.44), рассматриваемого как функция разности времен $t - \tau$. Однако остается некоторая часть подынтегрального выражения (6.40), которая очень мала, но тем не менее вместе с флуктуирующими силами (6.47) играет решающую роль в поддержании обратимости.

Другой вопрос, который мы обошли молчанием, — почему в (6.54) N имеет индекс ω_0 . Это происходит, конечно, благодаря тому, что мы вычисляли (6.53) в окрестности $\tilde{\omega} = 0$, так что учитывали лишь члены с индексом ω_0 . Мы могли бы проделать ту же самую процедуру, исходя не из (6.47), а из выражения для F , и получили бы результат, подобный (6.53), но уже с $\omega_0 = 0$. Идея, лежащая в основе нашего подхода, заключается в следующем: если решить исходное полное уравнение с учетом эффектов памяти, то собственная частота ω_0 , входящая в итерационную процедуру, каждый раз выбирает только те вклады ω , которые резонансно близки к ω_0 . Следует, однако, подчеркнуть,

что эта процедура требует дополнительного анализа, но насколько нам известно из литературы, такой анализ еще не был проведен.

В заключение можно сказать, что мы смогли вывести уравнения Ланжевена из первых принципов, принимая, однако, некоторые дополнительные допущения, выходящие за рамки чисто механического рассмотрения. Принимая далее этот формализм, можно обобщить (6.49) на случай осциллятора, взаимодействующего с резервуарами, находящимися при различных температурах и дающими различные постоянные затухания κ_j . Проведя полностью аналогичное рассмотрение, получим

$$\dot{b} = -i\omega_0 b - (\kappa_1 + \kappa_2 + \dots + \kappa_n) b + F_1 + F_2 + \dots + F_n. \quad (6.57)$$

Корреляционные функции задаются формулами

$$\langle F_j^*(t) F_k(t') \rangle = \delta_{jk} 2\kappa_j N_j \delta(t - t'). \quad (6.58)$$

Из квантовой теории следует, что при достаточно высоких температурах

$$N_j \approx \frac{k_B T}{\hbar \omega_0}. \quad (6.59)$$

Учитывая это, можно показать, что

$$\hbar \omega_0 \langle b^* b \rangle = \frac{k_B (\kappa_1 T_1 + \dots + \kappa_n T_n)}{\kappa_1 + \kappa_2 + \dots + \kappa_n}, \quad (6.60)$$

т. е. вместо температуры T теперь имеется средняя температура

$$T = \frac{\kappa_1 T_1 + \dots + \kappa_n T_n}{\kappa_1 + \dots + \kappa_n}. \quad (6.61)$$

Наиболее важно то, что средняя температура зависит от величины диссипативных постоянных ($\sim \kappa_j$), обусловленных индивидуальными термостатами. Позднее мы познакомимся с проблемами, где действительно имеет место взаимодействие системы с резервуарами, находящимися при различных температурах. В соответствии с (6.59) флуктуации должны исчезать, когда температура приближается к абсолютному нулю. Из квантовой теории, однако, известна важность квантовых флуктуаций, так что удовлетворительный вывод флуктуирующих сил может быть проведен на основе квантовой теории.

Упражнения к разд. 6.2

1) Выведите (6.37), (6.38) из гамильтониана

$$H = \omega_0 b^* b + \sum_{\omega} \omega B_{\omega}^* B_{\omega} - \sum_{\omega} g_{\omega} (b B_{\omega}^* + b^* B_{\omega}),$$

(g_ω действительно) с помощью уравнений Гамильтона $\dot{b} = -i\partial H/\partial b^*$, $\dot{B} = -i\partial H/\partial B^*$ (и их комплексно-сопряженных).

2) Выполните интегрирование в (6.23) в двух различных случаях: $t > t'$ и $t < t'$. Проверьте (6.25) для больших значений t и t' .

6.3. Уравнение Фоккера — Планка

А) Полностью детерминированное движение

Запишем уравнение

$$\dot{q}(t) = K(q(t)), \quad (6.62)$$

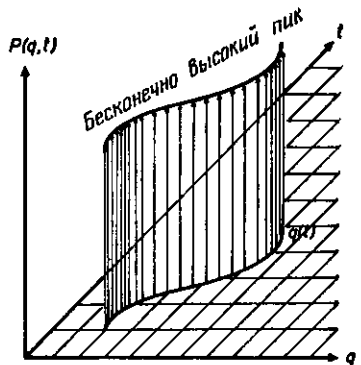
которое можно интерпретировать, как обычно мы делаем в этой книге, как уравнение передемпфированного движения частицы под действием силы K . Поскольку в этой главе мы хотим вывести уравнения, дающие возможность описывать как детерминированные, так и случайные процессы, попытаемся рассмотреть движение частицы в формализме, использующем теорию вероятности. С течением времени частица движется вдоль траектории на плоскости $(q - t)$. Зафиксируем момент времени t и найдем вероятность нахождения частицы в этот момент в точке с определенной координатой q . Эта вероятность, очевидно, равна нулю, если $q \neq q(t)$, где $q(t)$ — решение (6.62). Как сделать так, чтобы функция распределения давала единицу, если $q = q(t)$, и нуль в противном случае? Этого можно достичь, вводя плотность вероятности, равную δ -функции (ср. фиг. 6.3)

$$P(q, t) = \delta(q - q(t)). \quad (6.63)$$

Действительно, ранее в упр. 1 к разд. 2.5 мы видели, что интеграл с функцией $\delta(q - q_0)$ равен нулю, если интервал интегрирования не содержит q_0 , и равен единице, если интегрирование производится в окрестности q_0 :

$$\int_{q_0-\varepsilon}^{q_0+\varepsilon} \delta(q - q_0) dq = 1, \quad (6.64)$$

= 0 в противном случае.



Фиг. 6.3. Пример функции распределения вероятностей с бесконечно большим пиком.

Получим теперь уравнение для такой функции распределения P . Для этого продифференцируем P по времени. Поскольку в правой части зависимость от времени заключена в $q(t)$, дифференцируем сначала δ -функцию по $q(t)$, а затем, используя правила дифференцирования, умножаем это выражение на \dot{q} :

$$\dot{P}(q, t) = \frac{d}{dq(t)} \delta(q - q(t)) \dot{q}(t). \quad (6.65)$$

Производную от δ -функции по $q(u)$ можно переписать в виде

$$-\frac{d}{dq} \delta(q - q(t)) \dot{q}(t). \quad (6.66)$$

Используя теперь уравнение движения (6.62), заменим $\dot{q}(t)$ на K . Это дает окончательную формулу

$$\dot{P}(q, t) = -\frac{d}{dq} (K(q) P). \quad (6.67)$$

Следует подчеркнуть, что производная по q берется теперь от произведения P и K . Доказательство этого утверждения приводится в конце главы. Наш результат (6.67) легко обобщить на случай системы, описываемой дифференциальными уравнениями

$$\dot{q}_i = K_i(\mathbf{q}), \quad i = 1, \dots, n, \quad (6.68)$$

где $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_n)$. Воспользуемся вместо (6.68) уравнением в векторной форме

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{K}(\mathbf{q}). \quad (6.69)$$

В момент времени t состояние всей системы в пространстве переменных $q_1 \dots q_n$ описывается точкой $q_1 = q_1(t)$, $q_2 = q_2(t)$, \dots , $q_n = q_n(t)$. Таким образом, очевидное обобщение (6.63) на случай многих переменных — формула

$$P = \delta(q_1 - q_1(t)) \delta(q_2 - q_2(t)) \dots \delta(q_n - q_n(t)) \equiv \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}(t)), \quad (6.70)$$

где последнее равенство введено для обозначения δ -функции от вектора. Снова вычисляем производную по времени от P . Поскольку каждый множитель зависит от времени, получаем сумму производных

$$\dot{P}(\mathbf{q}, t) = -\frac{d}{dq_1} P \dot{q}_1(t) - \frac{d}{dq_2} P \dot{q}_2 \dots - \frac{d}{dq_n} P \dot{q}_n, \quad (6.71)$$

которую по аналогии с (6.67) можно преобразовать к виду

$$\dot{P}(\mathbf{q}, t) = -\frac{d}{dq_1} P K_1(\mathbf{q}) \dots - \frac{d}{dq_n} P K_n(\mathbf{q}). \quad (6.72)$$

Записывая производные как n -мерный ∇ -оператор, (6.72) можно представить в изящном виде

$$\dot{P}(\mathbf{q}, t) = -\nabla\mathbf{q}(PK), \quad (6.73)$$

допускающем очень простую интерпретацию в терминах гидродинамики. Если отождествить P с плотностью в \mathbf{q} -пространстве, то левая часть будет описывать изменение этой плотности во времени, а вектор KP можно интерпретировать как поток вероятности, причем K — скорость в \mathbf{q} -пространстве. Таким образом, уравнение (6.73) имеет вид уравнения непрерывности.

Б) Вывод уравнения Фоккера — Планка, одномерный случай

Объединим теперь то, что мы узнали в разд. 4.3 относительно броуновского движения, с формальным описанием движения частицы с помощью распределения вероятностей. Рассмотрим снова пример футбольного мяча, который описывает различные траектории во время различных игр. Распределение вероятностей заданной траектории 1 равно

$$P_1(q, t) = \delta(q - q_1(t)), \quad (6.74)$$

для другой заданной траектории 2 —

$$P_2(q, t) = \delta(q - q_2(t)) \quad (6.75)$$

и т. д. Возьмем теперь среднее по всем траекториям, вводя функцию

$$f(q, t) = \langle P(q, t) \rangle. \quad (6.76)$$

Если вероятность появления траектории i равна p_i , то распределение вероятностей можно записать в виде

$$f(q, t) = \sum_i p_i \delta(q - q_i(t)), \quad (6.77)$$

или с использованием (6.74) — (6.75) в виде

$$f(q, t) = \langle \delta(q - q(t)) \rangle; \quad (6.78)$$

$\int f dq$ дает вероятность нахождения частицы в точке q в интервале dq в момент t . Вычисление функции (6.77) представляет собой весьма утомительную процедуру, которая требует введения распределения вероятностей толчков в течение всего времени. Этого, однако, можно избежать, если вывести дифференциальное уравнение для f непосредственно. Рассмотрим изменение f за время Δt :

$$\Delta f(q, t) = f(q, t + \Delta t) - f(q, t). \quad (6.79)$$

Используя (6.78), Δf можно привести к виду

$$\Delta f(q, t) = \langle \delta(q - q(t + \Delta t)) \rangle - \langle \delta(q - q(t)) \rangle. \quad (6.80)$$

Положим

$$q(t + \Delta t) = q(t) + \Delta q(t) \quad (6.81)$$

и разложим δ -функцию в ряд по степеням Δq . Учтем теперь, что эволюция q определяется не детерминистским уравнением (6.62), а уравнением Ланжевена (см. разд. 6.1). Как мы увидим далее, эта новая ситуация требует провести разложение с учетом квадратичных по Δq членов. Такое разложение имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta f(q, t) = & \left\langle \left(-\frac{d}{dq} \delta(q - q(t)) \right) \Delta q(t) \right\rangle + \\ & + \frac{1}{2} \left\langle \frac{d^2}{dq^2} \delta(q - q(t)) (\Delta q(t))^2 \right\rangle. \end{aligned} \quad (6.82)$$

Найдем Δq с помощью уравнения Ланжевена

$$\dot{q} = -\gamma q(t) + F(t), \quad (6.83)$$

интегрируя его по временному интервалу Δt . При интегрировании будем предполагать, что q изменяется очень мало, но число толчков, которые испытала частица, очень велико. Интегрируя (6.83), получим тогда

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \dot{q}(t') dt' &= q(t + \Delta t) - q(t) \equiv \Delta q = \\ &= - \int_t^{t+\Delta t} \gamma q(t') dt' + \int_t^{t+\Delta t} F(t') dt' = -\gamma q(t) \Delta t + \Delta F(t). \end{aligned} \quad (6.84)$$

Вычислим первый член в правой части (6.82)

$$\left\langle \frac{d}{dq} \delta(q - q(t)) \Delta q(t) \right\rangle. \quad (6.85)$$

Подставляя правую часть (6.84) в (6.85), имеем

$$\frac{d}{dq} \{ \langle \delta(q - q(t)) (-\gamma q(t) \Delta t) \rangle + \langle \delta(q - q(t)) \rangle \langle \Delta F \rangle \}. \quad (6.86)$$

Разбиение среднего, содержащего ΔF , на произведение двух средних требует комментария: ΔF содержит все толчки, которые произошли после момента t , в то время как $q(t)$ определяется всеми толчками, произошедшими до этого момента. Поскольку толчки происходят независимо друг от друга, полное среднее можно разбить на произведение средних, как это и записано

в (6.86). Поскольку среднее от F , а также от ΔF равно нулю, (6.96) сводится к виду

$$- \gamma \Delta t \frac{d}{dq} \{ \langle \delta(q - q(t)) q \rangle \}. \quad (6.87)$$

Отметим, что мы заменили $q(t)$ на q точно так же, как и в (6.67).

Перейдем теперь к вычислению члена

$$\left\langle \frac{d^2}{dq^2} \delta(q - q(t)) (\Delta q(t))^2 \right\rangle. \quad (6.88)$$

Используя те же самые аргументы, что и выше, (6.88) можно представить в виде

$$\frac{d^2}{dq^2} \langle \delta(q - q(t)) \rangle \langle \Delta q(t)^2 \rangle. \quad (6.89)$$

Если во второй множитель подставим Δq из (6.84), то найдем члены, содержащие Δt^2 , и члены, содержащие $\Delta t \Delta F$ и $(\Delta F)^2$. Покажем, что $\langle (\Delta F)^2 \rangle$ пропорционально Δt . Поскольку среднее от ΔF равно нулю, вклад в (6.89) вносит только $\langle (\Delta F)^2 \rangle$ — член, линейный по Δt . Вычисляем

$$\langle \Delta F^2 \rangle = \langle \Delta F(t) \Delta F(t) \rangle = \int_t^{t+\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' dt'' \langle F(t') F(t'') \rangle. \quad (6.90)$$

Предположим, что корреляционная функция F пропорциональна δ -функции, т. е.

$$\langle F(t) F(t') \rangle = Q \delta(t - t'). \quad (6.91)$$

Это дает возможность сразу вычислить (6.90). В результате имеем

$$\langle \Delta F^2 \rangle = Q \Delta t. \quad (6.92)$$

Таким образом, окончательный вид (6.88) —

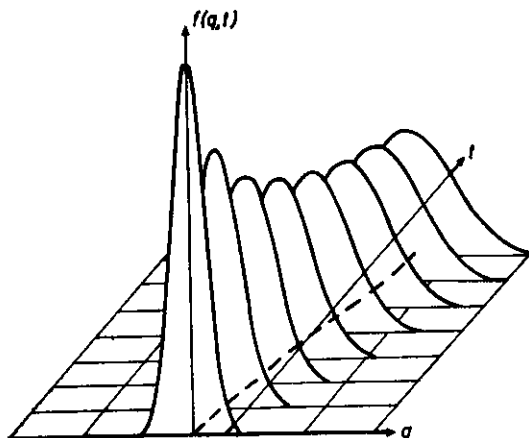
$$\frac{d^2}{dq^2} \langle \delta(q - q(t)) \rangle Q \Delta t. \quad (6.93)$$

Разделим теперь исходное уравнение (6.82) на Δt и, воспользовавшись результатами (6.87) и (6.93) и перейдя к пределу $\Delta t \rightarrow 0$, найдем

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{d}{dq} (\gamma q f) + \frac{1}{2} Q \frac{d^2}{dq^2} f. \quad (6.94)$$

Это уравнение, называемое *уравнением Фоккера — Планка*, описывает изменение с течением времени распределения вероятностей для частицы (фиг. 6.4). $K = \gamma q$ называется

коэффициентом дрейфа, а Q — коэффициентом диффузии. Точно такой же метод можно применить в общем случае многих переменных и произвольных сил $K_i(q)$ (не обязательно простых



Фиг. 6.4. Пример $f(q, t)$ как функции времени t и переменной q . Штриховая линия: наиболее вероятная траектория.

сил трения). Если взять соответствующее уравнение Ланжевена в виде

$$\dot{q}_i = K_i(q) + F_i(t) \quad (6.95)$$

и δ -коррелированные случайные силы F

$$\langle F_i(t) F_j(t') \rangle = Q_{ij} \delta(t - t'), \quad (6.96)$$

то для функции распределения f в q -пространстве

$$\dot{f}(q_1, \dots, q_n; t) \equiv \dot{f}(q; t) \quad (6.97)$$

можно получить следующее уравнение Фоккера — Планка:

$$\dot{f} = -\nabla_q \{Kf\} + \frac{1}{2} \sum_{ij} Q_{ij} \frac{\partial^2}{\partial q_i \partial q_j} f, \quad \text{где } \dot{f} \equiv \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (6.98)$$

В изложенном выше выводе мы учитывали производные от δ -функции до второго порядка включительно. Детальный анализ показывает, что в общем случае производные более высокого порядка также дают вклады $\sim \Delta t$. Важное исключение, когда уравнения Фоккера — Планка (6.94) и (6.98) точные — это случай гауссовых флуктуационных сил.

Докажем, что в (6.67) дифференцирование по q должно распространяться также на $K(q)$. Для доказательства обра-

зуюм выражение

$$\int_{q=q(t)-\varepsilon}^{q=q(t)+\varepsilon} h(q) \frac{d}{dq} \delta(q - q(t)) K(q(t)) dq, \quad (6.99)$$

которое получается из правой части (6.66) при подстановке туда \dot{q} из (6.62) и умножении на произвольную функцию $h(q)$. Отметим, что такую процедуру всегда следует применять, если δ -функция фигурирует в дифференциальном уравнении в форме, подобной (6.65). Интегрирование (6.99) по частям дает

$$\int_{q=q(t)-\varepsilon}^{q=q(t)+\varepsilon} h'(q) \delta(q - q(t)) K(q(t)) dq. \quad (6.100)$$

Благодаря δ -функции этот интеграл можно вычислить. С другой стороны, мы получим тот же результат (6.100), если сразу же будем исходить из выражения

$$\int h(q) \frac{d}{dq} \{\delta(q - q(t)) K(q)\} dq, \quad (6.101)$$

где координата $q(t)$ в K заменена на q .

Упражнения к разд. 6.3

1) В классической механике координаты $q_j(t)$ и импульсы $p_j(t)$ частиц подчиняются уравнениям Гамильтона

$$\dot{q}_j(t) = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad \dot{p}_j(t) = -\frac{\partial H}{\partial q_j}, \quad j = 1, \dots, n,$$

где гамильтониан H зависит от всех q_j и p_j : $H = H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$. Определим функцию распределения $\dot{f} = \dot{f}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}(t)) \times \times \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}(t))$. Покажите, что \dot{f} подчиняется так называемому уравнению Лиувилля

$$\dot{f} = \sum_j \left(\frac{\partial H}{\partial q_j} \frac{\partial}{\partial p_j} - \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial}{\partial q_j} \right) f. \quad (У. 1)$$

Указание. Повторите вычисления (6.63)–(6.67) для q_j и p_j .

2) Функции \dot{f} , удовлетворяющие уравнению Лиувилля (У.1) при $\dot{f} = 0$, называются интегралами движения. Покажите, что

- $g = H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ — интеграл движения;
- если $h_1(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ и $h_2(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ — интегралы движения, то $h_1 + h_2$ и $h_1 h_2$ также интегралы движения;
- если h_1, \dots, h_l — интегралы движения, то любая функция $G(h_1, \dots, h_l)$ также интеграл движения.

- Указание.* а) подставьте g в (У.1);
 б) используйте правило дифференцирования произведения;
 в) используйте цепное правило дифференцирования.

3) Обобщая результаты упр. 2, покажите, что если $g_k = g_k(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)$, то $f(g_1, \dots, g_i)$ также решение.

4) Проверьте, действительно ли информационная энтропия (3.42) удовлетворяет (У.1), если установить следующие соответствия:

$$\left. \begin{array}{l} q_i \\ p_i \end{array} \right\} \rightarrow \text{индекс } i \text{ (значение «случайной переменной»),}$$

$$f(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \rightarrow p_i.$$

Замените сумму в (3.42) интегралом $\int \dots d^n p d^n q$. Почему и крупнозернистая информационная энтропия удовлетворяет (У.1)?

5) Убедитесь, что (3.42) вместе с (3.48) является решением (У.1) при условии, что f_k — интегралы движения (см. упр. 2).

6.4. Некоторые свойства и стационарные решения уравнения Фоккера — Планка

В этом разделе мы покажем, как находить не зависящие от времени решения уравнений Фоккера — Планка нескольких типов, часто встречающихся в практических задачах. Ограничимся в дальнейшем рассмотрением случая, когда коэффициенты диффузии Q_{jk} не зависят от q .

А) Уравнение Фоккера — Планка как уравнение непрерывности

1) Одномерный случай

Запишем одномерное уравнение Фоккера — Планка (6.94) в виде

$$\dot{f} + \frac{d}{dq} \left(Kf - \frac{1}{2} Q \frac{df}{dq} \right) = 0,$$

$$K = K(q), \quad f = f(q, t). \quad (6.102)$$

Вводя обозначение

$$j = \left(kf - \frac{1}{2} Q \frac{df}{dq} \right), \quad (6.103)$$

(6.102) можно представить в виде

$$\dot{f} + \frac{d}{dq} j = 0. \quad (6.104)$$

Это уравнение — одномерное уравнение непрерывности [см. (6.73) и упражнение]: временное изменение плотности вероятности $f(q)$ равно дивергенции потока вероятности j , взятой со знаком минус.

2) n -мерный случай

Уравнение Фоккера — Планка (6.98) записывается в виде

$$\dot{f} + \sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial q_k} \left(K_{kf} - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^n Q_{kl} \frac{\partial f}{\partial q_l} \right) = 0. \quad (6.105)$$

Определим теперь поток вероятности

$$\mathbf{j} = (j_1, j_2, \dots, j_k, \dots, j_n),$$

где

$$j_k = K_{kf} - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^n Q_{kl} \frac{\partial f}{\partial q_l}. \quad (6.106)$$

По аналогии с (6.104) получаем

$$\dot{f} + \nabla_q \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (6.107)$$

где

$$\nabla_q = \left(\frac{d}{dq_1}, \dots, \frac{d}{dq_n} \right).$$

Б) *Стационарные решения уравнения Фоккера — Планка*

Стационарное решение определяется условием $\dot{f} = 0$, т. е. f не зависит от времени.

1) Одномерный случай

С помощью простого интегрирования (6.104) получаем

$$j = \text{const}. \quad (6.108)$$

Наложим далее на f «естественные граничные условия», означающие, что f обращается в нуль при $q \rightarrow \pm\infty$. Это означает [см. (6.103)], что $j \rightarrow 0$ при $q \rightarrow \pm\infty$, т. е. постоянная в (6.108) должна быть равна нулю. Используя (6.103), имеем

$$\frac{1}{2} Q \frac{df}{dq} = Kf. \quad (6.109)$$

Легко убедиться, что решение (6.109) есть функция

$$f(q) = \mathcal{N} \exp(-2V(q)/Q), \quad (6.110)$$

где

$$V(q) = - \int_{q_0}^q K(q) dq \quad (6.111)$$

имеет смысл потенциала, а нормировочный множитель \mathcal{N} определяется из условия

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(q) dq = 1. \quad (6.112)$$

2) n -мерный случай

В этом случае при $\dot{f} = 0$ из (6.107) следует

$$\nabla_{\mathbf{q}} \mathbf{j} = 0. \quad (6.113)$$

К сожалению, даже при естественных граничных условиях (6.113) не всегда означает, что $\mathbf{j} = 0$. Однако аналогичные (6.110) решения получаются, если коэффициенты дрейфа $K_k(\mathbf{q})$ удовлетворяют так называемому условию потенциальности

$$K_k = - \frac{\partial}{\partial q_k} V(\mathbf{q}). \quad (6.114)$$

Если, кроме того, коэффициенты диффузии подчиняются условию

$$Q_{kl} = \delta_{kl} Q, \quad (6.115)$$

то

$$f(\mathbf{q}) = \mathcal{N} \exp \{ -2V(\mathbf{q})/Q \}. \quad (6.116)$$

Предполагается, что $V(\mathbf{q})$ обеспечивает выполнение условия обращения $f(\mathbf{q})$ в нуль при $|\mathbf{q}| \rightarrow \infty$.

В) Примеры

Для иллюстрации (6.110) рассмотрим несколько частных случаев.

а)

$$K(q) = -aq. \quad (6.117)$$

Тогда потенциал

$$V(q) = \frac{a}{2} q^2,$$

график которого изображен на фиг. 6.5. На той же фигуре показана плотность вероятности $f(q)$. Для интерпретации $f(q)$ вспомним уравнение Ланжевена, соответствующее (6.102), (6.117):

$$\dot{q} = -aq + F(t).$$

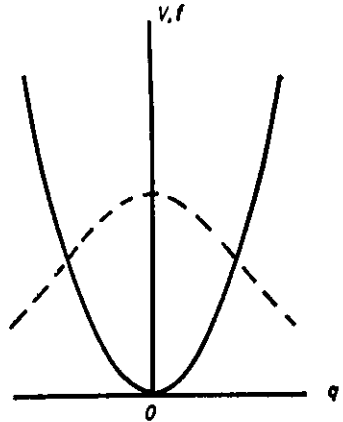
С нашей частицей, координата которой равна q , происходит следующее: случайная сила $F(t)$ толкает частицу вверх по склону потенциальной кривой [который определяется детерми-

нированной силой $K(q)$]. После каждого толчка частица скатывается вниз по склону. Следовательно, наиболее вероятное положение — точка $q=0$, но благодаря случайным толчкам возможны также другие положения. Поскольку, для того чтобы увести частицу далеко от $q=0$, требуется много толчков, вероятность нахождения ее в этих областях быстро уменьшается. Если α уменьшается, возвращающая сила K ослабевает. Тогда потенциальная кривая становится все более полой, а плотность вероятности $f(q)$ оказывается распределенной в более широкой области.

Если $f(q)$ известна, можно вычислить моменты $\langle q^n \rangle = \int q^n f(q) dq$. В рассматриваемом случае $\langle q \rangle = 0$, т. е. центр $f(q)$ совпадает с началом координат, и $\langle q^2 \rangle = (Q/\alpha)/2$ является мерой ширины $f(q)$ (ср. фиг. 6.5).

б)

$$\begin{aligned} K(q) &= -\alpha q - \beta q^3, \\ V(q) &= \frac{\alpha}{2} q^2 + \frac{\beta}{4} q^4, \\ \dot{q} &= -\alpha q - \beta q^3 + F(t). \end{aligned} \quad (6.118)$$



Фиг. 6.5. Потенциал $V(q)$ (сплошная линия) и плотность вероятностей $f(q)$ (штриховая линия) для (6.117).

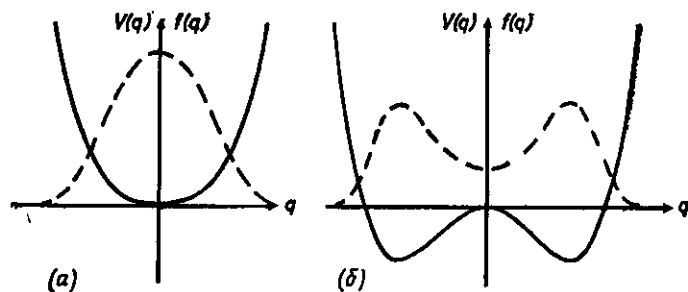
Случай $\alpha > 0$ качественно тот же самый, что и случай «а» (ср. фиг. 6.6, а). Однако при $\alpha < 0$ возникает новая ситуация (см. фиг. 6.6, б). В то время как в отсутствие флуктуаций координата частицы расположена либо в левом, либо в правом минимумах (нарушенная симметрия, ср. разд. 5.1), в данном случае $f(q)$ симметрична. В обоих минимумах «частицу» можно обнаружить с равной вероятностью. Здесь следует отметить важный пункт. Если минимумы глубокие и мы помещаем частицу первоначально на дно одного из них, то она может оставаться там в течение очень долгого времени.

Определение времени, требуемого для перехода из одного минимума в другой, составляет «задачу о времени первого перехода».

в)

$$\begin{aligned} K(q) &= -\alpha q - \gamma q^2 - \beta q^3, \\ V(q) &= \frac{\alpha}{2} q^2 + \frac{\gamma}{3} q^3 + \frac{\beta}{4} q^4, \\ \dot{q} &= -\alpha q - \gamma q^2 - \beta q^3 + F(t). \end{aligned} \quad (6.119)$$

Пусть $\gamma > 0$ и $\beta > 0$ фиксированы, но α изменяется от положительных значений к отрицательным. На фиг. 6.7, а—г показаны соответствующие потенциальные кривые и плотности вероятности. Отметим резкий скачок плотности вероятности в точке $q = 0$ и $q = q_1$ при переходе от «а» к «г».



Фиг. 6.6. Потенциал $V(q)$ (сплошная линия) и плотность вероятности (штриховая линия) для (6.118). а — $\alpha > 0$, б — $\alpha < 0$.

г) Этот и следующий примеры иллюстрируют двумерный случай потенциала:

$$\left. \begin{aligned} K_1(\mathbf{q}) &= -\alpha q_1 \\ K_2(\mathbf{q}) &= -\alpha q_2 \end{aligned} \right\} \text{ (сила),}$$

$$V(\mathbf{q}) = \frac{\alpha}{2} (q_1^2 + q_2^2) \text{ (потенциал),} \quad (6.120)$$

$$\dot{q}_i = -\alpha q_i + F_i(t), \quad i = 1, 2 \text{ (уравнение Ланжевена),}$$

где

$$\langle F_i(t) F_j(t') \rangle = Q_{ij} \delta(t - t') = \delta_{ij} Q \delta(t - t').$$

Качественный вид потенциальной поверхности V и плотности вероятности $f(\mathbf{q})$ показаны на фиг. 6.8 и 6.9.

д) Рассмотрим обобщение пункта «б» на случай двух измерений

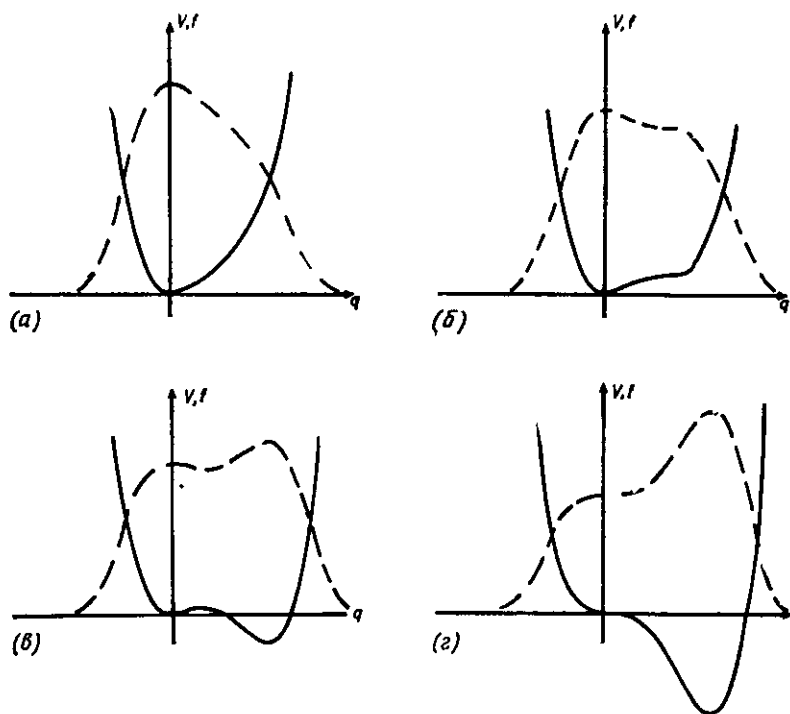
$$\left. \begin{aligned} K_1(\mathbf{q}) &= -\alpha q_1 - \beta (q_1^2 + q_2^2) q_1 \\ K_2(\mathbf{q}) &= -\alpha q_2 - \beta (q_1^2 + q_2^2) q_2 \end{aligned} \right\} \text{ (сила),} \quad (6.121)$$

или, короче,

$$\mathbf{K}(\mathbf{q}) = -\alpha \mathbf{q} - \beta q^2 \cdot \mathbf{q} \text{ (сила),}$$

$$V(\mathbf{q}) = \frac{\alpha}{2} (q_1^2 + q_2^2) + \frac{\beta}{4} (q_1^2 + q_2^2)^2 \text{ (потенциал).}$$

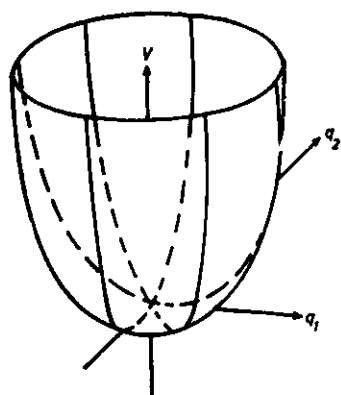
Предполагается, что $\beta > 0$. Для $\alpha > 0$ потенциальная поверхность и плотность вероятности $f(q)$ соответственно показаны на фиг. 6.8 и 6.9; для $\alpha < 0$ V и f соответственно показаны на фиг. 6.10 и 6.11. Новое здесь по сравнению со случаем «б» — это непрерывно нарушенная симметрия. В отсутствие



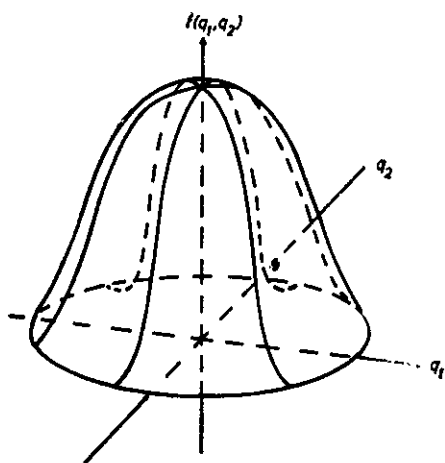
Фиг. 6.7. V (сплошная линия) и f (штриховая линия) при изменяющемся α для (6.119).

флуктуационных сил частица может находиться на дне долины в положении безразличного равновесия. Флуктуации перемещают частицу по долине совершенно аналогично тому, как это было с броуновским движением в одном измерении. В стационарном состоянии частицу можно обнаружить с равной вероятностью в любой точке на дне долины, т. е. симметрия восстанавливается.

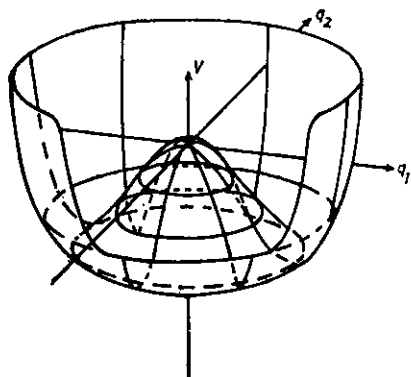
е) Общий случай заданного потенциала $V(q)$ можно рассмотреть в терминах разд. 5.5. Мы оставляем это читателю в качестве упражнения.



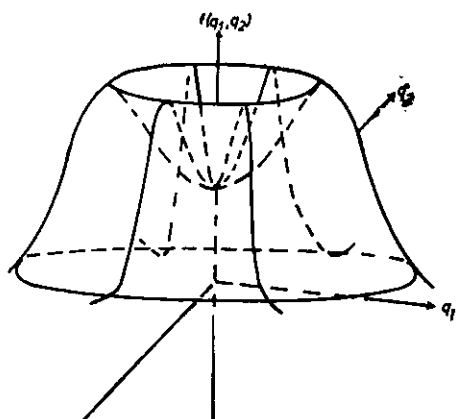
Фиг. 6.8. Потенциал, соответствующий (6.121) при $\alpha > 0$.



Фиг. 6.9. Функция распределения, соответствующая потенциалу (6.121), при $\alpha > 0$.



Фиг. 6.10. Потенциал, соответствующий (6.121), при $\alpha < 0$.



Фиг. 6.11. Потенциальная функция, соответствующая потенциалу (6.121), при $\alpha < 0$.

Упражнение к разд. 6.4

Убедитесь в том, что (6.104) — уравнение непрерывности.

Указание: Проинтегрируйте (6.103) от $q = q_1$ до $q = q_2$ и установите смысл выражения

$$\frac{d}{dt} \int_{q_1}^{q_2} f(q) dq \text{ и т. д.}$$

6.5. Зависящие от времени решения уравнения Фоккера — Планка

1) *Важный частный случай: одномерное движение*
Коэффициент дрейфа линеен по q :

$$K = -\alpha q.$$

(Сдвинув начало отсчета q , можно включить в рассмотрение также случай $K = c - \alpha q$.) Приведем более или менее эвристический вывод соответствующего решения. Поскольку стационарное решение (6.110) имеет форму гауссова распределения при условии, что коэффициенты дрейфа линейны по q , будем искать решение в виде гауссова распределения

$$f(q, t) = \mathcal{N}(t) \exp \left\{ -\frac{q^2}{a} + \frac{2b}{a} q \right\}, \quad (6.122)$$

где считается, что ширина гауссова распределения a , смещение b и нормировка $\mathcal{N}(t)$ зависят от времени. Поставим (6.122) в зависящее от времени уравнение Фоккера — Планка (6.102). После дифференцирования по времени t и координате q разделим обе части полученного уравнения на

$$\mathcal{N}(t) \exp \{ -q^2/a + 2bq/a \}.$$

Тогда получается уравнение, содержащее степени q вплоть до второго порядка. Сравнивая в этом уравнении коэффициенты при одних и тех же степенях q , получаем (после некоторых преобразований) следующие три уравнения:

$$\dot{a} = -2\alpha a + 2Q, \quad (6.123)$$

$$\dot{b} = -\alpha b, \quad (6.124)$$

$$\frac{\dot{\mathcal{N}}}{\mathcal{N}} = \alpha + Q \frac{2b^2}{a^2} - \frac{Q}{a}. \quad (6.125)$$

Уравнения (6.123) и (6.124) представляют собой линейные дифференциальные уравнения относительно a и b ; их решения

в явном виде —

$$a(t) = \frac{Q}{\alpha} (1 - \exp(-2\alpha t)) + a_0 \exp(-2\alpha t), \quad (6.126)$$

$$b(t) = b_0 \exp(-\alpha t). \quad (6.127)$$

Уравнение (6.125) на первый взгляд довольно сложное. Однако легко проверить, что его решение есть функция

$$N = (\pi a)^{-1/2} \exp(-b^2/a), \quad (6.128)$$

поскольку (6.128) нормализует функцию распределения (6.122) во все моменты времени. Подставляя (6.128) в (6.122), получаем

$$f(q, t) = (\pi a(t))^{-1/2} \exp\{-(q - b(t))^2/a(t)\}. \quad (6.129)$$

На фиг. 6.4 был приведен пример решения (6.129). Если решение (6.129) подчинено начальному условию $a \rightarrow 0$ (т. е. $a_0 = 0$ при $t - t_0 = 0$), то при $t = 0$ (6.129) сводится к δ -функции, или, другими словами, (6.129) представляет собой функцию Грина уравнения Фоккера — Планка. Решение такого же типа может быть найдено для уравнения Фоккера — Планка с линейным коэффициентом дрейфа и постоянным коэффициентом диффузии в случае *многих переменных* q .

Примеры применения нестационарных решений

С помощью нестационарных решений можно подсчитать моменты, зависящие от времени, например:

$$\langle q \rangle = \int q f(q, t) dq. \quad (6.130)$$

Подставляя (6.129) в (6.130) и вычисляя интеграл (путем перехода к новой координате $q = q' + b(t)$), получаем

$$\langle q \rangle = b_0 \exp(-\alpha t). \quad (6.131)$$

Поскольку $f(q, t)$ определена единственным образом лишь при задании начального распределения $f(q, 0)$, мы должны соблюдать это условие и при вычислении (6.130). Во многих практических задачах $f(q, 0)$ выбирают в виде δ -функции: $f(q, 0) = \delta(q - q_0)$, т. е. при этом мы точно знаем, что в момент $t = 0$ частица находилась в точке $q = q_0$. Чтобы подчеркнуть это, записываем (6.130) в виде

$$\langle q \rangle_q. \quad (6.132)$$

В вышеприведенном примере $b_0 = q_0$.

Во многих практических случаях оказываются важны двух-временные корреляционные функции

$$\langle q(t) q(t') \rangle.$$

Они определяются выражением (ср. разд. 4.4):

$$\langle q(t) q(t') \rangle = \int q dq \int q' dq' f(q, t; q', t'), \quad (6.133)$$

где

$$f(q, t; q', t') \quad (6.134)$$

— совместная плотность вероятности. Поскольку уравнение Фоккера — Планка описывает лишь марковские процессы, (6.134) в соответствии с разд. 4.3 можно разложить на плотность вероятности в момент t' , $f(q', t')$ и условную вероятность $f(q, t | q', t')$:

$$f(q, t; q', t') = f(q, t | q', t') f(q', t'). \quad (6.135)$$

Если не оговорено другое, в практических задачах в качестве $f(q', t')$ берут стационарное решение $f(q)$ уравнения Фоккера — Планка, а $f(q, t | q', t')$ представляет собой как раз то зависящее от времени решение уравнения Фоккера — Планка, которое в момент $t = t'$ сводится к δ -функции $\delta(q - q')$. Таким образом, $f(q, t | q', t')$ есть функция Грина. В нашем примере (6.117) $f(q) = (\alpha/\pi Q)^{1/2} \exp(-\alpha q^2/Q)$, а $f(q, t | q', t')$ задается формулой (6.129) с $a_0 = 0$, $b_0 = q'$. С помощью этих функций можно просто вычислить (6.133), где без потери общности положим $t' = 0$

$$(6.133) = \int \int q (\pi \alpha(t))^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{\alpha(t)} (q - q' e^{-\alpha t})^2 \right\} dq \times \\ \times q' (\pi Q/\alpha)^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{\alpha}{Q} q'^2 \right\} dq'. \quad (6.136)$$

Заменяя q на $q + q' \exp(-\alpha t)$, вычисляем интеграл (с гауссовой плотностью)

$$\langle q(t) q(t') \rangle = e^{-\alpha t} \langle q'^2 \rangle = \frac{1}{2} \frac{Q}{\alpha} e^{-\alpha t}, \quad (6.137)$$

что согласуется с (6.25). Перейдем теперь к общему уравнению (6.105).

2)* *Сведение нестационарного уравнения Фоккера — Планка к не зависящему от времени уравнению*

Положим

$$f(q, t) = \exp(-\lambda t) \Psi(q) \quad (6.138)$$

и подставим (6.138) в (6.105). Дифференцируя по времени и умножая обе части (6.105) на $\exp(\lambda t)$, получаем

$$-\lambda \Psi(\mathbf{q}) = -\sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial q_k} \left(K_k \Psi - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^n Q_{kl} \frac{\partial}{\partial q_l} \Psi \right). \quad (6.139)$$

Методы решения (6.139) здесь мы не будем обсуждать. Отметим только несколько важных свойств: (6.139) допускает бесконечный набор решений $\Psi_m(\mathbf{q})$ и собственных значений λ_m , $m = 0, 1, 2, \dots$ при условии, что заданы подходящие (например, естественные) граничные условия. Наиболее общее решение (6.105) получается в виде линейной комбинации (6.138)

$$f(\mathbf{q}, t) = \sum_{m=0}^{\infty} c_m \exp(-\lambda_m t) \Psi_m(\mathbf{q}). \quad (6.140)$$

Если существует стационарное решение (6.105), то $\lambda_0 = 0$. Коэффициенты c_m можно определить, задав начальное распределение в момент $t = 0$:

$$f(\mathbf{q}, 0) = f_0(\mathbf{q}). \quad (6.141)$$

Даже в одномерном случае при K и Q довольно простого вида уравнение (6.139) можно решить лишь с помощью ЭВМ.

3)* Формальное решение

Будем исходить из уравнения Фоккера—Планка (6.105), которое запишем в виде

$$\dot{f} = Lf. \quad (6.142)$$

Здесь L — «оператор»

$$L = -\sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} K_k + \frac{1}{2} \sum_{kl} Q_{kl} \frac{\partial^2}{\partial q_k \partial q_l}. \quad (6.143)$$

Если бы L было просто числом, решение (6.142) находилось бы тривиально и $f(t)$ имело бы вид

$$f(t) = e^{Lt} f(0). \quad (6.144)$$

Подставляя (6.144) в (6.142) и дифференцируя по времени, можно легко проверить, что решение (6.144) удовлетворяет (6.142) даже в рассматриваемом случае, когда L есть оператор. Чтобы вычислить (6.144), представим $\exp(Lt)$ в виде

$$e^{Lt} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} L^{\nu} t^{\nu}. \quad (6.145)$$

Здесь L^ν означает следующую операцию. Оператор L применяется ν раз к функции, стоящей справа от него:

$$L^\nu f(\mathbf{q}, t) = \underbrace{L \cdot L \cdot L \dots L}_\nu f(\mathbf{q}, t). \quad (6.146)$$

4)* Метод итераций

В практических приложениях можно попытаться решить (6.142) методом итераций.

Пусть $f(\mathbf{q}, t)$ задана в момент $t = t_0$. Требуется определить f в несколько более поздний момент $t + \tau$. Вспомним сначала определение

$$\dot{f} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} (f(t + \tau) - f(t)).$$

Считая τ конечным (но очень малым), приведем (6.142) к виду

$$f(\mathbf{q}, t_0 + \tau) = f(\mathbf{q}, t_0) + \tau Lf(\mathbf{q}, t_0) \equiv (1 + \tau L)f(\mathbf{q}, t_0). \quad (6.147)$$

Повторяя эту процедуру в моменты времени $t_2 = t_0 + 2\tau, \dots, t_n = t_0 + N\tau$, находим ($t_n = t$)

$$f(\mathbf{q}, t) = (1 + \tau L)^N f(\mathbf{q}, t_0). \quad (6.148)$$

Формула (6.148) становится точным решением (6.142) в пределе $\tau \rightarrow 0, N \rightarrow \infty$, но $N\tau = t - t_0$. Решение в виде (6.148) — другая возможная форма (6.144).

Упражнение к разд. 6.5

Путем проверки убедитесь, что при $t \rightarrow 0$ и $a_0 = 0$ (6.129) вместе с (6.126) и (6.127) сводятся к δ -функции $\delta(q - q_0)$.

6.6*. Решение уравнения Фоккера — Планка с помощью интегралов по траекториям

1) Одномерный случай

В разд. 4.3 с помощью интеграла по траектории мы нашли решение уравнения Фоккера — Планка весьма специального вида, именно в случае равного нулю коэффициента дрейфа $K \equiv 0$. Здесь мы рассмотрим вопрос о том, как обобщить этот результат на случай $K \neq 0$. В рассматриваемом случае L из (6.142) задается выражением

$$L = \frac{d}{dq} K(q) + \frac{Q}{2} \frac{d^2}{dq^2}. \quad (6.149)$$

Для бесконечно малого временного интервала τ запишем решение в следующем виде [обобщая (4.89) с учетом одного шага $t_0 \rightarrow t_0 + \tau$]:

$$f(q, t_0 + \tau) = \mathcal{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2Q\tau} (q - q' - \tau K(q'))^2 \right\} f(q', t_0) dq'. \quad (6.150)$$

Читатели, не интересующиеся математическими тонкостями, могут пропустить последующие выкладки и перейти сразу к формуле (6.162). Разложим (6.150) в ряд по степеням τ и докажем, что с точностью до членов порядка τ включительно (6.150) эквивалентно (6.147), т. е. правую часть (6.150) можно представить как

$$f + \tau \left(-\frac{d}{dq} Kf + \frac{1}{2} Q \frac{d^2 f}{dq^2} \right), \quad \text{где } f = f(q, t_0). \quad (6.151)$$

Для этого введем новую переменную интегрирования ξ

$$q' = q + \xi. \quad (6.152)$$

Одновременно преобразуем выражение в фигурных скобках в показателе экспоненты

$$f(q, t_0 + \tau) = \mathcal{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2Q\tau} (\xi^2 + 2\tau\xi K(q + \xi) + \tau^2 K(q + \xi)^2) \right\} \times \\ \times f(q + \xi, t_0) d\xi. \quad (6.153)$$

Основная идея вывода состоит в следующем: при $\tau \rightarrow 0$ гауссово распределение

$$\exp \left(-\frac{1}{2Q\tau} \xi^2 \right) \quad (6.154)$$

становится очень острым. Точнее, в подынтегральном выражении существенны лишь те члены, для которых $|\xi| < \sqrt{\tau} \sqrt{Q}$. Это наводит на мысль разложить все множители типа (6.154) в выражении (6.153) в ряд по степеням ξ и τ . Оставляя главные члены после некоторых преобразований, получаем

$$(6.153) = \mathcal{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2Q\tau} \xi^2 \right\} [\dots] d\xi, \quad (6.155)$$

где

$$[\dots] = \left(1 - \frac{1}{Q} \xi^2 K' + \frac{1}{2} \frac{K^2}{Q^2} \xi^2 - \frac{\tau K^2}{2Q} \right) f + \xi^2 \left(-\frac{1}{Q} K \right) f' + \\ + \frac{1}{2} \xi^2 f''. \quad (6.156)$$

Нечетные по ξ члены опущены, поскольку после интегрирования по ξ они исчезают. Здесь

$$K = K(q), K' = \frac{dK(q)}{dq}; \quad f = f(q), f' = \frac{df}{dq}, \quad f'' = \frac{d^2f}{dq^2}. \quad (6.157)$$

Чтобы вычислить (6.155), выполним интегрирование по ξ . Используя хорошо известные формулы

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2Q\tau} \xi^2 \right\} d\xi = (2Q\pi\tau)^{1/2}, \quad (6.158)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 \exp \left\{ -\frac{1}{2Q\tau} \xi^2 \right\} d\xi = Q\tau (2Q\pi\tau)^{1/2}, \quad (6.159)$$

получаем

$$(6.155) = \mathcal{N} (2Q\pi)^{1/2} \left\{ f - \tau K' f - \tau K f' + \frac{\tau Q}{2} f'' \right\}. \quad (6.160)$$

Выбирая постоянную

$$\mathcal{N} = (2Q\pi)^{-1/2}, \quad (6.161)$$

можно установить требуемую идентичность с (6.147). Теперь можно повторить всю процедуру для моментов времени $t_2 = t_0 + 2\tau, \dots, t_N = t_0 + N\tau$ и в конце концов перейти к пределу $N \rightarrow \infty$ при фиксированном $N\tau = t - t_0$. Это дает N -мерный интеграл ($t_N = t, t_0 = 0$):

$$f(q, t) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N\tau \rightarrow \infty}} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int \mathcal{D}q \exp \left(-\frac{1}{2} O \right) f(q', t_0), \quad (6.162)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{D}q &= (2Q\pi)^{-N/2} dq_0 \dots dq_{N-1}, \\ O &= \sum_{v=1}^N \tau \{ (q_v - q_{v-1})/\tau - K(q_{v-1}) \}^2 Q^{-1}, \\ q_0 &\equiv q'; \quad q_N \equiv q. \end{aligned} \quad (6.163)$$

Мы предоставляем читателю сравнить (6.162) с интегралом по траектории (4.85) и интерпретацию (6.162) в духе гл. 4. Наиболее вероятная траектория частицы — это та, для которой O минимально, т. е.

$$\frac{1}{\tau} (q_v - q_{v-1}) = K(q_{v-1}). \quad (6.164)$$

При $\tau \rightarrow 0$ это уравнение представляет собой просто уравнение движения под действием силы K . Часто полагают, что

$(1/\tau)(q_v - q_{v-1}) = \dot{q}$ и заменяют $K(q_v)$ величиной $K(q)$. Это правильно, поскольку представляет собой просто сокращенную запись (6.163). Однако эту запись часто интерпретировали и по-другому, что приводило к недоразумениям и даже к ошибкам.

2) n -мерный случай

Решение (6.105) в виде интеграла по траектории теперь имеет вид

$$f(\mathbf{q}, t) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N\tau = t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int \mathcal{D} \exp\left(-\frac{1}{2} O\right) f(\mathbf{q}', t_0). \quad (6.165)$$

Здесь

$$\mathcal{D} = \prod_{\mu=0}^{N-1} \{(2\pi\tau)^{-n/2} (\det Q)^{-1/2}\} (dq_1 \dots dq_n)_\mu, \quad (6.166)$$

$$\mathbf{q}_N = \mathbf{q}, \quad \mathbf{q}_0 = \mathbf{q}',$$

$$O = +\tau \sum_{v=1}^N (\dot{\mathbf{q}}_v^T - \mathbf{K}_{v-1}^T) Q^{-1} (\dot{\mathbf{q}}_v - \mathbf{K}_{v-1}), \quad (6.167)$$

где $\dot{\mathbf{q}}_v = (\mathbf{q}_v - \mathbf{q}_{v-1})/\tau$, $\mathbf{K}_{v-1} = \mathbf{K}(\mathbf{q}_{v-1})$ и T обозначает транспонированный вектор. Q — диффузионная матрица, фигурирующая в (6.105). Функцию O можно назвать обобщенной функцией Онсагера — Махлупа, поскольку эти авторы определили O в специальном случае, когда K линейно по \mathbf{q} .

Упражнение к разд. 6.6

Проверьте, что (6.165) — решение (6.105).

Указание. Действуйте так же, как и в одномерном случае, и воспользуйтесь (2.65), (2.66) при $m \rightarrow K$.

Какая траектория наиболее вероятна?

Указание. Q и, следовательно, Q^{-1} положительно определены.

6.7. Аналогия с фазовыми переходами

В вводной гл. 1 мы привели несколько примеров фазовых переходов в физических системах, например в ферромагнетике. Ферромагнетик состоит из большого числа элементарных магнитиков. Если температура T больше «критической» температуры T_c , $T > T_c$, оси магнитиков ориентированы в случайных направлениях (см. фиг. 1.7). Если T понизить, то при $T = T_c$ макроскопическое число элементарных магнитов внезапно вы-

страивается в одном направлении. Теперь ферромагнетик обладает спонтанной намагниченностью. Рассмотрение решений уравнений Фоккера — Планка, проведенное в предыдущем разделе, позволяет установить весьма близкие аналогии между фазовыми переходами, происходящими в условиях теплового равновесия, и некоторыми переходами типа порядок — беспорядок в неравновесных системах. Как будет показано далее, такие переходы могут встречаться в физике, химии, биологии и других дисциплинах. Для выявления этих аналогий рассмотрим сначала свободную энергию физической системы, находящейся в тепловом равновесии (ср. разд. 3.3 и 3.4). Свободная энергия \mathcal{F} зависит от температуры T и, возможно, от других параметров, например объема. В рассматриваемом случае мы ищем минимум свободной энергии при некоторых дополнительных ограничениях. Их смысл лучше всего объяснить на примере ферромагнетика. Если M_1 элементарных магнитов направлены вверх и M_2 элементарных магнитов направлены вниз, «намагниченность» равна

$$M = M(\uparrow - M_\downarrow) m, \quad (6.168)$$

где m — магнитный момент одного элементарного магнита. Ограничение заключается в том, что средняя намагниченность M должна равняться заданному значению, или в обозначениях разд. 3.3,

$$f_k = M. \quad (6.169)$$

Поскольку ниже будут рассматриваться и другие системы, заменим M обобщенной координатой q :

$$M \rightarrow q \quad \text{и} \quad f_k = q. \quad (6.170)$$

В последующем предполагается, что \mathcal{F} равно минимальному значению свободной энергии при фиксированном значении q . Разложим \mathcal{F} в ряд по степеням q

$$\mathcal{F}(q, T) = \mathcal{F}(0, T) + \mathcal{F}'(0, T)q + \dots + \frac{1}{4!} F''''(0, T)q^4 + \dots \quad (6.171)$$

и будем считать \mathcal{F} функцией q . В ряде случаев симметрии по отношению к инверсии

$$\mathcal{F}' = \mathcal{F}''' = 0 \quad (6.172)$$

(см. разд. 5.1). Обсудим сначала этот случай. Запишем \mathcal{F} в виде

$$\mathcal{F}(q, T) = \mathcal{F}(0, T) + \frac{\alpha}{2} q^2 + \frac{\beta}{4} q^4. \quad (6.173)$$

Следуя Ландау, назовем q параметром порядка. Для установления первого соответствия результатов разд. 6.4 с теорией фазовых переходов Ландау отождествим (6.173) с потенциалом, введенным в разд. 6.4. Как следует из термодинамики (см. разд. 3.3, 3.4),

$$f = \mathcal{N} \exp \{ -\mathcal{F}/k_B T \} \quad (6.174)$$

есть распределение вероятностей, если \mathcal{F} рассматривается как функция параметра порядка q . Следовательно, наиболее вероятное значение параметра порядка определяется требованием $\mathcal{F} = \min!$ Очевидно, что минимум (6.173) можно получить точно так же, как и в случае потенциала $V(q)$. Исследуем положение этого минимума как функцию параметра α . В теории Ландау этот коэффициент задается в виде

$$\alpha = a(T - T_c) \quad (a > 0), \quad (6.175)$$

т. е. при критической температуре $T = T_c$ он меняет знак. Значит, можно различать две области: $T > T_c$ и $T < T_c$ (ср. табл. 6.1). При $T > T_c$ $\alpha > 0$ и минимум \mathcal{F} (или V) лежит

Таблица 6.1

Теория Ландау фазового перехода второго рода

Функция распределения $f = \mathcal{N} \exp(-\mathcal{F}/k_B T)$, свободная энергия

$$\mathcal{F}(q, T) = \mathcal{F}(0, T) + \left(\frac{\alpha}{2}\right)q^2 + \left(\frac{\beta}{4}\right)q^4, \quad \alpha \equiv \alpha(T) = a(T - T_c)$$

Состояние	Неупорядоченное	Упорядоченное
Температура	$T > T_c$	$T < T_c$
«Внешний» параметр	$\alpha > 0$	$\alpha < 0$
Наиболее вероятное значение параметра порядка q_0 : $f(q) = \max! \quad \mathcal{F} = \min!$	$q_0 = 0$	$q_0 = \pm(-\alpha/\beta)^{1/2}$ Нарушенная симметрия
Энтропия $S = -\{d\mathcal{F}(q_0, T)/dT\}$	$S_0 = -\{d\mathcal{F}(0, T)/dT\}$	$S_0 + (\alpha^2/2\beta)(T - T_c)$
	непрерывна при $T = T_c$ ($\alpha = 0$)	
Удельная теплоемкость $c = T(dS/dT)$	$T(dS_0/dT)$	$T(dS_0/dT) + \left(\frac{\alpha^2}{2\beta}\right)T$
	разрыв при $T = T_c$ ($\alpha = 0$)	

в точке $q = q_0 = 0$. Поскольку энтропия связана со свободной энергией формулой [см. (3.93)]

$$S = -\frac{\partial \mathcal{F}(0, T)}{\partial T}, \quad (6.176)$$

для области $T > T_c$ мы получаем

$$S = S_0 = - \frac{\partial \mathcal{F}(0, T)}{\partial T}. \quad (6.176a)$$

Вторая производная от \mathcal{F} по температуре дает удельную теплоемкость (с точностью до множителя T)

$$c = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right). \quad (6.177)$$

Отсюда, используя (6.176a), получаем

$$c = T \left(\frac{\partial S_0}{\partial T} \right). \quad (6.177a)$$

Теперь выполним ту же самую процедуру для упорядоченного состояния при $T < T_c$, т. е. при $\alpha < 0$. Это дает новое равновесное значение q_1 . Новое значение энтропии представлено в табл. 6.1. Легко проверить, что при $\alpha = 0$ ($T = T_c$) S непрерывна. Однако (см. последнюю строку в табл. 6.1) при вычислении удельной теплоемкости выше и ниже критической температуры мы получаем два различных выражения, и, значит, в точке $T = T_c$ имеется разрыв.

Это явление называется фазовым переходом второго рода, поскольку разрывна вторая производная от свободной энергии. С другой стороны, сама энтропия есть непрерывная функция, поэтому этот переход также называется непрерывным фазовым переходом. В статистической физике также часто исследуют временное изменение параметра порядка. Обычно более или менее феноменологическим образом допускают, что q подчиняется уравнению типа

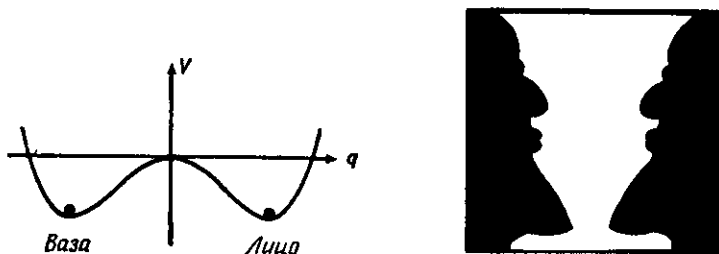
$$\dot{q} = - \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial q}, \quad (6.178)$$

которое в случае потенциала (6.173) принимает следующий вид:

$$\dot{q} = - \alpha q - \beta q^3. \quad (6.179)$$

Оно уже встречалось в различных местах этой книги. Постоянный множитель перед $\partial \mathcal{F} / \partial q$ мы для простоты опустили. При $\alpha \rightarrow 0$ происходит так называемое критическое замедление, поскольку «частица» с координатой q скатывается по склону потенциальной кривой все более медленно. Кроме того, нарушается симметрия, с чем мы уже встречались в разд. 5.1. (Фиг. 6.12 иллюстрирует нарушение симметрии зрительного восприятия.) Критическое замедление связано с мягкой модой (см. разд. 5.1). В статистической механике по аналогии с разд. 6.1 в уравнение (6.179) часто вводят случайную силу. При

$\alpha \rightarrow 0$ возникают критические флуктуации: поскольку в выражении для возвращающей силы остаются лишь члены с более высокими степенями q , флуктуации $q(t)$ становятся значительными.



Фиг. 6.12. Нарушение симметрии в зрительном восприятии. При фокусировании внимания на центре и интерпретировании его как передней части изображения, видна ваза, в противном случае изображение воспринимается как два профиля лица.

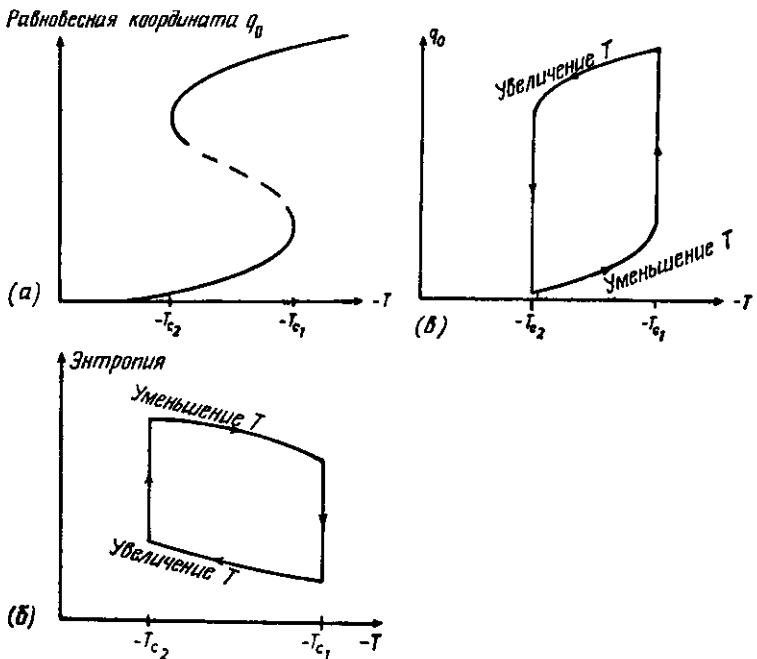
Обратимся теперь к случаю, когда свободная энергия имеет вид

$$\mathcal{F}(q, T) = \alpha \frac{q^2}{2} + \gamma \frac{q^3}{3} + \beta \frac{q^4}{4} \quad (6.180)$$

[β и γ положительны, но α может изменять знак в соответствии с (6.175)]. При изменении температуры T , т. е. параметра α , мы получаем последовательность потенциальных кривых, изображенных на фиг. 6.7, a — g . При этом происходит следующее.

При понижении температуры локальный минимум сначала остается в точке $q=0$. При дальнейшем понижении температуры потенциальная кривая принимает вид, показанный на фиг. 6.7, g , т. е. теперь «частица» может скатиться из точки $q=0$ в новый (глобальный) минимум \mathcal{F} в точке q_1 . Энтропии двух состояний q_0 и q_1 отличаются друг от друга. Это явление называется «фазовым переходом первого рода», поскольку терпит разрыв первая производная от \mathcal{F} . Так как энтропия S оказывается разрывной функцией, этот переход называется также разрывным фазовым переходом. Если теперь начать повышать температуру, то мы пройдем через последовательность фигур $g \rightarrow a$. Очевидно, что система совершает обратный переход из q_1 в q_0 при более высокой температуре, чем переход из q_0 в q_1 . Таким образом, здесь имеет место гистерезис, см. фиг. 6.13 (см. также фиг. 6.7, a — g). (Фиг. 6.14 иллюстрирует гистерезисный эффект в зрительном восприятии.)

Проведенное выше рассмотрение следует воспринимать с некоторой осторожностью. Мы без сомнения можем и будем ис-

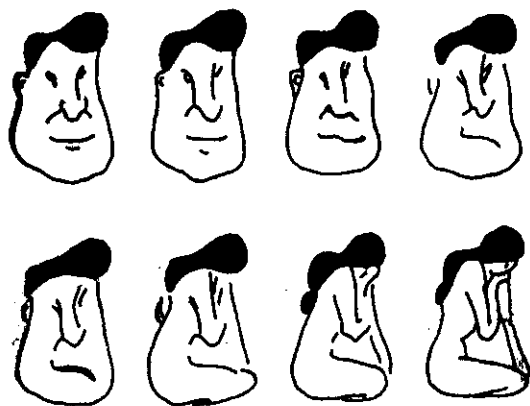


Фиг. 6.13. Поведение системы при фазовом переходе первого рода. Для обсуждения фиг. *a—в* обратимся сначала к фиг. 6.7, *a—г* на стр. 203. При деформации потенциальной кривой, изображенной на фиг. 6.7, *a—г*, сначала получается один экстремум (минимум) V , затем три и наконец снова только один.

Фиг. 6.13.а показывает, как изменяется координата q_0 этих экстремумов при изменении параметра, определяющего форму потенциала V . Здесь в качестве этого параметра взята (отрицательная) температура. Очевидно, что при переходе *a* → *г*, показанном на фиг. 6.7, система остается в состоянии $q_0 \approx 0$ до тех пор, пока не реализуется ситуация *г*, когда система перескакивает в новое равновесное положение, соответствующее абсолютному минимуму V . С другой стороны, при переходе *г* → *a* (фиг. 6.7) система остается сначала в состоянии с $q_0 \neq 0$ и перескакивает снова в состояние с $q_0 \approx 0$ только тогда, когда реализуется ситуация, изображенная на фиг. 6.7, *б*. Эти скачки показаны на фиг. 6.13, *в* на графике зависимости от температуры координаты q_0 действительно реализующегося состояния системы. На фиг. 6.13, *б* показано соответствующее изменение энтропии.

пользовать терминологию, связанную с фазовыми переходами. Как это будет показано в последующих главах, это рассмотренное действительно применимо к многим неравновесным системам. Но следует ясно сказать о том, что фазовые переходы в равновесных системах теория фазовых переходов Ландау (табл. 6.1) описывает неадекватно. В точке фазового перехода удельная теплоемкость и другие физические величины имеют

особенности, которые описываются так называемыми критическими показателями. Экспериментально измеренные значения критических показателей в общем случае не согласуются с предсказаниями теории Ландау. Главная причина этого, как станет ясно из дальнейшего материала данного раздела, — неадекватный учет флуктуаций. Эти явления в настоящее время успешно описывают с помощью ренормализационной группы Вильсона.



Фиг. 6.14. Гистерезис зрительного восприятия. Смотрите на картинки сначала слева направо, от верхнего ряда к нижнему, затем наоборот, в зависимости от направления рассмотрения восприятие переключается на новый образ в различных местах.

Здесь мы не касаемся этих вопросов и будем интерпретировать различные *неравновесные* переходы в смысле теории Ландау там, где она применима.

В оставшейся части этой главы¹⁾ мы хотим показать, что означает для неравновесной системы поведение, аналогичное разрывам удельной теплоемкости при фазовом переходе. Как будет показано в последующих главах, действие макроскопической системы можно описывать параметром порядка q (или набором таких параметров). Во многих случаях мерой этого действия является q^2 . Взяв (6.174) в качестве распределения вероятностей, получим, что среднее значение от q^2 равно

$$\langle q^2 \rangle = \frac{\int q^2 \exp(-\hat{V}) dq}{\int \exp(-\hat{V}) dq}, \quad \mathcal{F}/k_B T \equiv \hat{V} = \frac{2V}{Q}, \quad (6.181)$$

¹⁾ Эту часть, в которой рассматриваются в некотором смысле технические вопросы, при первом чтении можно опустить.

где Q теперь включено в \hat{V} [см. (6.116)]. Берем \hat{V} в виде

$$\hat{V} = (\alpha - \alpha_c) q^2 + \beta q^4. \quad (6.182)$$

Очевидно, что q^2 можно представить как

$$q^2 = \frac{\partial \hat{V}}{\partial \alpha}. \quad (6.183)$$

Это дает возможность записать (6.181) в форме

$$\langle q^2 \rangle = \frac{\int \frac{\partial \hat{V}}{\partial \alpha} \exp(-\hat{V}) dq}{\int \exp(-\hat{V}) dq}. \quad (6.184)$$

Легко проверить, что (6.184) эквивалентно выражению

$$\langle q^2 \rangle = - \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \left(\int \exp(-\hat{V}) dq \right). \quad (6.185)$$

Для вычисления интеграла в (6.185) предположим, что $\exp(-\hat{V})$ очень острая функция с максимумом при $q = q_0$. Если имеется несколько пиков [соответствующих различным минимумам $\hat{V}(q)$], мы предполагаем, что занято только одно состояние $q = q_0$. Это *допущение*, принимаемое специально для данного случая, позволяет учесть нарушение симметрии при «фазовом переходе второго рода» или выбрать один из двух локальных минимумов различной глубины при «фазовом переходе первого рода». В обоих случаях предположение о том, что распределение вероятностей имеет очень узкий пик, означает, что мы находимся все еще далеко от точки фазового перехода

Таблица 6.2

Аналогия с фазовым переходом

Физическая система, находящаяся в тепловом равновесии	Синергетическая система, описываемая стационарной функцией распределения $f(q)$
Параметры порядка q	Параметры порядка q
Функция распределения $f = \mathcal{N} \exp(-\mathcal{F}/k_B T)$	Функция распределения $f(q) = \exp(-\hat{V})$, где \hat{V} определяется формулой: $\hat{V} = - \ln f$
Температура	Внешние параметры (подвод энергии)
Энтропия	Действие (выход энергии)
Удельная теплоемкость	Изменение действия при изменении внешнего параметра: эффективность

$\alpha = \alpha_c$. Разложим экспоненту относительно минимального значения, оставляя лишь члены второго порядка:

$$\langle q^2 \rangle = - \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \left\{ \exp(-\hat{V}(q_0)) \int \exp(-\hat{V}''(q_0)(q - q_0)^2) dq \right\}. \quad (6.186)$$

Разбивая логарифм на два сомножителя и вычисляя производные по α в первом сомножителе, получаем

$$\langle q^2 \rangle = \frac{\partial \hat{V}(q_0)}{\partial \alpha} - \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \int \exp(-\hat{V}''(q_0)(q - q_0)^2) dq. \quad (6.187)$$

Последний интеграл легко вычисляется, и окончательный результат имеет вид

$$\langle q^2 \rangle = \frac{\partial \hat{V}(q_0)}{\partial \alpha} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln(\pi/\hat{V}''(q_0)). \quad (6.188)$$

Сравним (6.188) с (6.176), считая, что

$$\begin{aligned} T &\leftrightarrow -\alpha, \\ \hat{V} &\leftrightarrow \mathcal{F}. \end{aligned}$$

При этом оказывается, что первый член в правой части (6.188) пропорционален правой части (6.176). Поэтому энтропию S можно сопоставить с выходной активностью системы $\langle q^2 \rangle$. Разрывность (6.177) указывает на резкое изменение наклона соответствующей кривой (ср. фиг. 1.12). Второй член в (6.188) возникает из-за флуктуаций. Они существенны в окрестности точки перехода $\alpha = \alpha_c$. Таким образом, теорию Ландау можно интерпретировать как теорию, в которой средние значения заменены наиболее вероятными значениями. Следует отметить, что вблизи точки перехода поведение $\langle q^2 \rangle$ не точно описывается формулой (6.187), т. е. расходимости, возникающей во втором члене, на самом деле нет, она есть следствие метода вычисления (6.185). Для иллюстрации читатель может сравнить поведение удельной теплоемкости с практически совпадающим поведением выходной мощности лазера выше и ниже порога.

Теория фазовых переходов второго рода Ландау оказывается весьма полезной для нахождения приближенного (а иногда даже точного) стационарного решения уравнения Фоккера — Планка в случае одной или нескольких переменных $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_n)$. Допустим, что при $\alpha > 0$ максимум стационарного решения $f(\mathbf{q})$ лежит в точке $\mathbf{q} = 0$. Исследуя поведение $f(\mathbf{q})$ при критическом значении α , поступаем следующим образом.

1) Записываем $f(\mathbf{q})$ в виде

$$f(\mathbf{q}) = \mathcal{N} \exp(-\hat{V}(\mathbf{q}))$$

(\mathcal{N} — нормировочный множитель).

2) Следуя Ландау, разложим $\mathcal{V}(\mathbf{q})$ в ряд Тейлора в окрестности $\mathbf{q} = 0$ вплоть до членов четвертого порядка по q

$$\hat{V}(\mathbf{q}) = \hat{V}(0) + \sum_{\mu} \hat{V}_{\mu} q_{\mu} + \frac{1}{2!} \sum_{\mu\nu} \hat{V}_{\mu\nu} q_{\mu} q_{\nu} + \frac{1}{3!} \sum_{\mu\nu\lambda} \hat{V}_{\mu\nu\lambda} q_{\mu} q_{\nu} q_{\lambda} + \\ + \frac{1}{4!} \sum_{\mu\nu\lambda k} \hat{V}_{\mu\nu\lambda k} q_{\mu} q_{\nu} q_{\lambda} q_k. \quad (6.189)$$

Индексы при \mathcal{V} обозначают дифференцирование \mathcal{V} по q_{μ} , q_{ν} , ... в точке $\mathbf{q} = 0$.

3) Потребуем, чтобы $\mathcal{V}(\mathbf{q})$ было инвариантно при всех тех преобразованиях \mathbf{q} , которые оставляют физическую задачу инвариантной. Это требование устанавливает соотношения между коэффициентами \hat{V}_{μ} , $\hat{V}_{\mu\nu}$, ..., благодаря чему число параметров разложения может быть значительно уменьшено. (Адекватные методы решения этих проблем даются теорией групп.) Если стационарное решение уравнения Фоккера — Планка единственно, требование симметрии по отношению к $f(\mathbf{q})$ [или $\mathcal{V}(\mathbf{q})$] может быть доказано строго.

Пример. Пусть задача инвариантна по отношению к инверсии $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{q}$. Тогда оператор L в $\dot{f} = Lf$ инвариантен, и $f(\mathbf{q})$ также инвариантен (при $\dot{f} = 0$). Подстановка $f(\mathbf{q}) = f(-\mathbf{q})$ и, следовательно, $\mathcal{V}(\mathbf{q}) = \mathcal{V}(-\mathbf{q})$ в (6.189) дает $V_{\mu} = 0$, $V_{\mu\nu\lambda} = 0$.

6.8. Аналогия с фазовыми переходами в непрерывной среде: параметр порядка, зависящий от пространственных координат

Рассмотрим снова пример ферромагнетика. В предыдущем разделе мы ввели полную намагниченность M . Разделим теперь магнетик на области (или «ячейки»), содержащие все еще большое число элементарных магнитов так, что можно говорить о «макроскопической» намагниченности каждой ячейки. С другой стороны, считаем ячейки малыми по сравнению с макроскопическими размерами, скажем порядка 1 см. Обозначив координату центра ячейки через \mathbf{x} , введем намагниченность $M(\mathbf{x})$, зависящую от пространственных координат. Обобщая эту идею, вводим зависящий от пространственных координат параметр порядка $q(\mathbf{x})$. Свободная энергия \mathcal{F} повсюду зависит от q . По аналогии с (6.171) $\mathcal{F}(\{q(\mathbf{x})\}, T)$ можно разложить в ряд по всем $q(\mathbf{x})$. Ограничиваясь рассмотрением системы, симметричной по отношению к инверсии, оставим в разложении лишь четные степени $q(\mathbf{x})$.

Рассмотрим форму этого разложения. В первом приближении будем считать, что ячейки \mathbf{x} не влияют друг на друга. Поэтому \mathcal{F} можно представлять в виде суммы (или интеграла в

приближении континуума) вкладов от каждой ячейки. Учет затем взаимодействие между соседними ячейками, вводя член, описывающий увеличение свободной энергии в случае, когда намагниченность $M(\mathbf{x})$ или в общем случае $q(\mathbf{x})$ в соседних ячейках отличаются друг от друга. Этот член равен $\gamma(\nabla q(\mathbf{x}))^2$. Таким образом, мы представляем \mathcal{F} в виде известного функционала Гинзбурга — Ландау:

$$\mathcal{F}(\{q(\mathbf{x})\}; T) = \mathcal{F}_0(0, T) + \int d^n x \left\{ \frac{\alpha}{2} q(\mathbf{x})^2 + \frac{\beta}{4} q(\mathbf{x})^4 + \frac{\gamma}{2} (\nabla q(\mathbf{x}))^2 \right\}. \quad (6.190)$$

В рамках феноменологического подхода соотношения (6.174) и (6.178) обобщаются следующим образом.

Функция распределения:

$$f(\{q(\mathbf{x})\}) = \mathcal{N} \exp[-\mathcal{F}/k_B T], \quad (6.191)$$

где \mathcal{F} определяется с помощью (6.190).

Уравнение релаксации $q(\mathbf{x})$:

$$\dot{q}(\mathbf{x}) = -\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta q(\mathbf{x})}, \quad (6.192)$$

где q теперь функция координаты \mathbf{x} и времени t (мы снова опускаем постоянный множитель в правой части). Подстановка (6.190) в (6.192) дает зависящее от времени уравнение Гинзбурга — Ландау:

$$\dot{q} = -\alpha q - \beta q^3 + \gamma \Delta q + (F). \quad (6.193)$$

Оно обладает следующими типичными свойствами: в линейном члене $-\alpha q$ коэффициент α изменяет знак при определенном «пороговом» значении параметра $T = T_c$; нелинейный член $-\beta q^3$ служит для стабилизации системы; имеется также диффузионный член $\gamma \Delta q$, где Δ — оператор Лапласа. Наконец для учета флуктуаций, специально введена флуктуирующая сила $F(\mathbf{x}, t)$. В разд. 7.6—7.8 будет развита теория, дающая уравнения типа (6.193) или его обобщения. Если флуктуирующие силы F гауссовы и марковские с равным нулю средним значением и если

$$\langle F(\mathbf{x}', t') F(\mathbf{x}, t) \rangle = Q \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'), \quad (6.194)$$

то уравнение Ланжевена (6.193) оказывается эквивалентно функциональному уравнению Фоккера — Планка

$$\dot{f} = \int d^n x \left\{ \frac{\delta}{\delta q(\mathbf{x})} (\alpha q(\mathbf{x}) + \beta q(\mathbf{x})^3 - \gamma \Delta q(\mathbf{x})) + \frac{Q}{2} \frac{\delta^2}{\delta q(\mathbf{x})^2} \right\} f. \quad (6.195)$$

Его стационарное решение [обобщение (6.116)] записывается как

$$f = \mathcal{N} \exp \left[-\frac{2}{Q} \int d^n x \left\{ \frac{\alpha}{2} q(x)^2 + \frac{\beta}{4} q(x)^4 + \frac{\gamma}{2} (\nabla q(x))^2 \right\} \right]. \quad (6.196)$$

Получение явных решений *нелинейного* уравнения (6.193) или *зависящего от времени* уравнения Фоккера — Планка (6.195) представляется невозможным, поскольку даже в случае, когда q не зависит от координат \mathbf{x} , решать соответствующие уравнения надо с помощью ЭВМ. Поэтому рассмотрим сначала для случая $\alpha > 0$ линейризованное уравнение (6.193)

$$\dot{q} = -\alpha q + \gamma \Delta q + F. \quad (6.197)$$

Его легко решить с помощью преобразования Фурье $q(\mathbf{x}, t)$ и $F(\mathbf{x}, t)$. Используя корреляционную функцию (6.194), мы можем вычислить двухточечную корреляционную функцию

$$\langle q(\mathbf{x}', t') q(\mathbf{x}, t) \rangle. \quad (6.198)$$

Приведем результат для одномерного случая при совпадающих моментах времени $t' = t$, но для различных пространственных точек:

$$\langle q(x', t) q(x, t) \rangle = Q/(\alpha\gamma)^{1/2} \exp \left(-\left(\frac{\alpha}{\gamma}\right)^{1/2} |x' - x| \right). \quad (6.199)$$

Множитель при $|x' - x|$ в показателе экспоненты имеет размерность (длина)⁻¹. Поэтому положим $l_c = (\alpha/\gamma)^{-1/2}$. Поскольку (6.199) описывает *корреляции* между пространственными точками, l_c называется корреляционной длиной. Очевидно, что

$$l_c \rightarrow \infty \text{ при } \alpha \rightarrow 0$$

по крайней мере в линейризованной теории. Показатель μ в $l_c \sim \alpha^\mu$ называется критическим показателем. В нашем случае $\mu = -1/2$. Корреляционная функция $\langle q(x', t) q(x, t) \rangle$ в нелинейном случае была получена с помощью численного счета на ЭВМ (см. конец данной главы). Во многих практических случаях параметр порядка $q(\mathbf{x})$ — комплексная величина. Обозначим его через $\xi(\mathbf{x})$. Тогда предыдущие уравнения можно заменить следующими.

Уравнение Ланжевена:

$$\dot{\xi} = -\alpha \xi - \beta |\xi|^2 \xi + \gamma \Delta \xi + F. \quad (6.200)$$

Корреляционная функция флуктуационных сил:

$$\langle FF \rangle = 0, \quad \langle F^* F^* \rangle = 0, \quad (6.201)$$

$$\langle F^*(\mathbf{x}', t) F(\mathbf{x}, t) \rangle = Q \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'). \quad (6.202)$$

Уравнение Фоккера — Планка

$$\dot{f} = \int d^n x \left\{ \frac{\delta}{\delta \xi(x)} (\alpha \xi(x) + \beta |\xi(x)|^2 \xi(x) - \gamma \Delta \xi(x)) + \right. \\ \left. + \text{Компл. сопр.} + \frac{Q}{2} \frac{\delta^2}{\delta \xi(x) \delta \xi^*(x)} \right\} f. \quad (6.203)$$

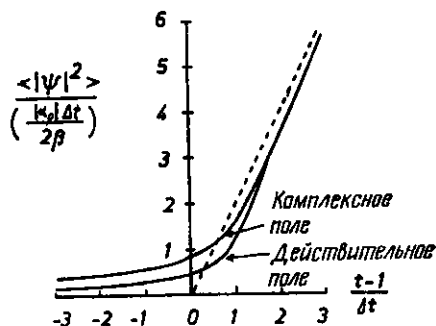
Стационарное решение уравнения Фоккера — Планка

$$f = \mathcal{N} \exp \left[-\frac{2}{Q} \int d^n x \left\{ \alpha |\xi(x)|^2 + \frac{\beta}{2} |\xi(x)|^4 + \gamma |\nabla \xi(x)|^2 \right\} \right]. \quad (6.204)$$

Типичная корреляционная функция имеет вид

$$\langle \xi^*(x', t') \xi(x, t) \rangle. \quad (6.205)$$

Корреляционные функции (6.198) и (6.205) при совпадающих моментах времени $t = t'$ были определены в *нелинейном* (т. е.



Фиг. 6.15. $\langle |\Psi|^2 \rangle$ в зависимости от «параметра накачки» $(t-1)/\Delta t$ (ср. текст); $\Delta t = 2(\beta Q/2I_0\alpha_0^2)$, $I_0 = (2\gamma/\alpha_0)^{1/2}$ (из работы [6.30]).

при $\beta \neq 0$) одномерном случае с помощью интегрирования по траектории и численного счета на ЭВМ. Чтобы одинаковым образом рассматривать случаи действительного q и комплексного ξ , положим

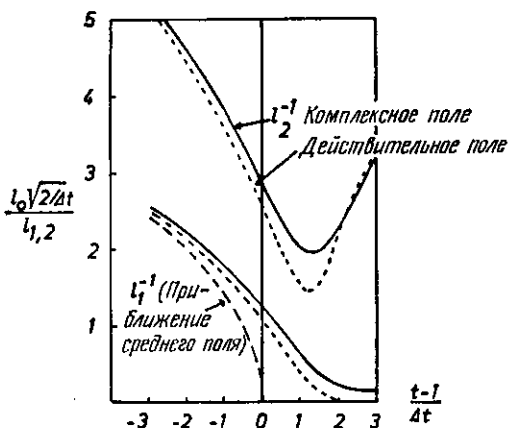
$$\left. \begin{array}{l} g(x) \\ \xi(x) \end{array} \right\} \equiv \Psi(x).$$

Можно показать, что для корреляционных функций амплитуд (6.198) и (6.205) хорошим приближением является

$$\langle \Psi^*(x', t) \Psi(x, t) \rangle = \langle |\Psi|^2 \rangle \exp(-I_1^{-1} |x - x'|), \quad (6.206)$$

т. е. их снова можно выразить через единственный пространственный параметр — корреляционную длину l_1 . $\langle |\Psi|^2 \rangle$ — сред-

нее от Ψ , вычисленное для стационарного распределения. По причинам, которые станут ясными позднее, положим $a = \alpha_0(1-t)$. (Для наглядности упомянем несколько примеров. В сверхпроводниках $t = T/T_c$, где T — абсолютная температура, T_c — критическая температура, $\alpha_0 < 0$; в лазерах $t = D/D_c$, где D — разность населенностей уровней (без учета насыщения), D_c — критическое значение D , $\alpha_0 > 0$; в химических ре-



Фиг. 6.16. Обратные длины корреляции l_1^{-1} и l_2^{-1} в случае действительного поля (пунктирные линии) и в случае комплексного поля (сплошные линии). Штриховая линия — линеаризованная теория (приближение «среднего поля»). (Из работы [6.30].)

акциях $t = b/b_c$, где b — концентрация определенного химического вещества, b_c — критическая концентрация и т. д.). Определим теперь длину $l_0 = (2\gamma/\alpha_0)^{1/2}$. Численные результаты для области вблизи порога показаны на фиг. 6.15 и 6.16 соответственно для $\langle |\Psi|^2 \rangle$ и l_1^{-1} , l_2^{-1} . Корреляционная функция интенсивности может быть (опять приближенно) выражена следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle |\Psi(x', t)|^2 |\Psi(x, t)|^2 \rangle - \langle |\Psi(x', t)|^2 \rangle \langle |\Psi(x, t)|^2 \rangle = \\ = \{ \langle |\Psi|^4 \rangle - \langle |\Psi|^2 \rangle^2 \} \exp(-l_2^{-1} |x - x'|). \end{aligned} \quad (6.207)$$

Численные результаты для l_2^{-1} вблизи порога приведены на фиг. 6.16.

Самоорганизация

ДОЛГОЖИВУЩИЕ СИСТЕМЫ ПОДЧИНЯЮТ СЕБЕ КОРОТКОЖИВУЩИЕ СИСТЕМЫ

В этой главе мы займемся нашей центральной темой, именно организацией и самоорганизацией. Прежде чем перейти к математическому рассмотрению, обсудим кратко, что мы понимаем под этими двумя словами в обычной жизни.

а) Организация

Рассмотрим, например, группу рабочих. Об организации говорят в том случае, если каждый рабочий действует точно определенным образом после получения указания извне, например от руководителя. Под словом организация понимают также, что регулируемое таким образом поведение приводит к объединенным действиям с целью производства определенного продукта.

б) Самоорганизация

Тот же самый процесс называется самоорганизацией, если внешние упорядочивающие воздействия отсутствуют, а рабочие трудятся коллективно благодаря взаимопониманию, устанавливающемуся между ними самими, причем в производстве продукта каждый рабочий выполняет свою функцию.

Попробуем теперь выразить это еще довольно туманное определение организации и самоорганизации в строгих математических терминах. Будем при этом иметь в виду, что мы должны развить теорию, применимую к широкому классу различных систем, включающих не только упомянутые выше социологические системы, но в еще большей степени физические, химические и биологические системы.

7.1. Организация

В приведенном примере причиной последующих действий рабочих были указания руководителя. Следовательно, мы должны выразить в математической форме причины и действия.

Рассмотрим сначала пример из механики: с помощью подъемника лыжники поднимаются вверх по склону холма. Здесь причины — силы, действующие на лыжников. Действие состоит в движении лыжников. Совершенно другой пример возьмем из химии — ряд сосудов, в которые постоянно поступают растворы различных химикатов. Поступающие химикаты (вход) вызывают реакцию, т. е. выход новых химических веществ. По крайней мере для этих примеров мы в состоянии выразить причины и действия количественно, например, вводя скорости лыжников или концентраций продуктов реакции.

Рассмотрим теперь, какой тип уравнений описывает связь между причинами и действиями (эффектами). Ограничим наш анализ тем случаем, когда действие (эффект), описываемое величиной q , изменяется за малый промежуток времени Δt на величину, пропорциональную этому промежутку Δt и величине F , являющейся мерой причины. Таким образом, математически мы рассматриваем только уравнения типа

$$\dot{q} = F_0(q(t); t).$$

Кроме того, потребуем, чтобы в отсутствие внешних сил действие или выход равнялись нулю: $q = 0$. Потребуем, далее, чтобы система возвращалась в состояние $q = 0$ после выключения действия силы, т. е. чтобы при $F = 0$ система была устойчива и с затуханием. Простейшее уравнение такого типа — это

$$\dot{q} = -\gamma q, \quad (7.1)$$

где γ — постоянная затухания. При включении внешней «силы» F получаем простое уравнение

$$\dot{q} = -\gamma q + F(t). \quad (7.2)$$

В случае химической реакции F есть функция концентрации химических реагентов. При рассмотрении динамики популяций F может задавать скорость поступления пищи и т. д. Решение (7.2) можно записать в виде

$$q(t) = \int_0^t e^{-\gamma(t-\tau)} F(\tau) d\tau, \quad (7.3)$$

где (как и в дальнейшем) мы пренебрегали переходными процессами. Формула (7.3) — простой пример следующего соотношения: величина q представляет собой отклик системы на приложенную силу $F(\tau)$. Очевидно, что значение q в момент t зависит от «приказов», отданных не только в момент t , но также в предыдущие моменты времени. В последующем мы рассмотрим случай, когда система реагирует мгновенно, т. е. когда $q(t)$ зависит только от $F(t)$.

Положим, например,

$$F(t) = ae^{-\delta t}. \quad (7.4)$$

С учетом (7.4) интеграл (7.3) можно вычислить сразу же, и мы получаем

$$q(t) = \frac{a}{\gamma - \delta} (e^{-\delta t} - e^{-\gamma t}). \quad (7.5)$$

Формула (7.5) дает возможность количественно выразить условие, при котором действие q происходит мгновенно. Это — случай $\gamma \gg \delta$. Тогда

$$q(t) \approx \frac{a}{\gamma} e^{-\delta t} \equiv \frac{1}{\gamma} F(t) \quad (7.6)$$

или, иначе говоря, постоянная времени $t_0 = 1/\gamma$, присущая системе, должна быть много меньше постоянной времени $t' = 1/\delta$, характерной для внешней силы. Назовем это допущение, имеющее фундаментальное значение для последующего изложения, «адиабатическим приближением». Тот же результат (7.6) получается, если с самого начала в уравнении (7.2) положить $\dot{q} = 0$, т. е. если решать уравнение

$$0 = -\gamma q + F(t). \quad (7.7)$$

Обобщим наше рассмотрение так, чтобы оно стало применимо к широкому классу систем, представляющих практический интерес. Рассмотрим набор подсистем, нумеруемых индексом μ . Каждую подсистему можно описать полным набором переменных $q_{\mu, 1}, \dots, q_{\mu, 2}$. Пусть, кроме того, имеется полный набор «сил» F_1, \dots, F_n . Между различными q существует связь, причем коэффициенты связи зависят от внешних сил F_j . Наконец, эти силы могут фигурировать в правой части неоднородного уравнения, как в (7.2), возможно, в виде сложной нелинейной функции F_j . В матричной форме наши уравнения имеют вид

$$\dot{\mathbf{q}}_{\mu} = A \mathbf{q}_{\mu} + B(\mathbf{F}) \mathbf{q}_{\mu} + C(\mathbf{F}), \quad (7.8)$$

где A и B — матрицы, не зависящие от \mathbf{q}_{μ} . Потребуем, чтобы все матричные элементы B , линейные или нелинейные функции F при стремлении \mathbf{F} к нулю исчезали. То же предполагается для C . Для обеспечения затухающего поведения системы (7.8) в отсутствие внешних сил (или, другими словами, для обеспечения устойчивости системы), потребуем, чтобы действительные части всех собственных значений матрицы A были бы отрицательны:

$$\text{Re} \lambda < 0. \quad (7.9)$$

Одновременно это гарантирует существование матрицы, обратной A , поскольку детерминант A отличен от нуля

$$\det A \neq 0. \quad (7.10)$$

Кроме того, благодаря нашим допущениям относительно B и C

$$\det |A + B(F)| \quad (7.11)$$

не равен нулю во всяком случае при достаточно малых F . Хотя система уравнений (7.8) линейна по q_μ , найти общее решение все еще очень сложно. Однако адиабатическое приближение дает возможность сразу найти единственное решение (7.8) в явном виде. Для этого допустим, что силы F изменяются гораздо медленнее координат свободной системы q_μ . Точно так же, как и раньше, это позволяет нам положить

$$\dot{q}_\mu \approx 0, \quad (7.12)$$

так что дифференциальные уравнения (7.8) сводятся к простым алгебраическим уравнениям, решение которых имеет вид

$$q_\mu = (A + B(F))^{-1} C(F). \quad (7.13)$$

Отметим, что A и B — матрицы, в то время как C — вектор. Для практических применений важно обобщение (7.8) на случай, когда величины A , B и C для различных подсистем различны. Обобщение производится заменой в (7.13)

$$\begin{aligned} A &\rightarrow A^{(\mu)}, \\ B &\rightarrow B^{(\mu)}, \\ C &\rightarrow C^{(\mu)}. \end{aligned} \quad (7.14)$$

Отклик q_μ на силы F , единственный и мгновенный в общем случае, представляет собой нелинейную функцию F .

Рассмотрим некоторые дальнейшие обобщения системы (7.8) и обсудим ее полезность.

а) Систему (7.8) можно заменить уравнениями, содержащими производные более высоких порядков от q_μ по времени. Поскольку уравнения с производными более высокого порядка всегда можно свести к системе уравнений более низкого, например первого, порядка, этот случай уже содержится в (7.8).

б) B и C могут зависеть от значений сил F в предшествующие моменты времени. Этот случай не представляет труда, если, как и прежде, ограничиться адиабатическим приближением, но очень труден, когда мы переходим к рассмотрению самоорганизации.

в) Правая часть (7.8) может быть нелинейной функцией q_μ . Этот случай встречается в практических приложениях. Его, однако, можно исключить из рассмотрения, если предположить, что в μ -системы сильно задемпфированы. Тогда q относительно малы, и правую часть (7.8) можно разложить по степеням q , причем во многих случаях можно оставить только линейные члены.

г) Позже мы проведем очень важное обобщение. Уравнение (7.8) полностью детерминистское: флуктуации в нем отсутствуют. Во многих же системах, встречающихся на практике, флуктуации играют большую роль.

В заключение можно сказать следующее. Для количественного описания организации мы используем уравнения (7.8) в адиабатическом приближении. Они описывают довольно широкий класс откликов, возникающих под действием внешних причин в физических, химических, биологических и, как мы увидим далее, социологических системах. Специально для физиков сделаем одно замечание. Значительное число результатов современной физики получено при анализе функций без использования адиабатического приближения. Без сомнения дальнейший прогресс в теории самоорганизации (см. ниже) будет достигнут, когда будут приняты во внимание эффекты временного запаздывания.

7.2. Самоорганизация

Довольно очевидно, что самоорганизацию можно описать, включив внешние силы как части полной системы. Однако в противоположность рассмотренным выше случаям, теперь внешние силы следует рассматривать не как заданные величины, а как переменные, подчиняющиеся уравнениям движения. Отождествляя F с q_1 и старую переменную q с q_2 , запишем конкретный пример таких уравнений:

$$\dot{q}_1 = -\gamma_1 q_1 - a q_1 q_2, \quad (7.15)$$

$$\dot{q}_2 = -\gamma_2 q_2 + b q_1^2. \quad (7.16)$$

Мы снова предполагаем наличие затухания в системе (7.16) в отсутствие взаимодействия с системой (7.15), что означает $\gamma_2 > 0$. Чтобы установить связь между данным и предыдущим случаями, введем условие справедливости адиабатического приближения:

$$\gamma_2 \gg \gamma_1. \quad (7.17)$$

Хотя γ_1 фигурирует в (7.15) со знаком минус, позднее будут рассмотрены оба случая: $\gamma_1 \geq 0$. Благодаря условию (7.17)

уравнение (7.16) можно решить приближенно, положив $\dot{q}_2 = 0$, что приводит к результату

$$q_2(t) \approx \gamma_2^{-1} b q_1^2(t). \quad (7.18)$$

Поскольку (7.18) указывает на то, что система (7.16) мгновенно следует за системой (7.15), можно сказать, что система (7.16) подчиняется системе (7.15). Однако подчиненная система в свою очередь действует на систему (7.15). Подставим q_2 из (7.18) в (7.15). Получаем уравнение

$$\dot{q}_1 = -\gamma_1 q_1 - \frac{ab}{\gamma_2} q_1^3, \quad (7.19)$$

которое уже встречалось в разд. 5.1. Там мы видели, что в случаях $\gamma_1 > 0$ и $\gamma_1 < 0$ решения совершенно различны. Когда $\gamma_1 > 0$, $q_1 = 0$, а, следовательно, и $q_2 = 0$, т. е. действия вообще нет. Если же $\gamma_1 < 0$, то стационарное решение (7.19) имеет вид

$$q_1 = \pm (|\gamma_1| \gamma_2 / ab)^{1/2}, \quad (7.20)$$

и, следовательно, в соответствии с (7.18) $q_2 \neq 0$. Таким образом, в системе, состоящей из двух подсистем (7.15) и (7.16), внутренние причины определяют конечную величину q_2 , т. е. действие ее отлично от нуля. Поскольку отсутствие или наличие действия зависит от того, равно или не равно нулю q_1 , мы могли бы назвать q_1 параметром действия.

По причинам, которые станут ясными позднее, когда будут рассматриваться сложные системы, q_1 описывает степень упорядоченности. Именно поэтому назовем q_1 «параметром порядка».

В общем случае «параметрами порядка» мы будем называть величины, или (на языке физики) моды, если они подчиняют себе другие подсистемы. Рассмотренный пример допускает следующее обобщение. Пусть имеется полный набор подсистем, описываемый различными переменными. Для их обозначения воспользуемся индексами одного типа, пробегающими значения от 1 до n . Допустим, что соответствующие уравнения имеют вид

$$\begin{aligned} \dot{q}_1 &= -\gamma_1 q_1 + g_1(q_1, \dots, q_n), \\ \dot{q}_2 &= -\gamma_2 q_2 + g_2(q_1, \dots, q_n), \\ &\dots \\ \dot{q}_n &= -\gamma_n q_n + g_n(q_1, \dots, q_n). \end{aligned} \quad (7.21)$$

Представим теперь, что мы разбили индексы на две группы, одна из которых — $i = 1, \dots, m$, — соответствует слабозатухающим модам, которые могут даже стать неустойчивыми (при $\gamma \leq 0$), а другая — $s = m + 1, \dots, n$ — соответствует устойчивым модам. Функции g_j — нелинейные функции q_1, \dots, q_n

(причем среди них нет постоянных или линейных членов), так что в первом приближении этими функциями можно пренебречь по сравнению с линейными членами в правых частях уравнений (7.21). Поскольку выполняется условие

$$\begin{aligned} \gamma_i \rightarrow 0, \text{ но } \gamma_s > 0 \text{ и конечно,} \\ i = 1, \dots, m; \quad s = m + 1, \dots, n, \end{aligned} \quad (7.22)$$

можно воспользоваться адиабатическим приближением, считая $\dot{q}_s = 0$. Предположим, кроме того, что, если γ_s велико (это следует проверять в каждом конкретном случае), $|q_s|$ много меньше $|q_i|$. Как следствие в g_s можно положить все $q_s = 0$. Это позволяет решить (7.21) относительно переменных с индексами $s = m + 1, \dots, n$, считая $q_1 \dots q_n$ заданными величинами:

$$\gamma_s q_s = g_s(q_1, \dots, q_n), \quad s = m + 1, \dots, n, \quad (7.23)$$

причем в g_s следует положить q_{m+1}, \dots, q_n равными нулю. Подстановка (7.23) в первые m уравнений в (7.21) дает замкнутую систему нелинейных уравнений для q_i

$$\dot{q}_i = -\gamma_i g_i + g_i(q_1, \dots, q_m; q_{m+1}(q_i), \dots). \quad (7.24)$$

Решения этих уравнений определяют, возможно ли ненулевое действие подсистем. Простейший пример (7.24) — уравнение типа (7.19) или, например, типа

$$\dot{q}_1 = -\gamma_1 q_1 + a q_1^2 + b q_1^3. \quad (7.25)$$

Для системы уравнений (7.21) характерно то, что по затуханию ее можно разбить на две четко выделенные группы: в одной группе содержатся уравнения для устойчивых переменных, и в другой — для (виртуально) неустойчивых переменных (или «мод»). Покажем теперь, что самоорганизованное поведение не обязательно подчинено такому ограничению. Будем исходить из системы уравнений, в которой с самого начала не предполагается, что переменные q могут быть разбиты на две четко отличающиеся группы. Запишем эту систему в виде

$$\dot{q}_j = h_j(q_1, \dots, q_n), \quad (7.26)$$

где h_j в общем случае — нелинейные функции q . Предположим, что система (7.26) такова, что допускает стационарные решения, которые мы обозначим через q_j^0 .

Для лучшего понимания дальнейшего посмотрим на более простую систему (7.21). Здесь правые части зависят от определенного набора параметров, именно набора γ . Поэтому и в более общем случае мы считаем, что h_j в правых частях (7.26) зависят от определенных параметров $\sigma_1, \dots, \sigma_l$. Допустим сначала, что эти параметры выбираются так, что q^0 представляют

собой устойчивые значения. Переносим начало отсчета системы координат, в которой измеряются q , мы можем все такие q^0 обратить в нули. Это состояние будет называться состоянием покоя, в нем действие отсутствует.

Далее положим

$$q_j(t) = q_j^0 + u_j(t) \quad \text{или} \quad \mathbf{q}(t) = \mathbf{q}^0 + \mathbf{u}(t) \quad (7.27)$$

и поступим так же, как при анализе устойчивости [ср. разд. 5.3, где вместо $\xi(t)$ теперь стоит $\mathbf{u}(t)$]. Подставляем (7.27) в (7.26). Поскольку система устойчива, можно считать, что u_j остаются малыми, так что уравнения (7.26) можно линеаризовать (при подходящих допущениях относительно h_j , которые мы здесь не будем формулировать явно). Запишем линеаризованные уравнения в виде

$$\dot{u}_j = \sum_{j'} L_{jj'} u_{j'}, \quad (7.28)$$

где матричные элементы $L_{jj'}$ зависят от \mathbf{q}^0 и одновременно от параметров $\sigma_1, \sigma_2, \dots$. Можно записать (7.28) в компактном виде

$$\dot{\mathbf{u}} = L\mathbf{u}. \quad (7.29)$$

Уравнения (7.28) или (7.29) представляют собой систему дифференциальных уравнений первого порядка с постоянными коэффициентами. Решения их находятся так же, как в (5.3), а именно:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^{(\mu)}(0) \exp(\lambda_\mu t), \quad (7.30)$$

где λ_μ — собственные значения задачи

$$\lambda_\mu \mathbf{u}^{(\mu)}(0) = L\mathbf{u}^{(\mu)}(0), \quad (7.31)$$

а $\mathbf{u}^{(\mu)}(0)$ в правой части — собственные векторы. Наиболее общее решение (7.28) или (7.29) получается суперпозицией (7.30)

$$\mathbf{u} = \sum_{\mu} \xi_{\mu} \exp(\lambda_{\mu} t) \mathbf{u}^{(\mu)}(0) \quad (7.32)$$

с произвольными постоянными коэффициентами ξ_{μ} . Введем левосторонние собственные векторы $\mathbf{v}^{(\mu)}$, которые подчиняются уравнению

$$\lambda_{\mu} \mathbf{v}^{(\mu)} = \mathbf{v}^{(\mu)} L. \quad (7.33)$$

Поскольку по предположению система устойчива, действительные части всех собственных значений λ_{μ} отрицательны. Потребуем теперь, чтобы разложение (7.27) удовлетворяло исходным нелинейным уравнениям (7.26), при этом неизвестной,

подлежащей определению, является функция $u(t)$:

$$\dot{u} = Lu + N(u). \quad (7.34)$$

Линейная часть Lu уже встречалась нам в (7.28); N описывает вклад от нелинейных членов. Представим вектор $u(t)$ как суперпозицию правосторонних собственных векторов (7.30) в форме (7.32), где теперь, однако, ξ — неизвестные функции времени, а $\exp(\lambda_\mu t)$ опущены. Чтобы найти подходящие уравнения для зависящих от времени амплитуд $\xi_\mu(t)$, умножим (7.34) слева на

$$v^{(\mu)}(0) \quad (7.35)$$

и учтем условие ортогональности

$$\langle v^{(\mu)} | u^{(\mu')} \rangle = \delta_{\mu\mu'}. \quad (7.36)$$

Тогда (7.34) преобразуется к виду

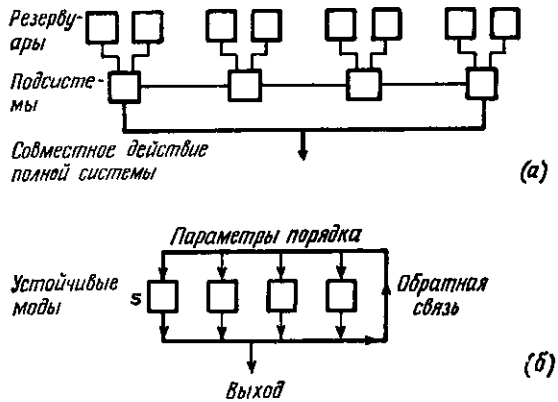
$$\dot{\xi}_\mu = \lambda_\mu \xi_\mu + g_\mu(\xi_1, \xi_2, \dots), \quad (7.37)$$

где

$$g_\mu = \langle v^{(\mu)} | N \left(\sum_\mu \xi_\mu u^{(\mu)} \right) \rangle. \quad (7.38)$$

Левая часть (7.37) получается из соответствующей левой части (7.34). Первый член в правой части (7.37) следует из первого члена в правой части (7.34). Подобным же образом N преобразуется в g . Отметим, что g_μ — нелинейная функция ξ . Если сопоставить ξ_μ с q_j и λ_μ с γ_j , можно заметить, что (7.37) имеет точно такой же вид, что и (7.21), так что здесь можно непосредственно использовать наш предыдущий анализ. Изменяем параметры $\sigma_1, \sigma_2, \dots$ так, чтобы система (7.28) становилась неустойчивой, или, другими словами, чтобы у одной или нескольких λ_μ действительная часть обращалась в нуль или становилась положительной, в то время как остальные λ были по-прежнему связаны с затухающими модами. При этом моды ξ_μ с $\text{Re } \lambda_\mu \geq 0$ будут играть роль параметров порядка, которые подчиняют себе все остальные моды. В этой процедуре мы считаем, что для заданного набора значений параметров $\sigma_1, \dots, \sigma_n$ имеются две различные группы λ_μ .

Во многих практических приложениях (см. разд. 8.2) становятся неустойчивыми, т. е. $\text{Re } \lambda_\mu \geq 0$, лишь одна или несколько мод ξ_μ . Если все остальные моды ξ_μ остаются затухающими, что опять-таки имеет место во многих практических случаях, то мы можем с полным основанием использовать процедуру адиабатического исключения. Отсюда получаем важное следствие: поскольку все затухающие моды адиабатически следуют за параметрами порядка, поведение всей системы определяется поведением небольшого числа этих параметров. Таким образом, даже



Фиг. 7.1. *а* — типичный пример системы, состоящей из взаимодействующих подсистем, каждая из которых связана с резервуаром. Резервуары имеют много степеней свободы, и наше знание об их состоянии ограничено. Резервуары рассматриваются с помощью теории информации (в физике — с помощью термодинамики или статистической физики). После исключения резервуарных переменных определяются «неустойчивые» моды подсистем, которые являются параметрами порядка; *б* — во многих случаях устойчивые моды обеспечивают обратную связь, что приводит к отбору и стабилизации определенных конфигураций параметров порядка.

очень сложная система может демонстрировать хорошо упорядоченное поведение. Как мы видели в предыдущих разделах, уравнения для параметров порядка допускают возможность появления бифуркации. Как следствие этого сложная система может находиться в состояниях, описываемых различными «модами», которые вполне определяются поведением параметров порядка (фиг. 7.1). До сих пор изложение в настоящей главе было довольно абстрактным. Поэтому мы советуем читателю повторить весь вывод для конкретного примера, приведенного в упражнении. В практических приложениях часто встречается иерархическая структура, в которой постоянные релаксации могут быть сгруппированы таким образом, что

$$\gamma^{(1)} \gg \gamma^{(2)} \gg \gamma^{(3)} \dots$$

В этом случае можно применять процедуру адиабатического исключения сначала по отношению к переменной, связанной с $\gamma^{(1)}$. Затем исключается переменная, связанная с $\gamma^{(2)}$ и т. д.

Наше рассмотрение позволяет сделать три обобщения, которые совершенно необходимы в целом ряде важных практических случаев.

1) Уравнения (7.26), или эквивалентные им (7.37), страдают принципиальным недостатком. Допустим, что устойчивому режиму соответствуют параметры σ_1, σ_2 . Тогда в стационарном режиме все $u = 0$, или, что то же самое, все $\xi = 0$. Когда мы переходим к неустойчивому режиму, $\xi = 0$ по-прежнему остается одним из решений, и система никогда не переходит в состояния новых бифуркаций. Таким образом, для объяснения появления самоорганизации требуются дополнительные аргументы. Они следуют из того факта, что практически во всех системах имеются флуктуации, которые смещают систему из неустойчивой точки в новые устойчивые точки с $\xi \neq 0$ (ср. разд. 7.3).

2) В случае если λ имеют мнимые части, метод адиабатического исключения следует применять с осторожностью. Описанную выше процедуру можно применять лишь тогда, когда также и мнимые части $\lambda_{\text{неуст}}$ много меньше, чем действительные части $\lambda_{\text{уст}}$.

3) До сих пор мы рассматривали только дискретные системы, в которых переменные q зависели от дискретных индексов j . В непрерывно протяженных средах, например в жидкости или в непрерывных моделях нейронных сетей, переменные q непрерывно зависят от пространственной координаты x .

Перечисленные пункты 1—3 будут полностью учтены методом, описанным в разд. 7.7—7.11.

Выше неявно предполагалось, что после адиабатического исключения устойчивых мод мы получаем уравнения для параметров порядка, которые теперь стабилизируются на определенном значении [см. (7.19)]. Это условие самосогласованности следует проверять в каждом отдельном случае. В разд. 7.8 мы дадим обобщение настоящей процедуры, которое может приводить к стабилизации параметров порядка в более высоких порядках определенной процедуры итераций. Наконец, могут встретиться определенные исключительные случаи, когда постоянные затухания γ_s мод недостаточно велики. Рассмотрим, например, уравнение для затухающей моды

$$\dot{q}_s = -\gamma_s q_s + q_i q_s + b q_i^2.$$

Если параметр порядка q_i становится слишком большим, так что $q_i - \gamma_s > 0$, процедура адиабатического исключения больше не применима, поскольку $\gamma_{\text{эфф}} \equiv -\gamma_s + q_i > 0$. В таких случаях имеют место очень интересные новые эффекты, которые используются, например, в электронике для построения так называемого «универсального контура». К обсуждению этих вопросов мы вернемся в разд. 12.4.

Упражнение к разд. 7.2

Рассмотрите уравнения

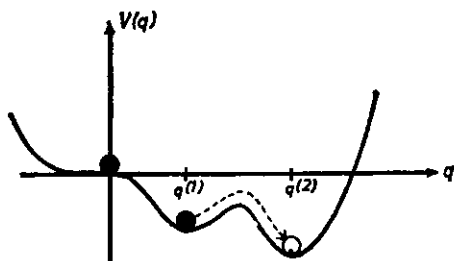
$$\dot{q}_1 = -q_1 + \beta q_2 - a(q_1^2 - q_2^2) \equiv h_1(q_1, q_2), \quad (У.1)$$

$$\dot{q}_2 = \beta q_1 - q_2 + b(q_1 + q_2)^2 \equiv h_2(q_1, q_2). \quad (У.2)$$

Аналогично тому, как мы поступали в цепочке вывода (7.27) — (7.38), и рассматривая β как параметр ($\beta \geq 0$), изменяющийся от значения $\beta = 0$, определите $\beta = \beta_c$ из условия $\lambda_1 = 0$.

7.3. Роль флуктуаций: надежность или адаптивность? Переключение

Типичные уравнения самоорганизующихся систем должны быть однородными, т. е. их решением должно быть $q = 0$ (или сводится к нему после тривиального смещения начала отсчета системы координат). Однако, если первоначально неактивная

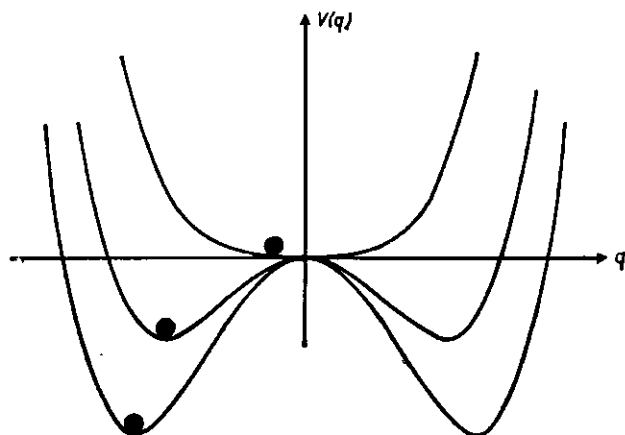


Фиг. 7.2. (Ср. текст.)

система имеет решение $q = 0$, она остается в точке $q = 0$ все время, и самоорганизации не происходит. Чтобы самоорганизация возникла, нужен определенный начальный толчок или случайно повторяющиеся толчки. Такие толчки осуществляются случайными силами, с которыми мы познакомились в гл. 6. В любой конкретной системе такие флуктуации имеют место. Назовем лишь несколько примеров: в лазерах это спонтанное излучение света, в гидродинамике — гидродинамические флуктуации, в эволюционной системе — мутации.

После того как самоорганизация произошла и система находится в определенном состоянии $q^{(s)}$, именно флуктуации переводят систему в новые состояния. Рассмотрим фиг. 7.2, соответствующую системе с единственным параметром порядка q . Если бы не флуктуации, система никогда не «узнала» бы, что

в точке $q = q^{(2)}$ ее состояние будет еще более устойчивым, а флуктуации могут перевести систему из $q^{(1)}$ в $q^{(2)}$ посредством некоторого диффузионного процесса. Поскольку q описывает макроскопическое поведение системы, среди новых состояний могут оказаться и такие, в которых система лучше приспособлена к окружающей среде. Если предполагать, что имеется ансамбль таких систем и они конкурируют между собой, то в игру вступает отбор (ср. разд. 10.3). Таким образом, флуктуации и отбор приводят к эволюции систем.



Фиг. 7.3. Переключение прибора путем деформации потенциала $V(q)$ (по Ландауэру).

С другой стороны, определенные приборы, например туннельные диоды в электронике, работают в состояниях, которые описываются параметром порядка q и характеризуются кривой эффективного потенциала типа изображенной на фиг. 7.3. Посредством внешнего воздействия мы можем перевести туннельный диод (или другую систему) в состояние $q^{(1)}$ и, таким образом, хранить информацию в состоянии $q^{(1)}$. С этим состоянием связана определенная макроскопическая характеристика системы, например определенный электрический ток. Таким образом, мы можем количественно измерить состояние системы извне, и прибор работает в качестве *запоминающего устройства*. Однако благодаря флуктуациям система может продиффундировать в состояние $q^{(2)}$, теряя при этом свою память. Следовательно, из-за флуктуаций *надежность* прибора понижается.

Для обработки информации мы должны быть в состоянии *переключать* прибор путем перевода его из состояния $q^{(1)}$ в $q^{(2)}$. Это можно осуществлять, постепенно понижая потенциальный

барьер (см. фиг. 7.3). Диффузия тогда переводит систему из $q^{(1)}$ в $q^{(2)}$. После того как потенциальный барьер вновь повысится, система окажется захваченной в состоянии $q^{(2)}$. Возможно, что в природе эволюция осуществляется путем изменения внешних параметров, и только что описанный процесс переключения играет роль в развитии новых видов. Таким образом, величина флуктуации параметра порядка оказывает решающее влияние на характер функционирования системы, причем ее адаптивность и легкость переключения требуют, чтобы флуктуации были велики, а минимумы на потенциальной кривой неглубокие, округлые, в то время как надежность, напротив, означает требование малых флуктуаций и глубоких потенциальных минимумов. Как можно контролировать величину флуктуаций? В самоорганизующихся системах, состоящих из нескольких (идентичных) подсистем, этого можно достичь, меняя число компонентов. Каждая подсистема s с фиксированным (т. е. нефлуктуирующим) параметром порядка имеет детерминированный выход $q_d^{(s)}$ и флуктуирующий выход $q_r^{(s)}$. Допустим, что величина, характеризующая полный выход, аддитивна

$$q^{(s)} = q_d^{(s)} + q_r^{(s)}. \quad (7.39)$$

Допустим далее, что $q^{(s)}$ — независимые стохастические величины. Тогда полную величину выхода $q_{\text{полн}} = \sum_s q^{(s)}$ можно рассматривать с помощью центральной предельной теоремы (см. разд. 2.15). Полный выход растет пропорционально числу подсистем N , в то время как флуктуации растут только как \sqrt{N} . Таким образом, надежность и адаптивность можно контролировать, просто изменяя число подсистем. Отметим, что проведенная оценка основана на анализе линейного соотношения (7.39). На самом же деле, обратная связь, присущая нелинейным уравнениям, приводит к еще более значительному подавлению шума, что будет наиболее четко показано на примере лазера (гл. 8).

В заключение рассмотрим надежность системы с точки зрения ее устойчивости по отношению к неадекватному функционированию отдельных ее подсистем. Для иллюстрации поведения самоорганизующихся подсистем рассмотрим случай лазера (или нейронной сети). Предположим, что излучение света атомами лазера происходит регулярным образом: все атомы излучают свет на одной и той же частоте ω_0 . Пусть далее некоторое (небольшое) число атомов имеют другую частоту перехода ω_1 . В то время как в обычной лампе происходит излучение обеих линий ω_0 и ω_1 , что указывает на несогласованное функционирование подсистем, в лазере (благодаря нелинейностям) излучение происходит на *одной частоте* ω_0 . Это — следствие

конкуренции между различными параметрами порядка (ср. разд. 5.4). Аналогичное поведение можно ожидать в системе нейронов, если некоторые из них попытаются работать рассогласованно. В этих случаях выходной сигнал станет разве что слабее, но все его характерные особенности сохранятся. Флуктуации подсистем остаются малыми по сравнению с «правильным» макроскопическим параметром порядка.

7.4*. Адиабатическое исключение быстро релаксирующих переменных из уравнения Фоккера — Планка

В разд. 7.1 и 7.2 были описаны методы исключения из уравнений движения быстро релаксирующих переменных. Иногда, например при рассмотрении динамики химических реакций, уравнение Фоккера — Планка получить проще, чем соответствующие уравнения Ланжевена. Поэтому желательно развить метод адиабатического исключения для уравнения Фоккера — Планка. Основные идеи мы объясним на примере (7.15) и (7.16), где теперь учтем флуктуации. Для различения «устойчивой» и «неустойчивой» мод заменим индекс 1 индексом u (неустойчивая мода) и 2 — индексом s (устойчивая мода). Уравнение Фоккера — Планка, соответствующее (7.15) и (7.16), имеет вид

$$\begin{aligned} \dot{f}(q_u, q_s) = & \\ = & \left\{ \frac{\partial}{\partial q_u} \underbrace{(\gamma_u q_u + a q_u q_s)}_{-F_u} + \frac{\partial}{\partial q_s} \underbrace{(\gamma_s q_s - b q_u^2)}_{-F_u} \right\} f(q_u, q_s) + \\ & + \frac{1}{2} \left(Q_u \frac{\partial^2}{\partial q_u^2} + Q_s \frac{\partial^2}{\partial q_s^2} \right) f(q_u, q_s). \end{aligned} \quad (7.40)$$

Запишем совместную функцию распределения $f(q_u, q_s)$ в виде

$$f(q_u, q_s) = h(q_s | q_u) g(q_u), \quad (7.41)$$

где h и g подчиняются условию нормировки

$$\int h(q_s | q_u) dq_s = 1, \quad (7.42)$$

$$\int g(q_u) dq_u = 1. \quad (7.43)$$

Очевидно, что $h(q_s | q_u)$ можно интерпретировать как условную вероятность нахождения значения q_s при условии, что q_u фиксировано. Наша цель — получить уравнение для $g(q_u)$, т. е. ис-

ключить q_s . Подставляя (7.41) в (7.40), получаем

$$\begin{aligned} \dot{g}h + g\dot{h} = & - \frac{\partial}{\partial q_u} (F_u g h) + \frac{1}{2} Q_u \frac{\partial^2 g}{\partial q_u^2} - g \frac{\partial}{\partial q_s} (F_s h) + \\ & + \frac{1}{2} Q_s g \frac{\partial^2 h}{\partial q_s^2} + Q_u \left(\frac{\partial g}{\partial q_u} \frac{\partial h}{\partial q_u} + \frac{1}{2} g \frac{\partial^2 h}{\partial q_u^2} \right). \end{aligned} \quad (7.44)$$

Чтобы получить уравнения только для $g(q_u)$, проинтегрируем (7.44) по q_s . Используя (7.42), получаем

$$\dot{g}(q_u) = - \frac{\partial}{\partial q_u} \int \underbrace{F_u h dq_s}_{-\hat{F}} g(q_u) + \frac{1}{2} Q_u \frac{\partial^2 g}{\partial q_u^2}. \quad (7.45)$$

В (7.45) мы используем обозначение

$$\hat{F}(q_u) = \int F_u(q_u, q_s) h(q_s | q_u) dq_s. \quad (7.46)$$

Очевидно, что (7.45) содержит все еще не известную функцию $h(q_s | q_u)$. Более внимательный анализ (7.44) показывает, что h разумно определить уравнением

$$\dot{h} = - \frac{\partial}{\partial q_s} F_s h + \frac{1}{2} Q_s \frac{\partial^2 h}{\partial q_s^2} \equiv L_s h. \quad (7.47)$$

Это означает, что по предположению как функция от q_u h изменяется гораздо медленнее, чем как функция от q_s , или, другими словами, по сравнению с соответствующими производными по q_s производными первого (второго) порядка от h по q_u можно пренебречь. Как мы увидим далее, это требование выполняется, если γ_s достаточно велико. Потребуем теперь, чтобы $\dot{h} = 0$, так чтобы h удовлетворяло уравнению

$$L_s h = 0, \quad (7.48)$$

где L_s — дифференциальный оператор в правой части (7.47). Поскольку в нашем конкретном примере

$$F_s = -\gamma_s q_s + \varphi(q_u), \quad (7.49)$$

решение (7.48) можно найти в явном виде с помощью (6.129) (отметим, что q_u здесь рассматривается как постоянный параметр)

$$h(q_s | q_u) = \mathcal{N} \exp \left\{ -Q_s^{-1} \gamma_s (q_s - \varphi(q_u) / \gamma_s)^2 \right\}. \quad (7.50)$$

Поскольку практически во всех применениях F_u составлена из степеней q_s , интеграл (7.46) можно вычислить в явном виде.

В рассматриваемом примере

$$\hat{F} = -\gamma_u q_u + \frac{1}{\gamma_s} \varphi(q_u) q_u. \quad (7.51)$$

При условии что адиабатическое приближение справедливо, приведенную процедуру можно применять к функциям F_u и F_s общего вида [вместо частного случая (7.40)]. В случае одного измерения (7.48) можно решить явно (см. разд. 6.4). Однако и в многомерных задачах (см. упражнение) (7.48) в ряде случаев может быть решено, например, если выполняются условия потенциальности (6.114)–(6.116). Отметим, имея в виду разд. 7.6 и 7.7, что изложенная здесь процедура применима также к функциональным уравнениям Фоккера — Планка.

Упражнение к разд. 7.4

Обобщите вышеприведенную процедуру на случай набора q_u и q_s , $u = 1, \dots, k$, $s = 1, \dots, l$.

7.5*. Адиабатическое исключение быстро релаксирующих переменных из кинетического уравнения

В ряде приложений встречаются медленные и быстрые (устойчивые) переменные, точнее стохастические переменные X_s , X_u , распределение вероятностей которых подчиняется кинетическому уравнению (типа Больцмана). В этом случае устойчивые переменные из кинетического уравнения можно исключить с помощью метода, аналогичного процедуре, использованной в случае уравнения Фоккера — Планка. Обозначим значения неустойчивых (устойчивых) переменных через \mathbf{m}_u (\mathbf{m}_s). Распределение вероятностей P подчиняется кинетическому уравнению (4.111)

$$\begin{aligned} \dot{P}(\mathbf{m}_s, \mathbf{m}_u; t) = & \sum_{\mathbf{m}'_s, \mathbf{m}'_u} \omega(\mathbf{m}_s, \mathbf{m}_u; \mathbf{m}'_s, \mathbf{m}'_u) P(\mathbf{m}'_s, \mathbf{m}'_u; t) - \\ & - P(\mathbf{m}_s, \mathbf{m}_u; t) \sum_{\mathbf{m}'_s, \mathbf{m}'_u} \omega(\mathbf{m}'_s, \mathbf{m}'_u; \mathbf{m}_s, \mathbf{m}_u). \end{aligned} \quad (7.52)$$

Положим

$$P(\mathbf{m}_s, \mathbf{m}_u; t) = G(\mathbf{m}_u) H(\mathbf{m}_s | \mathbf{m}_u) \quad (7.53)$$

и потребуем, чтобы

$$\sum_{\mathbf{m}_s} H(\mathbf{m}_s | \mathbf{m}_u) = 1, \quad (7.54)$$

$$\sum_{\mathbf{m}_u} G(\mathbf{m}_u) = 1. \quad (7.55)$$

Подставляя (7.53) в (7.52) и суммируя обе части уравнения по m_s , получаем следующее, пока еще точное, уравнение:

$$\dot{G}(m_u) = \sum_{m_u} \tilde{w}(m_u; m'_u) G(m'_u) - G(m_u) \sum_{m_u} \tilde{w}(m'_u; m_u), \quad (7.56)$$

где

$$\tilde{w}(m_u, m'_u) = \sum_{m_s, m'_s} w(m_s, m_u; m'_s, m'_u) H(m'_s | m'_u). \quad (7.57)$$

Чтобы вывести уравнение для условной вероятности $H(m_s | m_u)$, примем гипотезу адиабатичности: предположим, что X_u изменяется гораздо медленнее X_s . Как следствие этого H определяется из той части (7.52), которая описывает переходы между m'_s и m_s , происходящие при фиксированных $m_u = m'_u$. Положив $H = 0$, получаем

$$\sum_{m'_s} w(m_s, m_u; m'_s, m_u) H(m'_s | m_u) - H(m_s | m_u) \sum_{m'_s} w(m'_s, m_u; m_s, m_u) = 0. \quad (7.58)$$

Уравнения (7.58) и (7.56) могут быть решены явно в ряде случаев, например, когда выполняется условие детального равновесия. Справедливость этой процедуры может быть проверена подстановкой (7.53) [с G и H , определенными из (7.56) и (7.58)] в (7.52) и оценкой остающихся после сокращения членов. Если адиабатическое приближение справедливо, эти члены могут быть учтены как малое возмущение. Подставляя в (7.57) H из (7.58), получаем для \tilde{w} явное выражение, которое теперь может быть использовано в (7.56). Уравнение (7.56) определяет распределение вероятностей G параметров порядка.

7.6. Самоорганизация

в непрерывно распределенных средах.

Основные черты математического описания

В этом и последующих разделах рассматриваются уравнения движения непрерывно распределенных систем с флуктуациями. Сначала мы допускаем такие значения внешних параметров, при которых возможны лишь устойчивые решения. Линеаризуя затем уравнения, находим набор мод. При изменении внешних параметров некоторые моды становятся неустойчивыми — их мы выбираем в качестве параметров порядка. Поскольку их времена релаксации стремятся к бесконечности, затухающие моды можно адиабатически исключить и в резуль-

тате получить систему нелинейных связанных уравнений для параметров порядка. В двумерном и трехмерном случаях они описывают, например, гексагональные пространственные структуры. Развита нами процедура имеет многочисленные практические приложения (см. гл. 8).

Для разъяснения нашего метода рассмотрим общий вид уравнений, используемых в гидродинамике, лазерах, нелинейной оптике, в моделях химических реакций и т. п. Для конкретности рассмотрим макроскопические переменные, хотя во многих случаях метод применим также и к микроскопическим величинам. Обозначим физические величины символом $U = (U_1, U_2, \dots)$. В лазерах, например, U обозначает напряженность электрического поля, поляризацию среды и плотность разности населенностей уровней активных атомов. В нелинейной оптике U соответствует амплитудам нескольких взаимодействующих мод. В гидродинамике U может быть, например, компонентами поля скоростей, плотностью и температурой. В химии U обозначает числа (или плотности) молекул, принимающих участие в химической реакции. Во всех перечисленных случаях U подчиняется уравнениям типа

$$\frac{\partial}{\partial t} U_\mu = G_\mu(\nabla, U) + D_\mu \nabla^2 U_\mu + F_\mu(t); \quad \mu = 1, 2, \dots, n. \quad (7.59)$$

Здесь G_μ — нелинейные функции U и, возможно, градиента ∇U . В большинстве приложений, например в лазерах и гидродинамике, G — линейная или билинейная функция U , хотя в определенных случаях (особенно в моделях химических реакций) могут встречаться и кубические члены, описывающие взаимодействие между различными подсистемами. Следующий член в (7.59) описывает диффузию (коэффициент D действителен) или распространение волн (коэффициент D мнимый). В последнем случае вторая производная по времени, фигурирующая в волновом уравнении, заменена в (7.59) первой производной с помощью «приближения медленно меняющихся амплитуд». F_μ — флуктуирующие силы, обусловленные взаимодействием с внешними резервуарами и диссипацией внутри системы. Эти силы связаны с диссипативными членами, фигурирующими в (7.59). Здесь мы не будем выводить уравнения (7.59).

Наша цель — вывести из (7.59) уравнения для незатухающих мод, нарастающих до макроскопических значений и определяющих динамику системы в окрестности точки неустойчивости. Эти моды образуют остов, вырастающий из флуктуаций, превышающих порог неустойчивости. Они, таким образом, описывают «эмбриональное» состояние возникающей пространственно-временной структуры.

7.7*. Обобщенные уравнения Гинзбурга — Ландау для неравновесных фазовых переходов

Перейдем к рассмотрению (7.59). Пусть функции G_μ в (7.59) зависят от внешних параметров $\sigma_1, \sigma_2, \dots$ (например, от энергии, подводимой к системе). Рассмотрим сначала такие значения σ , при которых $\mathbf{U} = \mathbf{U}_0$ представляет собой устойчивое решение (7.59). При высокой степени неустойчивости \mathbf{U}_i может зависеть от пространственных и временной координат следующим образом:

$$\mathbf{U}_i(\mathbf{x}) = \sum_m T_{im} \tilde{\mathbf{U}}_m \exp(i\mathbf{k}_m \mathbf{x} - i\omega_m t).$$

В ряде случаев зависимость \mathbf{U}_i от \mathbf{x} и t может быть устранена с помощью некоторого преобразования, так что снова получаются не зависящие от времени и пространственных координат величины \mathbf{U}_0 (или $\tilde{\mathbf{U}}_0$). Представим теперь \mathbf{U} в виде двух частей:

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}_0 + \mathbf{q}, \quad (7.60)$$

где

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} q_1(\mathbf{x}, t) \\ \vdots \\ q_n(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix}. \quad (7.61)$$

Разбив правую часть (7.59) на линейную часть $K\mathbf{q}$ и нелинейную часть \mathbf{g} , запишем (7.59) в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - K(\nabla^2) \right) \mathbf{q} = \mathbf{g}(\mathbf{q}) + F(t). \quad (7.62)$$

Здесь матрица

$$K = (\hat{K}_{\mu\nu}) \quad (7.63)$$

имеет вид

$$\hat{K}_{\mu\nu} = K_{\mu\nu} + \delta_{\mu\nu} D_\mu \nabla^2, \quad \text{где } K_{\mu\nu} = \left. \frac{\partial G_\mu}{\partial U_\nu} \right|_{U_{\nu,0}}. \quad (7.64)$$

Излагаемый метод применим, однако, и в случае, когда матрица K зависит от ∇ произвольным образом. Вектор \mathbf{g} задается в виде

$$g_i(\mathbf{q}) = \sum_{\mu\nu} q_\mu g_{i\mu\nu}^{(2)}(\nabla) q_\nu + \sum_{\mu\nu\kappa} g_{i\mu\nu\kappa}^{(3)} q_\mu q_\nu q_\kappa. \quad (7.65)$$

Тензор $g^{(2)}$ может зависеть или не зависеть от ∇ , точно так же и $g^{(3)}$ может зависеть или не зависеть от ∇ (если $g^{(3)}$ зависит от ∇ , то последовательность положений \mathbf{g} и \mathbf{q} следует выбирать соответствующим образом). Рассмотрим сначала K и введем операторы

$$\mathbf{O}^{(l)} = \mathbf{O}^{(l)}(\nabla), \quad (7.66)$$

которые зависят от ∇ и определяются как собственные векторы, удовлетворяющие уравнению

$$K(\nabla) \mathbf{O}^{(l)} = \lambda_l(\nabla) \mathbf{O}^{(l)}. \quad (7.67)$$

После подстановки $i \cdot k$ вместо ∇ (7.67) становится линейным алгебраическим уравнением, и его можно легко решить без использования каких-либо операторных методов. Поскольку K зависит от ∇^2 , введем также собственные функции волнового уравнения

$$\nabla^2 \chi_k(\mathbf{x}) = -k^2 \chi_k(\mathbf{x}). \quad (7.68)$$

Функции χ_k выбираются соответствующим образом позже. Используемая нами форма записи предполагает, что χ_k представляет собой плоские волны, но может оказаться, что в зависимости от задачи удобнее использовать другие представления, например функции Бесселя, или сферические волновые функции. Если K зависит от нечетных степеней ∇ (и от четных степеней), то χ_k как решения (7.68) берутся в виде комплексных плоских волн. Поскольку в общем случае K не является самосопряженным, введем собственные векторы $\bar{\mathbf{O}}$ сопряженного уравнения

$$\bar{\mathbf{O}}^{(l)} K(\nabla) = \lambda_l(\nabla) \bar{\mathbf{O}}^{(l)}, \quad (7.69)$$

где

$$\bar{\mathbf{O}}^{(l)} = (\bar{\mathbf{O}}_1^{(l)}, \dots, \bar{\mathbf{O}}_n^{(l)}) = \bar{\mathbf{O}}^{(l)}(\nabla). \quad (7.70)$$

$\bar{\mathbf{O}}$ можно выбрать так, чтобы выполнялось соотношение

$$\bar{\mathbf{O}}^{(l)} \mathbf{O}^{(l')} = \delta_{ll'}. \quad (7.71)$$

Условия (7.67), (7.69) и (7.71) фиксируют значения $\bar{\mathbf{O}}$ и \mathbf{O} с точностью до масштабных множителей $S_j(\nabla)$: $\mathbf{O}^{(l)} \rightarrow \mathbf{O}^{(l)} S_j(\nabla)$, $\bar{\mathbf{O}}^{(l)} \rightarrow \bar{\mathbf{O}}^{(l)} S_j(\nabla)^{-1}$. Это можно использовать в разложении по модам (7.72) для выбора подходящих единиц измерения $\xi_{k,j}$. Поскольку ξ и O фигурируют совместно, такое масштабное преобразование не влияет на сходимость адиабатической процедуры исключения, используемой ниже.

Представим $\mathbf{q}(\mathbf{x})$ в виде суперпозиции

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}, t) = \sum_{k,j} \mathbf{O}^{(l)} \xi_{k,j} \chi_k(\mathbf{x}). \quad (7.72)$$

Теперь сделаем важный для дальнейшего изложения шаг. Как будет показано на конкретных примерах, таких, как гидродинамические неустойчивости и лазеры, неустойчивые моды заключены в узкой полосе значений волновых векторов. Это дает возможность построения волновых пакетов путем сумми-

рования по \mathbf{k} , заключенным в малых интервалах (подобно тому, как это делается в квантовой механике). Таким образом, мы получаем несущие моды с дискретными значениями волновых векторов \mathbf{k} и медленно меняющимися амплитудами $\xi_{\mathbf{k}, j}(\mathbf{x})$. Наша первая задача состоит в выводе системы уравнений для амплитуд мод ξ . Для этого подставим (7.72) в (7.62), умножим полученное уравнение слева на $\chi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{x}) \bar{\mathbf{O}}^{(j)}$ и проинтегрируем по области, гораздо большей периода осцилляций $\chi_{\mathbf{k}}$, но ξ в которой меняется очень мало. Получающиеся при этом выражения в левой части (7.62) могут быть вычислены следующим образом:

$$\int \chi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{x}) \xi_{\mathbf{k}, j}(\mathbf{x}) \chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) d^3x \approx \xi_{\mathbf{k}, j} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (7.73)$$

и

$$\int \chi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{x}) \lambda_j(\nabla) \xi_{\mathbf{k}, j}(\mathbf{x}) \chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) d^3x \approx \hat{\lambda}_j(\nabla, \mathbf{k}) \xi_{\mathbf{k}, j} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (7.74)$$

где использованы соотношения

$$[\lambda_j(\nabla), \mathbf{O}^{(j)}] = 0 \quad \text{и} \quad [a, b] \equiv ab - ba. \quad (7.75)$$

Поскольку $\xi_{\mathbf{k}, j}(\mathbf{x})$ — медленно меняющаяся функция \mathbf{x} , операция ∇ дает малую величину. Поэтому $\hat{\lambda}_j$ можно разложить в ряд по степеням ∇ и ограничиться рассмотрением первых членов. Тогда для изотропной среды получаем

$$\hat{\lambda}_j(\nabla, \mathbf{k}) = \hat{\lambda}_j(0, \mathbf{k}) + \bar{\gamma}_{j, \mathbf{k}} \nabla + \gamma_{j, \mathbf{k}} \nabla^2. \quad (7.76)$$

В правой части (7.62) мы должны подставить (7.72) в g [см. (7.62) и (7.65)] и, так же как и выше, произвести умножение и интегрирование. Обозначая получающиеся функции от ξ через \hat{g} , приходим к необходимости вычислить интеграл

$$\int \chi_{\mathbf{k}'}^* \bar{\mathbf{O}}^{(j)} \hat{g}(\mathbf{O}^{(i)} \xi_{\mathbf{k}, i} \chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})) d^3x. \quad (7.77)$$

Явное выражение для результата мы приведем ниже [см. (7.87) и (7.88)]. Здесь же отметим лишь основные факты. Как будет видно из дальнейшего, зависимость $\xi_{\mathbf{k}, i}(\mathbf{x})$ от \mathbf{x} важна лишь для неустойчивых мод и только в члене, связанном с $\hat{\lambda}$. Это означает, что в (7.77) мы делаем следующие замены:

$$\bar{\mathbf{O}}^{(j)}(\nabla) = \bar{\mathbf{O}}^{(j)}(\mathbf{k}') \quad (7.78)$$

и

$$\mathbf{O}^{(i)}(\nabla) = \mathbf{O}^{(i)}(\mathbf{k}). \quad (7.79)$$

Поскольку g (или \hat{g}) содержат лишь квадратичные и кубические по q члены, вычисление (7.77) сводится к вычислению

интегралов вида

$$\int \chi_k^* \chi_k \chi_k \chi_k \xi_{k, l}(\mathbf{x}) \xi_{k^*, l^*}(\mathbf{x}) d^3x \approx \xi_{k, l}(\mathbf{x}) \xi_{k^*, l^*}(\mathbf{x}) I_{k'; k k^*}, \quad (7.80)$$

где

$$I_{k', k k^*} = \int \chi_k^* \chi_k \chi_k \chi_k d^3x, \quad (7.81)$$

и

$$\int \chi_k^* \chi_k \chi_k \chi_k \chi_k \xi_{k, l} \xi_{k^*, l^*} \xi_{k''', l'''} d^3x = \xi_{k, l}(\mathbf{x}) \xi_{k^*, l^*}(\mathbf{x}) \xi_{k''', l'''}(\mathbf{x}) J_{k', k k^* k'''}, \quad (7.82)$$

где

$$J_{k', k k^* k'''} = \int \chi_k^* \chi_k \chi_k \chi_k \chi_k d^3x. \quad (7.83)$$

Наконец, флуктуирующие силы F_{μ} после преобразования приводятся к виду

$$\hat{F}_{k, j} = \int d^3x \chi_k^*(\mathbf{x}) \bar{O}^{(j)} \mathbf{F}(\mathbf{x}, t). \quad (7.84)$$

После этих промежуточных преобразований основная система уравнений принимает вид

$$\dot{\xi}_{k, j} - \hat{\lambda}_j(\nabla, \mathbf{k}) \xi_{k, j} = H_{k, j}(\{\xi(\mathbf{x})\}) + \hat{F}_{k, j}, \quad (7.85)$$

где

$$H_{k, j}(\{\xi(\mathbf{x})\}) = \sum_{k', k'', j', j'', j'''} a_{k k' k'' j j' j''} I_{k k' k''} \xi_{k', j'} \xi_{k'', j''} + \sum_{k', k'', k''', j', j'', j'''} b_{k k' k'' k''' j j' j'' j'''} J_{k k' k'' k'''} \xi_{k', j'} \xi_{k'', j''} \xi_{k''', j'''} \quad (7.86)$$

Коэффициенты a и b определяются выражениями

$$a_{k k' k'' j j' j''} = \frac{1}{2} \sum_{uvv'} \bar{O}_u^{(j)}(\mathbf{k}) O_v^{(j')}(\mathbf{k}') O_{v'}^{(j'')}(\mathbf{k}'') \{g_{uvv''}^{(2)}(\mathbf{k}'') + g_{uvv'}(\mathbf{k}')\} \quad (7.87)$$

и

$$b_{k k' k'' k''' j j' j'' j'''} = \sum_{uvv''v'''} g_{uvv''v'''}^{(3)} \bar{O}_u^{(j)}(\mathbf{k}) O_v^{(j')}(\mathbf{k}') O_{v'}^{(j'')}(\mathbf{k}'') O_{v'''}^{(j''')}(\mathbf{k}'''). \quad (7.88)$$

До сих пор мы по существу не делали никаких приближений, но теперь для приведения (7.85) к практически удобному виду мы должны *исключить* нежелательные или ненужные *затухающие моды*. В соответствии с этим положим

$$j = u \quad (\text{неустойчива, если } \text{Re } \hat{\lambda}_u(0, \mathbf{k}) \geq 0) \quad (7.89)$$

и

$$j = s \quad (\text{устойчива, если } \text{Re } \hat{\lambda}_s(0, \mathbf{k}) < 0). \quad (7.90)$$

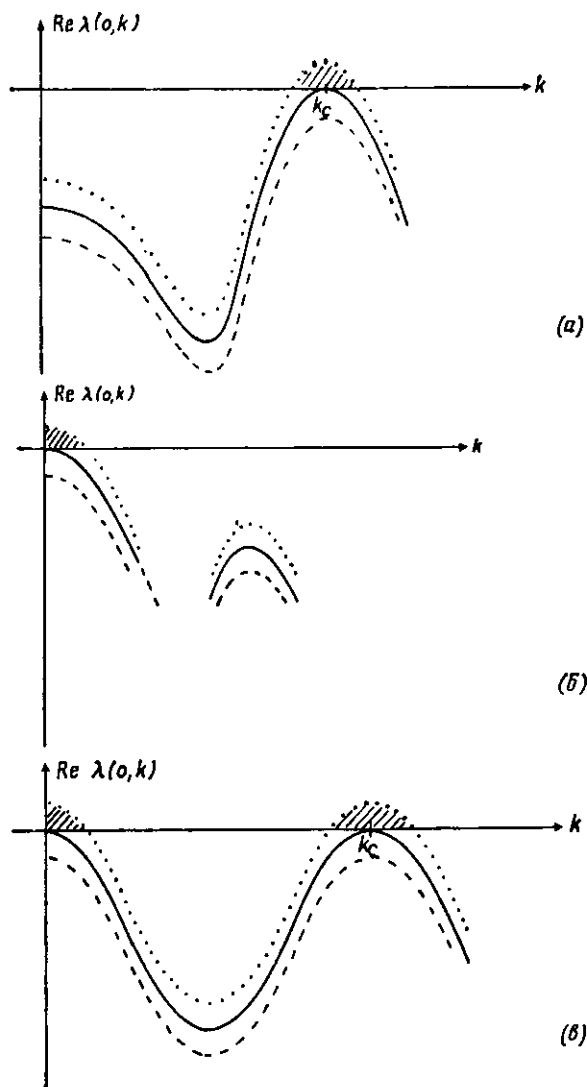
Здесь следует отметить одно важное обстоятельство: хотя ξ имеет два индекса k и u , они не независимы. Действительно, неустойчивость обычно имеет место лишь в малой области значений k в окрестности $k = k_c$ (ср. фиг. 7.4, a — e). Поэтому при вычислении (7.95) и (7.96) (см. ниже) следует обращать внимание на то, при каких значениях k эти выражения берутся. В «волновых пакетах», введенных выше, k пробегает ряд дискретных значений, причем $|k| = k_c$. Штрих у знака суммы по k в последующих формулах указывает на то, что она вычисляется с учетом этого ограничения. На фиг. 7.4, e приведен пример ситуации, когда ветвь j , описываемая координатой $\xi_{k,j}$, становится неустойчивой при двух различных значениях k . Если $k = 0$ и $k = k_c$ соответствуют жесткой и мягкой модам, появляется параметрически модулированная пространственно-временная структура.

Основная идея дальнейших вычислений заключается в следующем. Поскольку незатухающие моды, если пренебречь нелинейными членами, могут нарастать до бесконечности, можно ожидать, что они возбуждены значительно сильнее, чем затухающие моды. С другой стороны, вблизи точки «фазового перехода» времена релаксации незатухающих мод стремятся к бесконечности, т. е. действительные части $\hat{\lambda}$ стремятся к нулю, поэтому затухающие моды адиабатически следуют за незатухающими модами. Хотя амплитуды затухающих мод малы, ими нельзя вовсе пренебречь. Если бы в (7.86)—(7.88) отсутствовали кубические члены, такое пренебрежение привело бы к катастрофе. Квадратичные члены, как легко убедиться, не могут обеспечить глобальной устойчивости. Таким образом, кубические члены необходимы для достижения устойчивого состояния. Даже если в исходных уравнениях кубические члены отсутствуют, они появляются после исключения затухающих мод. Чтобы выделить основные особенности процедуры исключения, обозначим на время

$$\xi_{k,j} \rightarrow (k, j) \quad (7.91)$$

и опустим все коэффициенты в (7.85). Предполагаем, что $|\xi_s| \ll |\xi_u|$ и (самосогласованным образом) $\xi_s \sim \xi_u^2$. Оставляя в (7.85) лишь члены до третьего порядка по ξ_u включительно, получаем

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dt} - \hat{\lambda}_u\right)(k, u) = & \sum_{k'k''u's} (k', u')(k'', s) + \sum_{k'k''u''} (k', u')(k'', u'') + \\ & + \sum_{k'k''k'''u''u'''} (k', u')(k'', u'')(k''', u''') + F_{k,u}. \end{aligned} \quad (7.92)$$



Фиг. 7.4. *a* — пример собственного значения λ , приводящего к неустойчивости в точке k_c . Эта зависимость от λ и k качественно соответствует модели брюсселятора для химических реакций (см. разд. 9.4). Штриховая линия соответствует устойчивому состоянию, сплошная линия — маргинальной ситуации, а пунктирная линия показывает возникновение неустойчивости континуума мод, расположенных вокруг k_c ; *б* — ситуация аналогична показанной на фиг. 7.4, *a*, но теперь неустойчивость имеет место в точке $k=0$. В случае брюсселятора эта неустойчивость связана с жесткой модой; *в* — пример одновременно двух неустойчивостей. Если мода с $k=0$ жесткая, а с $k=k_c$ мягкая, могут происходить пространственные и временные колебания.

Рассмотрим теперь соответствующее уравнение для $j = s$. В нем оставляем лишь члены, необходимые для получения уравнения для неустойчивых мод с точностью до членов третьего порядка

$$\left(\frac{d}{dt} - \hat{\lambda}_s\right)(k, s) = \sum_{k'k''u'u''} (k', u')(k'', u'') + \dots \quad (7.93)$$

Если применить метод итераций, используя неравенство $|\xi_s| \ll |\xi_u|$, можно убедиться в том, что ξ_s пропорционально по крайней мере ξ_u^2 , так что все нужные члены явно входят в (7.93). Используем теперь второе предположение, состоящее в том, что устойчивые моды затухают гораздо быстрее, чем неустойчивые, — условие, хорошо выполняющееся для неустойчивости типа мягкой моды. В случае жесткой моды при удалении осциллирующей части в члене $(k', u') \cdot (k'', u'')$ в (7.93) следует соблюдать осторожность и оставлять производную по времени в этом уравнении. Запишем поэтому решение (7.93) в виде

$$(k, s) = \left(\frac{d}{dt} - \hat{\lambda}_s\right)^{-1} \sum_{k'k''u'u''} (k', u')(k'', u''). \quad (7.94)$$

Производная d/dt учитывается следующим образом: в случае мягкой моды ею можно пренебречь, в случае, когда $(k, u) \sim \exp(i\omega_k t)$, ее следует заменить на $i(\omega_k + \omega_{k'})$. После этого уравнения типа (7.93) легко решаются. Если пренебречь временными и пространственными производными, решение (7.93) представляет собой чисто алгебраическую задачу, так что здесь без труда можно учесть также и члены более высоких порядков, по крайней мере в принципе. Подставляя результат в (7.92), получаем фундаментальную систему уравнений для параметров порядка

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dt} - \hat{\lambda}_u(\nabla, k)\right) \xi_{k, u} &= \sum_{k'k''u'u''} a_{kk'k''; uu'u''} I_{kk'k''} \xi_{k'u} \xi_{k''u''} + \\ &+ \sum_{k'k''k''''u'u''u''''} \xi_{k'u} C_{kk'k''k''''; uu'u''u''''} \xi_{k''u''} \xi_{k''''u''''} + \tilde{F}_{k, u} \equiv \\ &\equiv H_{k, u}^{(r)}(\{\xi_{k'}(\mathbf{x})\}) + \tilde{F}_{k, u}, \end{aligned} \quad (7.95)$$

где использовано обозначение

$$\begin{aligned} C_{kk'k''k''''; uu'u''u''''} &= b_{kk'k''k''''; uu'u''u''''} J_{kk'k''k''''} + \\ &+ 2 \sum_{\hat{k}_s} a_{kk'k''k''''} I_{kk'k''k''''} \left\{ \frac{d}{dt} - \hat{\lambda}_s(0, \hat{k}) \right\}^{-1} a_{\hat{k}k''k''''; su'u''u''''} I_{\hat{k}k''k''''}. \end{aligned} \quad (7.96)$$

$\tilde{F}_{k,u}$ определяется формулой

$$\tilde{F}_{k,u}(\mathbf{x}, t) = \hat{F}_{k,u}(\mathbf{x}, t) + 2 \sum_{\mathbf{k}'u' \hat{k}_s} a_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\hat{k}_s u u' s} I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\hat{k}_s} \hat{\xi}_{\mathbf{k}'u'}(\mathbf{x}) \times \\ \times \left\{ \frac{d}{dt} - \hat{\lambda}_s(0, \hat{\mathbf{k}}) \right\}^{-1} \hat{F}_{\hat{k}_s}(\mathbf{x}, t). \quad (7.97)$$

7.8*. Вклады высших порядков в обобщенные уравнения Гинзбурга — Ландау

В этом разделе мы покажем, как, обобщая процедуру получения низших приближений, изложенную в предыдущем разделе, можно развить систематический подход, дающий возможность вычислить все высшие поправочные члены в обобщенных уравнениях Гинзбурга — Ландау. Прежде всего запишем наши исходные уравнения (7.85) в более компактной форме.

Вводим вектор

$$\mathbf{l} = (\xi_{k_1 l_1}, \xi_{k_2 l_2}, \dots, \dots) \quad (7.98a)$$

и

$$\hat{F}_m = \begin{pmatrix} \hat{F}_{k_1, m_1} \\ \hat{F}_{k_2, m_2} \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (7.98b)$$

ξ — коэффициенты разложения, введенные в (7.72), — могут быть медленно зависящими функциями как пространственных координат, так и времени. \hat{F} — флуктуационные силы, определенные в (7.84). \mathbf{k}_j — волновые векторы; индексы l_1, l_2, \dots или m_1, m_2, \dots различают устойчивые и неустойчивые моды, т. е.

$$l_j = u \text{ или } s. \quad (7.99)$$

Отметим, что \mathbf{k} и l_j не независимые величины, поскольку в некоторых областях значений \mathbf{k} моды могут быть неустойчивыми, в то время как при других значениях \mathbf{k} они остаются устойчивыми. Введем теперь следующее сокращенное обозначение суммы:

$$A_{s, l, l'} : l : l' = \sum_{\mathbf{k}' \hat{k}_s} a_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\hat{k}_s s, l, l'} I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\hat{k}_s} \xi_{\mathbf{k}'l} \xi_{\mathbf{k}l'}. \quad (7.100)$$

Коэффициенты a и I даны в (7.87) и (7.81). Аналогичным образом записываем

$$B_{s l l''} : l : l' : l'' = \sum_{\mathbf{k}' \hat{k}_s} b_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\hat{k}_s s, l, l', l''} I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\hat{k}_s} \xi_{\mathbf{k}'l} \xi_{\mathbf{k}l'} \xi_{\mathbf{k}l''}, \quad (7.101)$$

где \hat{b} и J определены (7.88) и (7.83). Введем также матрицу

$$A_m = \begin{pmatrix} \hat{\lambda}_{m_1}(\nabla, \mathbf{k}_1) & 0 & . & 0 \\ 0 & \hat{\lambda}_{m_2}(\nabla, \mathbf{k}_2) & 0 & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \\ 0 & 0 & & \end{pmatrix}, \quad (7.102)$$

где $\hat{\lambda}$ — собственные значения, фигурирующие в (7.85). Используя обозначения (7.98), (7.100) — (7.102), можно записать (7.85) для устойчивых мод в виде

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dt} - \Lambda_s\right) \mathbf{s} = & A_{suu} : \mathbf{u} : \mathbf{u} + 2A_{sus} : \mathbf{u} : \mathbf{s} + A_{sss} : \mathbf{s} : \mathbf{s} + \\ & + B_{suuu} : \mathbf{u} : \mathbf{u} : \mathbf{u} + 3B_{suus} : \mathbf{u} : \mathbf{u} : \mathbf{s} + 3B_{suss} : \mathbf{u} : \mathbf{s} : \mathbf{s} + \\ & + B_{ssss} : \mathbf{s} : \mathbf{s} : \mathbf{s} + \mathbf{F}_s. \end{aligned} \quad (7.103)$$

Здесь, как и ранее, будем предполагать, что вектор \mathbf{s} полностью определяется этим уравнением. (7.103) — нелинейное уравнение, поэтому для его решения используем метод итераций. Представим \mathbf{s} в виде

$$\mathbf{s} = \sum_{n=2}^{\infty} \mathbf{C}^{(n)}(\mathbf{u}), \quad (7.104)$$

где $\mathbf{C}^{(n)}$ содержат в качестве сомножителей n компонент вектора \mathbf{u} . Подставим (7.104) в (7.103) и сравним члены с одинаковым числом сомножителей \mathbf{u} . Поскольку все устойчивые моды затухающие, а неустойчивые — незатухающие, можно быть уверенным в том, что существует оператор, обратный оператору $(d/dt - \Lambda_s)$. Используя этот оператор, находим соотношения

$$\mathbf{C}^{(2)}(\mathbf{u}) = \left(\frac{d}{dt} - \Lambda_s\right)^{-1} \{A_{suu} : \mathbf{u} : \mathbf{u} + \hat{\mathbf{F}}_s\} \quad (7.105)$$

и, для $n \geq 3$,

$$\mathbf{C}^{(n)}(\mathbf{u}) = \left(\frac{d}{dt} - \Lambda_s\right)^{-1} \{\dots\}, \quad (7.106)$$

где фигурные скобки обозначают следующее:

$$\begin{aligned} \{\dots\} = & 2A_{sus} : \mathbf{u} : \mathbf{C}^{(n-1)} + (1 - \delta_{n,3}) \sum_{m=2}^{n-2} A_{sss} : \mathbf{C}^{(m)} \mathbf{C}^{(n-m)} + \\ & + \delta_{n,3} B_{suuu} : \mathbf{u} : \mathbf{u} : \mathbf{u} + 3(1 - \delta_{n,3}) B_{suus} : \mathbf{u} : \mathbf{u} : \mathbf{C}^{(n-2)} + \\ & + 3(1 - \delta_{n,3})(1 - \delta_{n,4}) B_{suss} : \mathbf{u} : \mathbf{C}^{(m)} : \mathbf{C}^{(n-1-m)} + \\ & + (1 - \delta_{n,3})(1 - \delta_{n,4})(1 - \delta_{n,5}) \sum_{\substack{m_1, m_2, m \geq 2 \\ m_1 + m_2 + m = n}} B_{ssss} : \mathbf{C}^{(m_1)} : \mathbf{C}^{(m_2)} : \mathbf{C}^{(m)}. \end{aligned} \quad (7.107)$$

Такая процедура позволяет последовательно и однозначно вычислить все $C^{(n)}$.

Поскольку моды затухающие, решениями однородных уравнений можно пренебречь при условии, что мы рассматриваем стационарные или медленно меняющиеся состояния, которые не зависят от начальных значений затухающих мод. Отметим, что флуктуирующие силы \hat{F} трактуются как величины того же порядка малости, что и u : u . Это всего лишь формальный прием. На практике же процедуру можно изменить так, чтобы в окончательных уравнениях u и \hat{F} имели правильный порядок величины. Отметим также, что $\hat{\lambda}$ и, следовательно, Λ могут быть дифференциальными операторами по отношению к x , но не должны зависеть от t . Перейдем теперь к рассмотрению уравнений движения для неустойчивых мод. В принятых обозначениях они имеют вид

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dt} - \Lambda_u\right) u = & A_{uuu} : u : u + 2A_{uus} : u : s + A_{uss} : s : s + \\ & + B_{uuuu} : u : u : u + 3B_{uuus} : u : u : s + 3B_{uus} : u : s : s + \\ & + B_{uss} : s : s : s + \hat{F}_u. \end{aligned} \quad (7.108)$$

Как было отмечено выше, первый шаг нашей процедуры — вычисление координат устойчивых мод как функционалов или функций координат неустойчивых мод. Подставим теперь разложение (7.104), где все C последовательно определяются формулами (7.105) и (7.106) в (7.108).

Используя определение

$$C^{(0)} = C^{(l)} = 0 \quad (7.109)$$

и собирая члены, содержащие одинаковое число компонент u , запишем уравнение в окончательном виде

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dt} - \Lambda_u\right) u = & A_{uuu} : u : u + 2A_{uus} : u : \sum_{\nu=0}^{n-1} C^{(\nu)} + \\ & + \sum_{\substack{\nu_1, \nu_2=0 \\ \nu_1+\nu_2 \leq n}} A_{uss} : C^{(\nu_1)} : C^{(\nu_2)} + B_{uuuu} : u : u : u + \\ & + 3B_{uuus} : u : \sum_{\nu=0}^{n-2} C^{(\nu)} + 3B_{uus} : u : \sum_{\substack{\nu_1, \nu_2=0 \\ \nu_1+\nu_2 \leq n-1}} C^{(\nu_1)} : C^{(\nu_2)} + \\ & + \sum_{\substack{\nu_1, \nu_2, \nu_3=0 \\ \nu_1+\nu_2+\nu_3 \leq n}} B_{uss} : C^{(\nu_1)} : C^{(\nu_2)} : C^{(\nu_3)} + u\hat{F}. \end{aligned} \quad (7.110)$$

В общем случае решить (7.110) исключительно трудно. Однако в некоторых случаях, представляющих практический интерес, решения могут быть найдены (см. гл. 8).

7.9*. Скейлинговая теория непрерывно распределенных неравновесных систем

В этом разделе развита в общем виде скейлинговая теория, применимая к большому классу явлений, подобных фазовым переходам, имеющим место в неравновесных системах. Рассматривается N -компонентная система с учетом флуктуаций. В общем развитый подход применим лишь к одномерному случаю, хотя могут встретиться такие случаи двух и трех измерений, когда он также оказывается применимым. Основная идея метода заключается в следующем.

Будем исходить из таких значений внешних параметров, которые допускают только устойчивые решения. В этом случае уравнения можно линеаризовать относительно стационарных решений. В результате получаются уравнения, решениями которых являются лишь релаксирующие моды. При изменении внешнего параметра мы в конце концов достигаем предельно возможной ситуации, в которой одна или несколько мод становятся неустойчивыми. Теперь мы разлагаем нелинейные уравнения вокруг соответствующей краевой точки по степеням ϵ , где ϵ^2 равно отклонению истинного значения параметра от его значения в маргинальной (краевой) точке. Применяя к линеаризованным уравнениям теорию возмущений, легко установить, что комплексная частота зависит от ϵ^2 . Это наводит на мысль ввести ϵ^2 в качестве масштабного множителя на шкале времени. С другой стороны, если линеаризованные уравнения содержат пространственные производные, можно довольно просто показать, что соответствующие изменения таковы, что пространственная координата g фигурирует вместе с ϵ . Ниже мы будем использовать эти два масштабных множителя и представлять решения нелинейных уравнений в виде суперпозиции решений уравнений, линеаризованных возле маргинальной точки. Рассматривая члены вплоть до третьего порядка по ϵ , находим самосогласованное уравнение для амплитуды маргинального решения. Получающееся уравнение сильно напоминает нестационарные уравнения Гинзбурга — Ландау с флуктуирующими силами (ср. разд. 7.6—7.8). Поскольку по существу мы рассматриваем ту же самую систему, что и в разд. 7.6, воспользуемся (7.62) в качестве исходного уравнения. Запишем его в виде

$$\Gamma \dot{q} = g(q) + F(x, t), \quad (7.111)$$

используя обозначение

$$\Gamma_{ik} = \left(\frac{\partial}{\partial t} - D_i \nabla_x^2 \right) \delta_{ik} - K_{ik}. \quad (7.112)$$

В рамках теории возмущений (7.111) можно легко решить, используя матрицу, обратную Γ . Следует, однако, соблюдать осторожность, поскольку детерминант в некоторых случаях может обращаться в нуль. Поэтому запишем (7.111) в виде

$$\det |\Gamma|_q = \tilde{\Gamma} [g(q) + F(x, t)], \quad (7.113)$$

где $\tilde{\Gamma}_{ik}$ — миноры порядка $(N-1)$, принадлежащие элементу Γ_{ki} матрицы (7.112).

а) Однородная задача

Линейная однородная задача (7.111) определяет набор правосторонних собственных векторов (мод)

$$\hat{K} u_n = \lambda_n u_n, \quad (7.114)$$

где \hat{K} определено в (7.64). Поскольку Γ в общем случае не является самосопряженной матрицей, следует определить соответствующие левосторонние векторы посредством уравнения

$$v_n \hat{K} = \lambda_n v_n. \quad (7.115)$$

Отметим, что u_n и v_n — функции, зависящие от времени и пространственных координат. Их можно выразить через решения в виде плоских волн. Индекс n обозначает сразу две величины k -вектор и соответствующее собственное значение Γ : $n = (k, m)$. Векторы (7.114) и (7.115) образуют биоортогональную систему, обладающую тем свойством, что

$$(v_n | u_{n'}) = \delta_{nn'}, \quad (7.116)$$

где $(|)$ обозначает скалярное произведение.

б) Скейлинг

Допустим, что один или несколько внешних параметров изменяются так, что система проходит маргинальную точку. Предполагается, что величина этого изменения пропорциональна ϵ^2 , используемому в дальнейшем в качестве параметра малости. В общем случае изменение внешнего параметра приводит к изменению коэффициентов матрицы диффузии и матрицы K :

$$\left. \begin{aligned} D_i &= D_i^{(0)} + D_i^{(2)} \epsilon^2 \\ K_{ij} &= K_{ij}^{(0)} + K_{ij}^{(2)} \epsilon^2 \end{aligned} \right| \quad (7.117)$$

Соответственно этому мы разлагаем решение q в ряд по степеням ε :

$$q = \varepsilon q^{(1)} + \varepsilon^2 q^{(2)} + \dots = \sum_{m=1}^{\infty} \varepsilon^m q^{(m)}. \quad (7.118)$$

Чтобы учесть эффекты конечности ширины полосы, пространственная и временная координаты одновременно подвергаются масштабному преобразованию:

$$\begin{aligned} \varepsilon x &= R, \\ \varepsilon^2 t &= T. \end{aligned} \quad (7.119)$$

в) Теория возмущений

Подставляя в (7.113) разложения (7.117), (7.118) и масштабные соотношения (7.119), получаем

$$\begin{aligned} \left(\sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon^l \det |\Gamma^{(l)}| \right) \cdot \left(\sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon^n q^{(n)} \right) = \\ = \left(\sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon^l \tilde{\Gamma}^{(l)} \right) \left(\sum_{m=1}^{\infty} \varepsilon^m g^{(m)} + \sum_{m=1}^{\infty} \varepsilon^m F^{(m)}(x, t) \right). \end{aligned} \quad (7.120)$$

Если ограничиться порядком малости ε^1 , мы возвратимся к однородной задаче (7.114). В общем случае учета членов порядка ε^l (7.120) сводится к виду

$$\sum_{r=0}^{l-1} \det |\Gamma^{(r)}| q^{(l-r)} = \sum_{r=0}^{l-1} \tilde{\Gamma}^{(r)} (g^{(l-r)}(q) + F^{(l-r)}(x, t)). \quad (7.121)$$

Выделим в левой части член с $q^{(l)}$ и перенесем остальные члены в правую часть.

Это дает

$$\begin{aligned} \det |\Gamma^{(0)}| q^{(l)} = - \sum_{r=1}^{l-1} \det |\Gamma^{(r)}| q^{(l-r)} + \\ + \sum_{r=0}^{l-1} \tilde{\Gamma}^{(r)} [g^{(l-r)}(q) + F^{(l-r)}(x, t)]. \end{aligned} \quad (7.122)$$

Рассмотрим две различные ситуации, которые могут возникнуть в критической точке. Они различаются поведением комплексных частот λ .

1) Случай одной мягкой моды, т. е. $\lambda_1 = 0$ для одной и только одной моды.

2) Случай жесткой моды, когда пара комплексно-сопряженных мод становится неустойчивой, так что $\operatorname{Re} \lambda_1 = 0$, но $\operatorname{Im} \lambda_1 \neq 0$. Чтобы использовать теорию возмущений в одной

форме для обоих случаев, введем понятие модифицированных функций Грина. Для этого запишем уравнение однородной задачи (7.114)

$$\hat{K} \mathbf{u}_n = (K^{(0)} + D^{(0)} \nabla_x^2) \mathbf{u}_n = \lambda_n \mathbf{u}_n. \quad (7.123)$$

Определим теперь Ω как

$$\Omega = K^{(0)} + D^{(0)} \nabla_x^2 - \lambda I, \quad (7.124)$$

где I — единичная матрица. Функция Грина, соответствующая (7.124), имеет вид

$$G^{\text{мод}} = \sum_{n \neq 1} \frac{1}{\lambda_n - \lambda} | \mathbf{u}_n \rangle \langle \mathbf{v}_n |. \quad (7.125)$$

В связи с модифицированной функцией Грина имеем условие ортогональности

$$\left(\langle \mathbf{v}_1 | - \sum_{r=1}^{l-1} \det | \Gamma^{(r)} \mathbf{q}^{(l-r)} + \sum_{r=0}^{l-1} \tilde{\Gamma}^{(r)} [\mathbf{g}^{(l-r)}(\mathbf{q}) + \mathbf{F}^{(l-r)}(\mathbf{x}, t)] \right) = 0. \quad (7.126)$$

Понятие модифицированных функций Грина неизбежно возникает при рассмотрении случая мягкой моды $\lambda_1 = 0$, где индекс 1 означает, что $k = k_c$, $m = s$. С помощью функции Грина решение можно записать в виде

$$\mathbf{q}^{(l)}(\lambda) = \sum_{n \neq 1} \frac{1}{\lambda_n - \lambda} | \mathbf{u}_n \rangle \langle \mathbf{v}_n | - \sum_{r=1}^{l-1} \Gamma^{(r)} \mathbf{q}^{(l-r)} + \mathbf{g}^{(l)}(\mathbf{q}) + \mathbf{F}^{(l)}(\mathbf{x}, t). \quad (7.127)$$

Очевидно, что эту же процедуру можно применять и к левосторонним собственным векторам. Если критическая мода вырождена, можно непосредственно определить соответствующую модифицированную функцию Грина. Если h — степень вырождения, то теперь вместо (7.126) получаем систему h условий ортогональности. Каждое из этих условий должно выполняться независимо от остальных.

7.10*. Неустойчивость типа мягкой моды

Допустим, что зависимость \mathbf{u}_n от времени и пространственных координат можно представить плоскими волнами

$$\mathbf{u}_n \sim \exp(i\omega_m t - ikx). \quad (7.128)$$

Как уже говорилось, критическая точка определяется условием

$$\lambda_1 = i\omega_1 = 0. \quad (7.129)$$

Из (7.129) получаем

$$\det | \Gamma^{(0)}(\lambda_1 = 0) | = 0. \quad (7.130)$$

Уравнение (7.130) есть условие для коэффициентов D_i , K_{ik} как функций k^2 в маргинальной точке. Значение k_c определяется из условия

$$\frac{d\lambda_1}{d(k^2)} = 0, \quad (7.131)$$

из которого следует

$$\frac{d}{d(k^2)} \det | \Gamma^{(0)}(\lambda_1 = 0) | = 0. \quad (7.132)$$

Из (7.132) имеем

$$\sum_i D_i^{(0)} \tilde{\Gamma}_{ii}^{(0)}(\lambda_1 = 0; k^2) \equiv \text{Sp} (D \tilde{\Gamma}(\lambda_1 = 0, k^2)) = 0, \quad (7.133)$$

где символ Sp обозначает «след». Величины $\tilde{\Gamma}_{ii}$ являются сопряженными минорами порядка $N - 1$ к элементам Γ_{ii} матрицы Γ . Теперь можно построить правосторонние и левосторонние собственные векторы критической моды. Представим правосторонний собственный вектор в виде

$$\mathbf{u}_1 = e^{-ik_c x} \begin{pmatrix} a_1(k_c, 1) \\ a_2(k_c, 1) \\ \vdots \\ a_N(k_c, 1) \end{pmatrix}, \quad (7.134)$$

где $a_i(k_c, 1)$ — компоненты правостороннего вектора, соответствующего собственному значению $\lambda_1 = 0$ в векторном пространстве (q_1, q_2, \dots, q_N) . Здесь мы предполагаем, что собственному значению λ_1 соответствует единственный собственный вектор. (Другими словами, рассматривается невырожденный случай.) Левосторонний вектор задается выражением

$$\mathbf{v}_1 = e^{ik_c x} (\bar{a}_1(k_c, 1), \bar{a}_2(k_c, 1), \dots, \bar{a}_N(k_c, 1)). \quad (7.135)$$

Скалярное произведение левостороннего и правостороннего векторов определяется как

$$\frac{1}{L} \int_{-L/2}^{+L/2} dx e^{i(k-k')x} \sum_{n=1}^N \bar{a}_n(k, i) a_n(k', j) = \delta_{kk'} \delta_{ji}. \quad (7.136)$$

Поскольку в маргинальной точке критическая мода доминирует над всеми остальными модами, решение (7.122) с точностью до

членов порядка ε^1 дается формулой

$$\mathbf{q}^{(1)} = \xi(R, T) e^{-ik_c x} \begin{pmatrix} a_1(k_c, 1) \\ a_2(k_c, 1) \\ \vdots \\ a_N(k_c, 1) \end{pmatrix}. \quad (7.137)$$

Общий множитель $\xi(R, T)$ записан как амплитуда, медленно меняющаяся во времени и пространстве. Для членов порядка ε^2 находим следующее уравнение:

$$\det |\Gamma|^{(0)} \mathbf{q}^{(2)} + \det |\Gamma|^{(1)} \mathbf{q}^{(1)} = \tilde{\Gamma}^{(0)} \mathbf{g}^{(2)}(\mathbf{q}). \quad (7.138)$$

Поскольку $\det |\Gamma|^{(1)}$ содержит дифференциальные операторы, можно показать, что при учете (7.133)

$$\det |\Gamma|^{(1)} \mathbf{q}^{(1)} = 2(\nabla_x \nabla_R) \text{Sp}(D^{(0)} \tilde{\Gamma}^{(0)}(\lambda=0; k_c)) \mathbf{q}^{(1)} = 0. \quad (7.139)$$

Для более подробной записи (7.131) представим $\mathbf{g}^{(2)}(\mathbf{q})$ в виде

$$g_i^{(2)} = g_{ikl}^{(2)} q_k^{(1)} q_l^{(1)} + g_{ikl}^{(2)*} q_k^{(1)*} q_l^{(1)} + \text{Компл. сопр.} \quad (7.140)$$

(суммирование производится по неммым индексам). $q_k^{(1)}$ можно аппроксимировать решением $\mathbf{q}^{(1)}$ из (1.137). Условие разрешимости (7.126) автоматически выполняется. Следовательно, решение $\mathbf{q}^{(2)}$ имеет вид

$$\begin{aligned} q_j^{(2)} = & \xi^2 \cdot \sum_m \frac{1}{\lambda_m(2k_c)} a_j(2k_c, m) \bar{a}_i(2k_c, m) g_{ikl}^{(2)} a_k(k_c, 1) a_l(k_c, 1) \times \\ & \times e^{-2ik_c x} + |\xi|^2 \sum_m \frac{1}{\lambda_m(0)} a_j(0, m) \bar{a}_i(0, m) g_{ikl}^{(2)*} a_k(k_c, 1) a_l(k_c, 1). \end{aligned} \quad (7.141)$$

Рассмотрим наконец уравнение равновесия третьего порядка. Соответствующее условие разрешимости

$$\begin{aligned} (\mathbf{v}_l, k_c | \det |\Gamma|^{(2)} \mathbf{q}^{(1)} + \det |\Gamma|^{(1)} \mathbf{q}^{(2)} + \det |\Gamma^{(0)} | \mathbf{q}^{(3)} = \\ = (\mathbf{v}_l, k_c | \tilde{\Gamma}^{(0)} [\mathbf{g}^{(3)}(\mathbf{q}) + \mathbf{F}(x, t)] + \tilde{\Gamma}^{(1)} \mathbf{g}^{(2)}(\mathbf{q}) + \tilde{\Gamma}^{(0)} \mathbf{g}'^{(2)} \nabla_R) \end{aligned} \quad (7.142)^1$$

при учете того, что

$$(\mathbf{v}_l, k_c | \det |\Gamma|^{(0)} \mathbf{q}^{(3)}) = 0 \quad (7.143)$$

и

$$(\mathbf{v}_l, k_c | \det |\Gamma|^{(1)} \mathbf{q}^{(2)}) = (\mathbf{v}_l, k_c | \tilde{\Gamma}^{(1)} \mathbf{g}^{(2)}(\mathbf{q})) = (\mathbf{v}_l, k_c | \tilde{\Gamma}^{(0)} \mathbf{g}'^{(2)} \nabla_R) = 0, \quad (7.144)$$

¹⁾ Мы разбили исходный оператор $g^{(2)}$ на часть, не зависящую от ∇ — $g^{(2)}$, и часть $g'^{(2)}$, содержащую ∇ с соответствующим масштабным множителем.

сводится к виду

$$(\mathbf{v}_l, k_c | \det |\Gamma|^{(2)} \mathbf{q}^{(1)}) = (\mathbf{v}_l, k_c | \tilde{\Gamma}^{(0)} [\mathbf{g}^{(3)}(\mathbf{q}) + \mathbf{F}(x, t)]). \quad (7.145)$$

Для вычисления (7.145) рассмотрим каждый член по отдельности. Для $\det |\Gamma|^{(2)}$ находим

$$\det |\Gamma|^{(2)} = \sum_{i, j} \left[\left(\frac{\partial}{\partial T} - D_i^{(0)} \nabla_R^2 \right) \delta_{ij} - K_{ij}^{(2)} + D_i^{(2)} k_c^2 \delta_{ij} \right] \tilde{\Gamma}_{ij}^{(0)} - \\ - 2 \sum_{i, j} D_i^{(0)} D_j^{(0)} \gamma_{ii, jj} \nabla_R^2 k_c^2, \quad (7.146)$$

где $\gamma_{ii, jj}$ — миноры порядка $(N-2)$ матрицы Γ . Благодаря (7.146) левая часть (7.145) имеет структуру

$$A \cdot \frac{\partial}{\partial T} \xi(R, T) - B \nabla_R^2 \xi(R, T) + C \cdot \xi(R, T) \quad (7.147)$$

с коэффициентами

$$A = \sum_i \tilde{\Gamma}_{ii}^{(0)}(\lambda_1, k_c), \quad (7.148a)$$

$$B = \sum_i D_i^{(0)} \tilde{\Gamma}_{ii}^{(0)}(\lambda_1, k_c) + 2 \sum_{ij} D_i^{(0)} D_j^{(0)} \gamma_{ii, jj} k_c^2, \quad (7.148b)$$

$$C = \sum_{ij} (-K_{ij}^{(2)} + D_i^{(2)} k_c^2 \delta_{ij}) \tilde{\Gamma}_{ij}^{(0)}(\lambda_1, k_c). \quad (7.148b)$$

Вычислим теперь правую часть (7.145). Подставляя $\mathbf{v}_l \mathbf{g}^{(2)}$ и $\mathbf{q}^{(2)}$ в явном виде, получаем

$$\bar{a}_m(k_c, 1) \left\{ \tilde{\Gamma}_{mi}(\lambda_1, k_c) [g_{ikl}^{(3)} + g_{ikjl}^{(3)} + \right. \\ \left. + g_{ilkj}^{(3)}] a_j^*(k_c, 1) a_k(k_c, 1) a_l(k_c, 1) + \tilde{\Gamma}_{mi}(\lambda_1, k_c) (g_{ijk}^{(2)} + \right. \\ \left. + g_{ikj}^{(2)}) \left[a_k(k_c, 1) \sum_l \frac{1}{\lambda_l(0)} a_l(0, l) \bar{a}_p(0, l) g_{pqr} a_q^*(k_c, 1) a_r(k_c, 1) + \right. \right. \\ \left. \left. + a_k^*(k_c, 1) \sum_l \frac{1}{\lambda_l(2k_c)} a_l(2k_c, l) \bar{a}_p(2k_c, l) g_{pqr}^{(2)} a_q(k_c, 1) a_r(k_c, 1) \right] \right\} \times \\ \times |\xi(R, T)|^2 \xi(R, T). \quad (7.149)$$

Это выражение можно записать в виде

$$M |\xi(R, T)|^2 \xi(R, T). \quad (7.150)$$

Наконец рассмотрим флуктуирующие силы. Предполагаем, что они медленно зависят от времени и дают вклад порядка ϵ^3 . Для флуктуирующей силы имеем

$$(\mathbf{v}_l, k_c | \tilde{\Gamma}^{(0)} \mathbf{F}(x, t)) = F(R, T). \quad (7.151)$$

$F(R, T)$ можно записать в виде

$$F(R, T) = \sum_k c_{1k} \tilde{F}_k(R, T), \quad (7.152)$$

где

$$\tilde{F}(R, T) = e^{ik_c x} \mathbf{F}(R, t) \quad (7.153)$$

и

$$c_{1k} = \bar{a}_j(k_c, 1) \tilde{\Gamma}_{jk}^{(0)}(\lambda_1, k_c). \quad (7.154)$$

Здесь флуктуирующие силы снова предполагаются гауссовыми. Объединяя выражения (7.147), (7.150) и (7.151), можно записать уравнение для медленно меняющейся амплитуды $\xi(R, T)$ в окончательном виде

$$A \cdot \frac{\partial \xi(R, T)}{\partial T} - B \cdot \nabla_R^2 \xi(R, T) = \\ = (-C + M|\xi(R, T)|^2) \xi(R, T) + F(R, T); \quad (7.155)$$

коэффициенты A, B, C определены в (7.148). Уравнение (7.155) аналогично нестационарному уравнению Гинзбурга — Ландау, используемому в теории сверхпроводимости, а также уравнению лазера с непрерывным распределением мод. Стохастическое эквивалентное уравнение Фоккера — Планка дает в качестве решения потенциал, формально аналогичный свободной энергии Гинзбурга — Ландау (см. разд. 6.8).

7.11*. Неустойчивость типа жесткой моды

В этом разделе мы предполагаем, что неустойчивость возникает при $k_c = 0$, собственное значение комплексное и дает два комплексно-сопряженных решения. По сути дела процедура вывода аналогична изложенной в разд. 7.10, поэтому мы остановимся в основном на различиях между этими двумя случаями. Для однородной задачи можно снова определить биортогональную систему собственных векторов. Однако теперь мы должны определить скалярное произведение по отношению к времени

$$(\mathbf{v}_{n, p} | \mathbf{u}_{n', p'}) = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} e^{-i\omega(p-p')t} \sum_{j=1}^N \bar{a}_j(p, n) a_j(p', n') dt = \delta_{nn'} \delta_{pp'}, \quad (7.156)$$

где

$$T = \frac{2\pi}{\omega_0}, \quad p \text{ и } p' - \text{целые числа.} \quad (7.157)$$

Допустим, что $\text{Im } \lambda_1 \neq 0$ практически остается постоянной, в то время как действительная часть λ_1 изменяется вместе с параметром ϵ^2 , который снова используется как малый параметр разложения. Собирая величины порядка ϵ^1 , мы получали одно-

родное уравнение; в порядке ε^2 имеем

$$\det |\Gamma^{(0)} \mathbf{q}^{(2)} + \det |\Gamma^{(1)} \mathbf{q}^{(1)} = \tilde{\Gamma}^{(0)} \mathbf{g}^{(2)}. \quad (7.158)$$

Поскольку

$$\det |\Gamma^{(1)} \mathbf{q}^{(1)} = 0, \quad (7.159)$$

структура уравнения (7.158) такая же, что у уравнения (7.138) предыдущего раздела. Таким образом, условие разрешимости выполняется. Беря функцию Грина в виде

$$G = \sum_p \sum_n' \frac{1}{\lambda_n - ip\omega_0} e^{ip\omega_0(t-t')} | \mathbf{u}_{n,p} \rangle \langle \mathbf{v}_{n,p} |, \quad (7.160)$$

запишем решение соответствующего уравнения

$$q_j^{(2)} = \xi^2 \sum_n \frac{1}{\lambda_n - 2i\omega_0} a_j(2, n) \bar{a}_j(2, n) g_{ikl}^{(2)} a_k(1, 1) a_l(1, 1) e^{2i\omega_0 t} + \\ + |\xi|^2 \sum_n \frac{1}{\lambda_n} a_j(0, n) \bar{a}_j(0, n) g_{ikl}^{(2)} a_k^*(1, 1) a_l(1, 1). \quad (7.161)$$

Подставляя (7.161) в уравнение, содержащее члены порядка ε^3 , получаем в правой его части выражение

$$M |\xi|^2 \xi (R, T) + F(R, T), \quad (7.162)$$

где $F(R, T)$ — проекция флуктуаций на неустойчивые моды. Члены в левой части получаются из $\det |\Gamma^{(2)}|$. Они имеют вид

$$\sum_{i,j} \left[\left(\frac{\partial}{\partial T} - D_i \nabla_k^2 \right) \delta_{ij} - K_{ij}^{(2)} \right] \tilde{\Gamma}_{ij}^{(0)}(\omega_0), \quad (7.163)$$

где $\tilde{\Gamma}_{ij}$ — минор, принадлежащий элементу Γ_{ji} . В результате получаются выражения точно такой же структуры, как (7.147). Единственное отличие состоит в том, что коэффициенты комплексные; они равны

$$A = \text{Sp } \tilde{\Gamma}^{(0)}(\omega_0), \quad (7.164a)$$

$$B = \text{Sp } (D^{(0)} \tilde{\Gamma}^{(0)}(\omega_0)), \quad (7.164b)$$

$$C = - \sum_{ij} K_{ij}^{(2)} \tilde{\Gamma}_{ij}^{(0)}(\omega_0). \quad (7.164b)$$

M имеет ту же структуру, что и в случае мягкой моды:

$$M = \bar{a}_m(1, 1) \left\{ \tilde{\Gamma}_{mi}^{(0)}(\omega_0) [g_{ijki}^{(3)} + g_{ikjl}^{(3)} + g_{ilkj}^{(3)}] + \tilde{\Gamma}_{mi}^{(0)}(\omega_0) [g_{ijk}^{(2)} + \right. \\ \left. + g_{ikj}^{(2)}] \left[a_k(1, 1) \sum_n \frac{1}{\lambda_n} a_j(1, n) \bar{a}_i(1, n) g_{lpq}^{(2)} a_p^*(1, 1) a_q(1, 1) + \right. \right. \\ \left. \left. + a_k^*(1, 1) \sum_n \frac{1}{\lambda_n - 2i\omega_0} a_j(2, n) \bar{a}_i(2, n) g_{lpq}^{(2)} a_p(1, 1) a_q(1, 1) \right] \right\}. \quad (7.165)$$

Физические системы

8.1. Кооперативные эффекты в лазере: самоорганизация и фазовый переход

В настоящее время лазер — одна из наиболее хорошо изученных систем многих тел. Лазер — система, далекая от теплового равновесия; на его примере можно подробно изучить кооперативные эффекты. Рассмотрим твердотельный лазер, состоящий из активных атомов, введенных в твердотельную матрицу (см. фиг. 1.9). Как обычно, предполагаем, что торцевые поверхности лазерного стержня действуют как зеркала, выполняя две функции: они производят отбор аксиальных мод и обеспечивают дискретность частот аксиальных мод резонатора. В рассматриваемой модели атомы имеют два энергетических уровня. В состоянии теплового равновесия уровни заполнены в соответствии с функцией распределения Больцмана. Возбуждая атомы, мы создаем инверсию заселенности, которую удобно описывать, вводя понятие отрицательной температуры. Возбужденные атомы начинают излучать свет, в конце концов поглощаемый окружающими телами, температура которых много меньше $\hbar\omega/k_B$ (где ω — частота излучающего атомного перехода и k_B — постоянная Больцмана), так что эту температуру можно считать приблизительно равной нулю. С термодинамической точки зрения лазер представляет собой систему, состоящую из атомов и поля, взаимодействующую с резервуарами, находящимися при различных температурах. Таким образом, лазер — система, далекая от теплового равновесия.

Для понимания работы лазера существенно следующее. Если активные атомы накачиваются (возбуждаются) внешними источниками слабо, лазер действует как обычная лампа. Атомы независимо друг от друга испускают волновые пуги со случайными фазами. Время когерентности составляет микроскопически малую величину порядка 10^{-11} с. Атомы, рассматриваемые как осциллирующие диполи, колеблются совершенно случайным образом. Если накачка все более увеличивается, то внезапно, при очень малом изменении накачки, внутри резко очерченной переходной области, ширина линии излучения лазера становится порядка одного цикла за секунду, так что фаза световой волны

остаётся постоянной на макроскопических временных интервалах порядка 1 с. Очевидно, что лазер переходит в новое, высокоорганизованное на макроскопическом уровне состояние. Атомные диполи теперь осциллируют в фазе, хотя и возбуждаются накачкой совершенно случайным образом. Таким образом, в атомной системе проявляется самоорганизация. Чрезвычайно высокая когерентность лазерного излучения обусловлена кооперативным поведением атомных диполей. При изучении переходной области лазера обнаруживаются, как мы увидим, черты, характерные для фазовых переходов второго рода.

8.2. Уравнения лазера в модовом представлении

В лазере световое поле генерируется возбужденными атомами. Поле описывается заданием напряженности электрического поля E , зависящей от пространственных координат и времени. Пусть направление вектора поляризации поля фиксировано. Разложим $E = E(\mathbf{x}, t)$ по модам резонатора, считая их для простоты бегущими волнами:

$$E(\mathbf{x}, t) = i \sum_{\lambda} \{ (2\pi\hbar\omega_{\lambda}/V)^{1/2} \exp(i\mathbf{k}_{\lambda}\mathbf{x}) b_{\lambda} - \text{Компл. сопр.} \}. \quad (8.1)$$

Здесь λ — индекс моды, ω_{λ} — частота мод, V — объем резонатора, \mathbf{k}_{λ} — волновой вектор, b_{λ} и b_{λ}^* — зависящие от времени комплексные амплитуды. Благодаря множителю $(2\pi\hbar\omega_{\lambda}/V)^{1/2}$ амплитуды b_{λ} , b_{λ}^* безразмерные (вид этого множителя определяется в квантовой механике). Атомы различаются индексом μ . Поведение атомов, конечно, следует описывать в рамках квантовой теории. Описание значительно упрощается, если ограничиться рассмотрением двух лазерно-активных атомных энергетических уровней. Как показывается в теории лазеров, физические свойства атома μ можно описать комплексным дипольным моментом α_{μ} и инверсией σ_{μ} . Для α_{μ} мы используем безразмерные единицы. σ_{μ} равно разности чисел заполнения N_2 и N_1 верхнего и нижнего энергетических уровней атома:

$$\sigma_{\mu} = (N_2 - N_1)_{\mu}.$$

Как следует из теории лазеров и принципа «квантово-классического соответствия», амплитуды b_{λ} , дипольные моменты α_{μ} и инверсию σ_{μ} можно рассматривать как классические величины, подчиняющиеся следующей системе уравнений.

а) Полевые уравнения

$$\dot{b}_{\lambda} = (-i\omega_{\lambda} - \kappa_{\lambda}) b_{\lambda} - i \sum_{\mu} g_{\mu\lambda} \alpha_{\mu} + F_{\lambda}(t), \quad (8.2)$$

где κ_λ — постоянная затухания моды λ (κ_λ — время затухания моды в резонаторе в отсутствие лазерной генерации). κ_λ учитывает потери за счет вывода излучения через полупрозрачные зеркала, рассеяния на центрах и т. д. $g_{\mu\lambda}$ — постоянная взаимодействия между модой λ и атомом μ . Она пропорциональна матричному элементу дипольного момента. F_λ — стохастическая сила, с необходимостью возникающая из-за наличия флуктуаций в диссипативной системе. Уравнение (8.2) описывает изменение во времени амплитуды моды b_λ , обусловленное различными причинами: свободными осцилляциями поля в резонаторе ($\sim \omega_\lambda$), затуханием ($-\kappa_\lambda$), генерацией поля осциллирующими дипольными моментами ($-ig_{\mu\lambda}\alpha_\mu$), флуктуациями (например, в зеркалах) ($\sim F$). С другой стороны, полевые моды оказывают влияние на атомы. Это влияние описывается следующими уравнениями.

б) Материальные уравнения

1) Уравнения для атомных дипольных моментов

$$\dot{\alpha}_\mu = (-i\nu - \gamma)\alpha_\mu + i \sum_\lambda g_{\mu\lambda}^* b_\lambda \sigma_\mu + \Gamma_\mu(t); \quad (8.3)$$

здесь ν — центральная частота перехода атома, γ — ширина линии, обусловленная затуханием атомного дипольного момента. $\Gamma_\mu(t)$ — флуктуирующая сила, связанная с постоянной затухания γ . В соответствии с (8.3) α_μ изменяется благодаря свободным колебаниям атомного дипольного момента ($-i\nu$), затуханию ($-\gamma$) и действию поля ($\sim b_\lambda$). Множитель σ_μ обеспечивает правильное соотношение фаз между полем и дипольным моментом, зависящее от того, поглощается свет ($\sigma_\mu \equiv (N_2 - N_1)_\mu < 0$) или излучается ($\sigma_\mu > 0$). Наконец, при излучении или поглощении света меняется и инверсия.

2) Уравнения для инверсии населенностей атомных уровней

$$\dot{\sigma}_\mu = \gamma_{\parallel}(d_0 - \sigma_\mu) + 2i \sum_\lambda (g_{\mu\lambda}\alpha_\mu b_\lambda^+ - \text{Компл. сопр.}) + \Gamma_{\sigma_\mu}(t); \quad (8.4)$$

здесь d_0 — равновесная инверсия, поддерживаемая накачкой и некогерентными релаксационными процессами в отсутствие лазерной генерации, γ_{\parallel} — время релаксации инверсии к равновесию. В (8.3) и (8.4) Γ — флуктуирующие силы.

Рассмотрим сначала уравнения (8.2)–(8.4) с математической точки зрения. Они представляют собой систему связанных дифференциальных уравнений первого порядка для многих переменных. Даже если ограничиться рассмотрением мод, попадающих внутрь ширины линии атомного перехода, их может насчитываться от десятков до тысяч. Кроме того, типичное

число лазерно-активных атомов составляет 10^{14} или даже много больше, так что число переменных в системе (8.2)—(8.4) огромно. Далее, система нелинейна из-за наличия членов $b\sigma$ в (8.3) и αb^+ , α^+b в (8.4). Эти нелинейности играют решающую роль, и ими нельзя пренебрегать. Последнее по порядку, но не по важности обстоятельство—это то, что уравнение содержит флуктуирующие силы. Таким образом, на первый взгляд задача кажется безнадежно сложной. Мы покажем, однако, что, используя понятия и методы, развитые в гл. 7, получить ее решение довольно просто.

8.3. Понятие параметра порядка

Упрощению задачи и полному ее решению помогает рассмотрение физического смысла уравнений (8.2)—(8.4). Уравнение (8.2) описывает временную эволюцию амплитуды моды, находящейся под действием двух сил: вынуждающей силы, [возникающей благодаря осциллирующим дипольным моментам (α_μ) совершенно аналогично тому, как это имеет место в классической теории диполя Герца] и стохастической силы F . Уравнения (8.3) и (8.4) описывают обратное воздействие поля на атомы. Предположим, что в (8.3) инверсия σ_μ поддерживается постоянной. Тогда b действует на дипольный момент как вынуждающая сила. Если вынуждающая сила имеет нужную фазу и действует в резонанс, можно ожидать возникновения обратной связи между полем и атомами, или, другими словами, появления стимулированного излучения. Этому процессу стимулированного излучения препятствуют два фактора. С одной стороны, наличие постоянных диссипации κ и γ вызывает тенденцию к затуханию поля до нуля и, кроме того, флуктуирующие силы возмущают процесс излучения своим случайным воздействием. Таким образом, можно ожидать затухания колебаний. При увеличении σ_μ , как мы увидим далее, система внезапно становится неустойчивой, и поле и соответственно дипольные моменты экспоненциально нарастают. Обычно сначала затухание исчезает лишь у одной полевой моды, или, другими словами, одна мода становится неустойчивой. Вблизи точки неустойчивости ее время релаксации становится очень большим. Поэтому можно полагать, что амплитуды виртуально неустойчивых мод могут служить параметрами порядка. Эти медленно меняющиеся амплитуды подчиняют себе атомную систему. Как это видно из правых частей (8.3) и (8.4), атомы вынуждены подчиняться приказам параметров порядка. Если атомы следуют мгновенно приказам параметра порядка, можно адиабатически исключить «атомные» переменные α^+ , α , σ и получить замкнутую систему уравнений для параметров порядка b_λ . Эти

уравнения явно описывают конкуренцию между параметрами порядка. Атомы подчиняются приказу того параметра, который побеждает в этой конкурентной борьбе. Чтобы подробнее рассмотреть механизм лазерной генерации, предположим, что выживает одна мода b_λ , и ограничимся далее рассмотрением одномодового случая.

8.4. Одномодовый лазер

Опустим в (8.2)—(8.4) индекс λ и, предполагая, что имеется точный резонанс $\omega = \nu$, устраним зависимость от быстрого времени заменой переменных

$$b = \tilde{b}e^{-i\omega t}, \quad \alpha_\mu = \tilde{\alpha}_\mu e^{-i\nu t}, \quad F = \tilde{F}e^{-i\omega t}. \quad (8.5)$$

Опуская в дальнейшем знак тильды (\sim), запишем уравнение для новых переменных в виде

$$\dot{b} = -\kappa b - i \sum_{\mu} g_{\mu} \alpha_{\mu} + F(t), \quad (8.6)$$

$$\dot{\alpha}_{\mu} = -\gamma_{\mu} \alpha_{\mu} + i g_{\mu}^* b \sigma_{\mu} + \Gamma_{\mu}(t), \quad (8.7)$$

$$\dot{\sigma}_{\mu} = \gamma_{\parallel} (d_0 - \sigma_{\mu}) + 2i (g_{\mu} \alpha_{\mu} b^{\dagger} - \text{Компл. сопр.}) + \Gamma_{\sigma, \mu}(t). \quad (8.8)$$

Отметим, что для бегущих в одном направлении волн коэффициенты связи

$$g_{\mu} = g e^{-ikx_{\mu}}, \quad (8.9)$$

где g предполагается действительным. В уравнении для амплитуды фигурирует сумма дипольных моментов:

$$\sum_{\mu} \alpha_{\mu} e^{-ikx_{\mu}} = S_k. \quad (8.10)$$

Определим сначала осциллирующий дипольный момент из (8.7):

$$\alpha_{\mu} = i g_{\mu}^* \int_{-\infty}^t e^{-\nu(t-\tau)} (b \sigma_{\mu})_{\tau} d\tau + \hat{\Gamma}_{\mu}(t), \quad (8.11)$$

где

$$\hat{\Gamma}_{\mu}(t) = \int_{-\infty}^t e^{-\nu(t-\tau)} \Gamma_{\mu}(\tau) d\tau. \quad (8.12)$$

Теперь мы примем очень важное допущение, типичное для многих кооперативных систем (ср. разд. 7.2). Предположим, что время релаксации атомного дипольного момента α намного меньше, чем времена релаксации параметра порядка b , а также

σ_μ . Это позволяет в (8.11) вынести $b\sigma_\mu$ за знак интеграла. Используя это *адиабатическое приближение*, получаем

$$\alpha_\mu = \frac{ig_\mu^*}{\gamma} b\sigma_\mu + \hat{\Gamma}_\mu(t). \quad (8.13)$$

Из (8.13) следует, что атомы мгновенно подчиняются параметру порядка. Подставляя (8.13) в (8.16), имеем

$$\dot{b} = -\kappa b + \frac{g^2}{\gamma} b \sum_\mu \sigma_\mu + \hat{F}(t), \quad (8.14)$$

где \hat{F} теперь составлена из полевого источника шума F и атомных источников шума Γ

$$\hat{F}(t) = F(t) - i \sum_\mu g_\mu \hat{\Gamma}_\mu(t). \quad (8.15)$$

Чтобы полностью исключить дипольные моменты, подставим (8.13) в (8.8). Анализ показывает, что флуктуирующими силами вполне можно пренебречь. Тогда получим

$$\dot{\sigma}_\mu = \gamma_\parallel (d_0 - \sigma_\mu) - 4 \frac{g^2}{\gamma} b^+ b \sigma_\mu. \quad (8.16)$$

Снова предполагаем, что атом следит за полем без запаздывания, т. е.

$$\dot{\sigma}_\mu = 0. \quad (8.17)$$

Тогда решение (8.16) имеет вид

$$\sigma_\mu = d_0 (1 + 4(g^2/\gamma\gamma_\parallel) b^+ b)^{-1}. \quad (8.18)$$

Поскольку в основном мы будем рассматривать область вблизи порога, где проявляются наиболее характерные черты лазерной генерации, а в этой области $b^+ b$ еще малая величина, заменим (8.18) разложением:

$$\sigma_\mu = d_0 - 4(g^2/\gamma\gamma_\parallel) d_0 b^+ b. \quad (8.19)$$

Сразу же видно, что лазерная генерация начинается при определенном значении инверсии d_0 . Поскольку при этом $b^+ b$ — малая величина, можно в том же приближении заменить d_0 на d_c во втором члене (8.19).

Введем полную инверсию

$$\sum_\mu \sigma_\mu = D \quad (8.20)$$

и соответственно

$$Nd_0 = D_0 \quad (8.21)$$

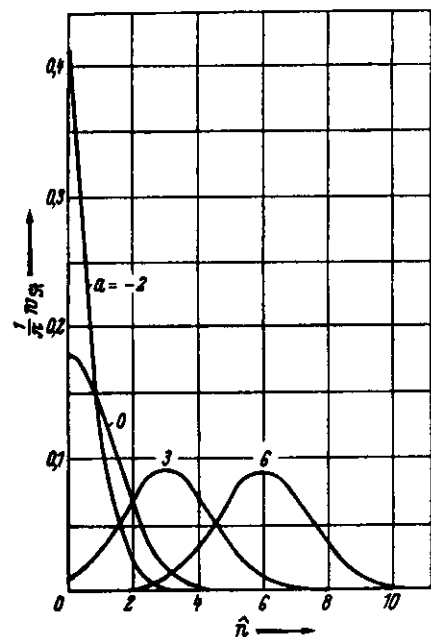
(N — число активных атомов).

Подставляя (8.19) в (8.14), получаем (используя $Nd_c = \kappa\gamma/g^2$)

$$\dot{b} = \left(-\kappa + \frac{g^2}{\gamma} D_0\right) b - 4 \frac{g^2 \kappa}{\gamma \gamma_{\parallel}} b^+ b b + \hat{F}(t). \quad (8.22)$$

Если считать b действительной величиной q , то (8.22), очевидно, идентично уравнению ангармонического осциллятора, рассмотренному в разд. 5.1 и 6.4 [ср. (6.118)], если обозначить там

$$\begin{aligned} \left(-\kappa + \frac{g^2}{\gamma} D_0\right) &= -\alpha, \\ 4 \frac{g^2 \kappa}{\gamma \gamma_{\parallel}} &= \beta. \end{aligned} \quad (8.22a)$$



Фиг. 8.1. Стационарное распределение как функция нормированной «интенсивности» \hat{q} (по работе [8.8]).

Таким образом, здесь можно использовать полученные ранее результаты, в частности для критической области, в которой параметр α меняет знак. Мы видим, что понятия неустойчивости, нарушающей симметрию, мягкой моды, критических флуктуаций, критического замедления непосредственно применимы в случае одномодового лазера, причем обнаруживается глубокая аналогия между порогом лазерной генерации и фазовым переходом второго рода (см. разд. 6.7). Хотя для интерпретации (8.22) можно использовать результаты и понятия из разд. 5.1—6.4 и 6.7, это уравнение можно также интерпретировать в терминах теории лазера. Если инверсия D_0 достаточно мала, то коэффициент при линейном члене в (8.22) отрицателен. Нелинейностью можно пренебречь, и поле поддерживается стохастическими процессами (спонтанно испускаемым шумом). Поскольку сила \hat{F} (приблизительно) гауссова, амплитуда b также распределена по гауссову закону (определение гауссова процесса см. в разд. 4.4). Величину, обратную времени релаксации амплитуды поля b , можно интерпретировать как ширину оптической линии. По мере увеличения инверсии D_0 затухание поля в системе становится все меньше и меньше. Соответственно

уменьшается и ширина оптической линии, что хорошо наблюдается в экспериментах с лазерами. Когда коэффициент α , задаваемый (8.22а), проходит через нуль, для b появляются два новых устойчивых положения равновесия. Величина b теперь интерпретируется как амплитуда поля, а это означает, что лазерное излучение полностью когерентно. Когерентность нарушается лишь дополнительными амплитудными флуктуациями, вызванными F , и весьма малыми фазовыми флуктуациями.

Если рассматривать (8.22) как уравнение для комплексной величины b , его правую часть можно получить из потенциала

$$V(|b|) = -\left(-\kappa + \frac{g^2}{\gamma} D_0\right) |b|^2 + 2 \frac{g^2 \kappa}{\gamma \gamma_{\parallel}} |b|^4. \quad (8.23)$$

Теперь с помощью методов, изложенных в разд. 6.3 и 6.4, можно записать и решить соответствующее уравнение Фоккера — Планка. Это дает

$$f(b) = \mathcal{N} \exp\left(-\frac{2V(|b|)}{Q}\right), \quad (8.24)$$

где Q определяет интенсивность флуктуирующей силы [ср. (6.91)]. Функция (8.24) (фиг. 8.1), описывающая распределение фотонов лазерного излучения, была проверена экспериментально с большой степенью точности. Как мы видели, в адиабатическом приближении атомы немедленно подчиняются параметру порядка. Теперь мы должны подробнее рассмотреть вопрос, почему доминирует только один параметр порядка. Если бы все параметры вступали в игру одновременно, система по-прежнему могла бы вести себя совершенно хаотическим образом.

Упражнение к разд. 8.4

Убедитесь, что уравнение

$$\dot{f} = \left[-\frac{\partial}{\partial b} \left(-ab - \beta |b|^2 b + \text{Компл. сопр.} + Q \frac{\partial^2}{\partial b \partial b^*} \right) \right] f$$

есть уравнение Фоккера — Планка, соответствующее (8.22).

8.5. Многомодовый лазер

Теперь повторим последовательно шаги предыдущего вывода для многомодового случая. Представим амплитуду полевой моды b_λ в виде произведения медленно меняющейся амплитуды B_λ и быстро осциллирующей с частотой Ω_λ части:

$$b_\lambda = B_\lambda e^{-i\Omega_\lambda t}, \quad (8.25)$$

Подставляя (8.25) в (8.3) и интегрируя, получаем

$$\alpha_\mu = i \sum_\lambda g_{\mu\lambda}^* \int_{-\infty}^t e^{(-i\nu - \nu)(t-\tau)} (b_\lambda \sigma_\mu)_\tau d\tau + \hat{\Gamma}_\mu. \quad (8.26)$$

Откуда, снова в адиабатическом приближении, имеем

$$\alpha_\mu = i \sum_\lambda g_{\mu\lambda}^* \{-i(\Omega_\lambda - \nu) + \nu\}^{-1} b_\lambda \sigma_\mu + \hat{\Gamma}_\mu. \quad (8.27)$$

Подставим (8.27) в (8.2) и введем обозначение

$$\delta\omega_\lambda = \omega_\lambda - \Omega_\lambda. \quad (8.28)$$

Тогда получим

$$e^{-i\Omega_\lambda t} \dot{B}_\lambda = (-i\delta\omega_\lambda - \kappa_\lambda) b_\lambda + \sum_{\mu\lambda'} \frac{g_{\mu\lambda} g_{\mu\lambda'}}{-i(\Omega_{\lambda'} - \nu) + \nu} b_{\lambda'} \sigma_\mu + \hat{F}_\lambda. \quad (8.29)$$

Рассмотрим теперь случай, когда имеется дискретный спектр мод. Допустим, что можно взять среднее по фазам различных мод, что во многих случаях оказывается достаточно хорошим приближением. (Однако можно также рассмотреть и синхронизацию фаз — явление, представляющее интерес для генерации ультракоротких импульсов.) Умножая (8.29) на b_λ и усредняя по фазам, имеем

$$\overline{B_\lambda^+ B_{\lambda'}} = n_\lambda \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (8.30)$$

где n_λ — число фотонов в моде λ . Если в (8.29) на время пренебречь флуктуирующими силами, получим

$$\dot{n}_\lambda = -2\kappa_\lambda n_\lambda + n_\lambda \omega_\lambda D, \quad (8.31)$$

где

$$\omega_\lambda = \frac{2\nu g^2}{(\Omega_\lambda - \nu)^2 + \nu^2}, \quad (8.32)$$

$$|g_{\mu\lambda}|^2 = g^2. \quad (8.33)$$

В этом же приближении находим

$$\dot{\sigma}_\mu = \nu_\parallel (d_0 - \sigma_\mu) - 2 \sum_\lambda \omega_\lambda n_\lambda \sigma_\mu. \quad (8.34)$$

Решение (8.34) в адиабатическом приближении дает

$$D \equiv \sum_\mu \sigma_\mu \approx D_0 - \frac{2D_0}{\nu_\parallel} \sum_\lambda \omega_\lambda n_\lambda, \quad (8.35)$$

где D_0 — критическое значение полной инверсии всех атомов на пороге генерации. Чтобы показать, что (8.31)–(8.35) приводят к селекции мод (или параметров порядка), рассмотрим

случай двух мод, приведенный в упражнении к разд. 5.4. Этот анализ можно также совершенно строго провести и для многомодового случая и показать, что в лазере выживает только одна мода, именно мода с наименьшими потерями, частота которой находится ближе всех к резонансу. Все остальные моды подавляются. Следует отметить, что уравнения типа (8.31) — (8.35) были недавно предложены в качестве математической модели эволюции. Этот вопрос мы рассмотрим в разд. 10.3.

Как мы видели в разд. 6.4, было бы чрезвычайно желательно вывести уравнение Фоккера — Планка и получить его стационарное решение, поскольку оно дает общую картину глобальной и локальной устойчивостей, а также информацию о величине флуктуаций. Решение уравнения Фоккера — Планка, соответствующего (8.29), (8.35), можно найти с помощью методов разд. 6.4. Оно имеет вид

$$f(B_\lambda) = \mathcal{N} \exp\left(-\frac{2\Phi}{Q}\right), \quad (8.36)$$

где

$$2\Phi = \sum_{\lambda} |B_{\lambda}|^2 (2\kappa_{\lambda} - \omega_{\lambda} D_0) + \frac{2D_c}{\gamma_{\parallel}} \sum_{\lambda\lambda'} \omega_{\lambda}\omega_{\lambda'} |B_{\lambda}|^2 |B_{\lambda'}|^2. \quad (8.37)$$

Локальный минимум Φ описывает устойчивое или метастабильное состояние. Это дает возможность описывать многомодовые конфигурации, если некоторые из мод вырожденные.

8.6. Многомодовый лазер с непрерывным распределением мод. Аналогия со сверхпроводимостью

Следующий, несколько более сложный пример позволяет установить соответствие с теорией сверхпроводимости Гинзбурга — Ландау. Предположим, что имеется *континуум мод*, бегущих в одном направлении. Так же, как и в только что рассмотренном случае, следует ожидать, что только те моды будут принимать участие в лазерной генерации, которые находятся вблизи резонанса; но так как теперь моды распределены непрерывно, мы должны рассмотреть все моды, сосредоточенные в окрестности резонанса. Таким образом, мы полагаем (это надо доказать самосогласованным образом), что вблизи порога лазерной генерации существуют лишь те моды, для которых

$$|\Omega_{\lambda} - \nu| \ll \gamma \quad (8.38)$$

и

$$|\Omega_{\lambda} - \Omega_{\lambda'}| \ll \gamma_{\parallel}. \quad (8.39)$$

Подставляя (8.27) в (8.4), получаем

$$\dot{\sigma}_\mu = \gamma_{\parallel} (d_0 - \sigma_\mu) - 2\sigma_\mu \sum_{\lambda\lambda'} \left(\frac{g_{\mu\lambda} g_{\mu\lambda}^*}{i(\Omega_\lambda - \nu) + \gamma} b_\lambda^+ b_{\lambda'} + \text{Компл. сопр.} \right). \quad (8.40)$$

Откуда в адиабатическом приближении

$$\sigma_\mu \approx \left(d_0 - \frac{2d_c}{\gamma_{\parallel}} \sum_{\lambda\lambda'} \gamma^{-1} g_{\mu\lambda} g_{\mu\lambda}^* + b_\lambda^+ b_{\lambda'} + \text{Компл. сопр.} \right). \quad (8.41)$$

Подставляя это выражение в (8.29), имеем

$$\begin{aligned} \dot{b}_\lambda = & \left(-i\omega_\lambda - \kappa_\lambda + D_0 \frac{g^2}{-i(\Omega_\lambda - \nu) + \gamma} \right) b_\lambda + \\ & + \hat{F}_\lambda(t) - \frac{4d_c}{\gamma_{\parallel} \gamma^2} \sum_{\mu\lambda'\lambda''} g_{\mu\lambda} g_{\mu\lambda'}^* g_{\mu\lambda''} g_{\mu\lambda''}^* b_{\lambda'} b_{\lambda''} b_{\lambda''}^+. \end{aligned} \quad (8.42)$$

Используя для g выражение (8.9), легко установить, что

$$\sum_{\mu} g_{\mu\lambda} g_{\mu\lambda'}^* g_{\mu\lambda''} g_{\mu\lambda''}^* = N g^4 \delta(k_\lambda - k_{\lambda''} - k_{\lambda'} + k_{\lambda'''}), \quad (8.43)$$

где N — число атомов в лазере. Отметим, что в нелинейной части (8.42) снова использовано условие (8.38). Если выражение

$$\omega_\lambda + \text{Im} \frac{D_0 g^2}{i(\Omega_\lambda - \nu) + \gamma} \quad (8.44)$$

не обладает дисперсией, т. е. $\Omega_\lambda \sim k_\lambda$, соответствующее уравнение Фоккера — Планка имеет точное решение

$$f(b) = \mathcal{N}_0 \exp\left(\frac{2\Phi}{Q}\right), \quad (8.45)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi = & \sum_{\lambda} |b_\lambda|^2 \left(D_0 \frac{\gamma g^2}{(\Omega_\lambda - \nu)^2 + \gamma^2} - \kappa_\lambda \right) - \\ & - \frac{2D_c}{\gamma_{\parallel} \gamma^2} g^4 \sum_{\lambda\lambda'\lambda''} \delta(k_\lambda - k_{\lambda''} - k_{\lambda'} + k_{\lambda'''}) b_\lambda^+ b_{\lambda'}^+ b_{\lambda''} b_{\lambda'''}^+. \end{aligned} \quad (8.46)$$

Мы не будем продолжать обсуждение этой проблемы в представлении мод, а перейдем к установлению упомянутой аналогии с теорией Гинзбурга — Ландау. Для этого положим

$$\omega_\lambda = c |k_\lambda|, \quad (8.47)$$

$$\Omega_\lambda = v |k_\lambda|, \quad (8.48)$$

$$\kappa_\lambda = \kappa. \quad (8.49)$$

Снова, ограничиваясь рассмотрением мод, близких к резонансу, используем разложение

$$\frac{g^2}{i(\Omega_\lambda - \nu) + \gamma} = \frac{g^2}{\gamma} - i \frac{g^2}{\gamma^2} (\Omega_\lambda - \nu) - \frac{g^2}{\gamma^3} (\Omega_\lambda - \nu)^2. \quad (8.50)$$

Заменим теперь индекс λ волновым числом k и образуем волновой пакет

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} B_k e^{+ikx - i\nu|k|t} dk. \quad (8.51)$$

После фурье-преобразования (8.42) получаем

$$\dot{\Psi}(x, t) = -\alpha \Psi(x, t) + c \left(i\nu \frac{d}{dx} + \nu \right)^2 \Psi(x, t) - 2\beta |\Psi(x, t)|^2 \Psi(x, t) + F(x, t), \quad (8.52)$$

где, в частности, коэффициент α равен

$$-\alpha = \left(-\kappa + \frac{g^2}{\gamma} D_0 \right). \quad (8.53)$$

Уравнение (8.52) идентично уравнению для волновой функции электронной пары в теории сверхпроводимости Гинзбурга — Ландау в одномерном случае, если установлены следующие соответствия:

<i>Сверхпроводник</i>	<i>Лазер</i>
Ψ , волновая функция электронной пары	Ψ , напряженность электрического поля
$\alpha \sim T - T_c$	$\alpha \sim D_c - D$
T — температура	D — полная инверсия
T_c — критическая температура	D_c — критическая инверсия
$\nu \sim A_x$ — компонента векторного потенциала	ν — атомная частота
$F(x, t)$ — тепловые флуктуации	Флуктуации, вызванные спонтанной эмиссией и т. д.

Отметим, однако, что наше уравнение справедливо для системы, находящейся вдали от теплового равновесия, где, в частности, флуктуирующие силы имеют совершенно иной смысл. Мы можем снова использовать уравнение Фоккера — Планка и,

обобщая решения (8.45), (8.46) на непрерывный случай, получить

$$f = N \exp\left(\frac{2\Phi}{Q}\right), \quad (8.54)$$

где

$$\Phi = \int \left\{ -\alpha |\Psi(x, t)|^2 - \beta |\Psi(x, t)|^4 - c \left| \left(i\nu \frac{d}{dx} - \nu \right) \Psi^+ \right|^2 \right\} dx. \quad (8.55)$$

Выражение (8.55) идентично выражению для функции распределения в теории сверхпроводимости Гинзбурга — Ландау, если (в дополнение к таблице, приведенной на стр. 275) отождествить Φ со свободной энергией \mathcal{F} и Q с $2k_B T$. Аналогия между системами, находящимися вдали от теплового равновесия, и равновесными системами столь очевидна, что не требует дальнейшего обсуждения. Отметим лишь, что как следствие этого методы, развитые для одномерных сверхпроводников, становятся применимы к лазерам и наоборот.

8.7. Фазовый переход первого рода в одномодовом лазере

Мы установили, что на пороге генерации одномодовый лазер испытывает переход, который обладает чертами фазового перехода второго рода. В этом разделе мы покажем, что, изменяя некоторые физические условия, можно изменить характер фазового перехода.

а) Одномодовый лазер, управляемый внешним сигналом

Когда на лазер падает извне световая волна, она взаимодействует непосредственно только с атомами. Поскольку атомы генерируют лазерное поле, то внешний сигнал косвенно влияет на лазерное поле. Пусть внешнее поле задается плоской волной

$$E = E_0 e^{i\varphi_0 + i\omega t - ik_0 x} + \text{Компл. сопр.}, \quad (8.56)$$

где E_0 — действительная амплитуда, а φ_0 — фиксированная фаза. Частота ω_0 находится в резонансе с частотой атомного перехода и также с частотой полевой моды. k_0 — соответствующее волновое число. Пусть амплитуда E_0 настолько мала, что внешнее поле практически не влияет на инверсию атомных уровней. Единственное уравнение, куда входит E_0 , — уравнение для дипольных моментов атома. Поскольку здесь внешнее поле играет ту же роль, что само лазерное поле, в (8.7) b можно

заменить на $b + \text{const} \cdot E$. Это эквивалентно замене

$$\Gamma_{\mu} \rightarrow \Gamma_{\mu} + \theta_{\mu} E_0 e^{-i\varphi_0} \sigma_{\mu}, \quad (8.57)$$

где

$$\theta_{\mu} = \theta e^{ik_0 x_{\mu}}, \quad (8.58)$$

θ пропорционально матричному элементу атомного дипольного момента. В (8.57) учтен только резонансный член. Поскольку член с E_0 в уравнениях — всего лишь поправочный член более высокого порядка, мы заменим в дальнейшем σ_{μ} на d_0 .

Теперь можно просто повторить все этапы процедуры итерации, изложенной после формулы (8.11). Тогда мы увидим, что единственное к чему приводит замена (8.57), — это следующая замена в (8.15):

$$\hat{F} \rightarrow \hat{F} - i \sum_{\mu} g_{\mu} \theta_{\mu} d_0 E_0 e^{-i\varphi_0} \gamma^{-1}. \quad (8.59)$$

Подставляя (8.59) в (8.22), приходим к основному уравнению

$$\dot{b} = \left(-\kappa + \frac{g^2}{\gamma} D_0 \right) b - 4 \frac{g^2 \kappa}{\gamma \gamma_{\parallel}} b^+ b b + E_0 e^{-i\varphi_0} + \hat{F}(t), \quad (8.60)$$

где введено обозначение

$$- \gamma^{-1} d_0 e^{-i\varphi_0} E_0 i \sum_{\mu} g_{\mu} \theta_{\mu} = \hat{E}_0 e^{-i\varphi_0}. \quad (8.61)$$

Правую часть (8.60) и комплексно-сопряженное ей выражение легко записать в виде производных от потенциала, добавив к ним флуктуирующие силы

$$db^+/dt = - \frac{\partial V}{\partial b} + \hat{F}^+, \quad (8.62)$$

$$db/dt = - \frac{\partial V}{\partial b^+} + \hat{F}. \quad (8.63)$$

Подставляя b как

$$b = r e^{-i\varphi}, \quad (8.64)$$

получаем для потенциала выражение

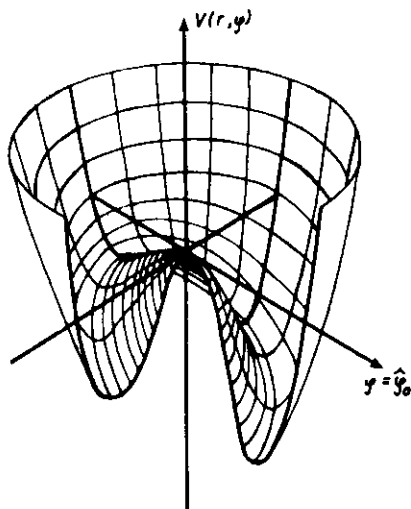
$$V = V_0(r) - 2\hat{E}_0 r \cos(\hat{\varphi}_0 - \varphi), \quad (8.65)$$

где V_0 — осесимметричный потенциал, задаваемый формулой (8.23). Дополнительный член с косинусом нарушает осевую симметрию. Если $\hat{E}_0 = 0$, потенциал обладает осевой симметрией, и фаза может диффундировать без затухания, что приводит к конечной ширине линии излучения. Если $\hat{E}_0 \neq 0$, диффузия фазы становится невозможной, поскольку потенциал как

функция φ имеет теперь минимум в точке

$$\varphi = \hat{\varphi}_0 + \pi. \quad (8.66)$$

Этот потенциал, представленный на фиг. 8.2, действительно соответствует фиксации фазы. Конечно, флуктуирующие силы заставляют φ флуктуировать относительно значения, определяемого (8.66).



Фиг. 8.2. Осевая симметрия потенциала нарушается внешним сигналом (по работе [8.15]).

учесть зависимость потерь от интенсивности. Это можно сделать, заменяя в (8.44) κ на

$$\kappa(b) \approx \kappa_0 + \kappa_s - |b|^2 \kappa_s / I_s. \quad (8.67)$$

Это выражение дает разумное приближение при не слишком сильных интенсивностях $|b|^2$, однако в очень сильных полях (8.67) приводит к неверному результату, поскольку постоянная затухания становится отрицательной. Можно показать, что в общем случае постоянную затухания следует записать в виде

$$\kappa \rightarrow \kappa(b) = \kappa_0 + \frac{\kappa_s}{1 + |b|^2 / I_s}. \quad (8.68)$$

Из выражения (8.68) становится ясным смысл I_s . Это то значение интенсивности поля, при превышении которого уменьшение потерь становится все менее и менее существенным. Не представляет труда также более точно рассмотреть изменение инверсии, задаваемой формулой (8.18). Подставляя ее в (8.13),

б) Одномодовый лазер с насыщающим поглотителем

Рассмотрим экспериментальное устройство, в котором между активной лазерной средой и одним из зеркал помещается насыщающий поглотитель (ср. фиг. 1.9). Вещество поглотителя обладает следующим свойством. Если его освещать светом со слабой интенсивностью, оно поглощает свет, а при больших интенсивностях света насыщающий поглотитель становится прозрачным. Чтобы учесть влияние насыщающего поглотителя, в основных уравнениях следует

а полученное выражение в (8.6) и используя постоянную затухания (8.68), получаем

$$db^+/dt = - \left(\kappa_0 + \frac{\kappa_s}{1 + |b|^2/I_s} \right) b^+ + \frac{G}{1 + |b|^2/I_{as}} b^+ + \hat{F}^+(t). \quad (8.69)$$

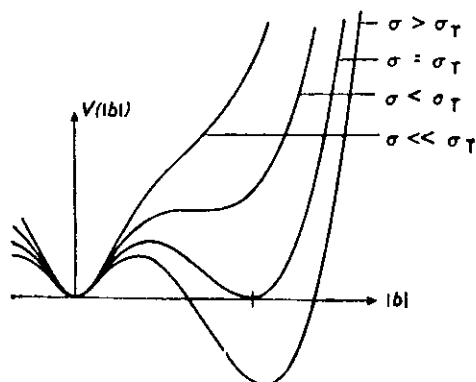
Здесь приняты обозначения

$$G = d_0 \sum_{\mu} |g_{\mu}|^2 / \gamma \equiv \frac{g^2}{\gamma} D_0 \quad (8.70)$$

и

$$1/I_{as} = 4g^2/\gamma\gamma_{\parallel}. \quad (8.71)$$

Правая часть (8.69) и комплексно-сопряженное ей выражение могут быть выведены из потенциала, который можно найти ин-



Фиг. 8.3. Изменение потенциальной кривой при вариации параметра накачки $\sigma = d_0$ (по работе [8.14]).

тегрированием в явном виде:

$$-V(b) = -\kappa_0 |b|^2 - I_s \kappa_s \ln(1 + |b|^2/I_s) + I_{as} G \ln(1 + |b|^2/I_{as}). \quad (8.72)$$

Рассмотрим (8.72) в частном случае $I_s \ll I_{as}$. Это позволяет при не слишком больших $|b|^2$ разложить второй логарифм в ряд, первый же логарифм следует оставить без изменения. В результате получаем следующую потенциальную кривую:

$$-V(b) = (G - \kappa_0) |b|^2 - I_s \kappa_s \ln(1 + |b|^2/I_s) - \frac{1}{2} G |b|^4/I_{as}. \quad (8.73)$$

Она представлена на фиг. 8.3. При изменении параметра накачки G потенциал изменяется подобно тому, как это имело

место при фазовом переходе первого рода, рассмотренном в разд. 6.7 (ср. там же с соответствующими потенциальными кривыми). В частности, имеет место эффект гистерезиса.

8.8. Иерархия неустойчивостей в лазере и ультракороткие лазерные импульсы

Рассмотрим многомодовый лазер с непрерывным распределением мод. Будем рассматривать электрическое поле \mathcal{E} непосредственно, без разложения его по модам резонатора. Для «макроскопического» описания активной среды введем макроскопическую поляризацию $\mathcal{P}(\mathbf{x}, t)$ и плотность инверсии $\mathcal{D}(\mathbf{x}, t)$:

$$\mathcal{P}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mu} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\mu}) (\Theta_{21} \alpha_{\mu} + \Theta_{12} \alpha_{\mu}^*) \quad (8.74)$$

(Θ_{21} — матричный элемент атомного дипольного момента) и

$$\mathcal{D}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mu} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\mu}) \sigma_{\mu}. \quad (8.75)$$

Тогда уравнения лазера принимают вид

$$-\Delta \mathcal{E} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial t^2} + \frac{2\kappa}{c^2} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c^2} \mathcal{P}, \quad (8.76)$$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{P}}{\partial t^2} + 2\gamma \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} + \omega_0^2 \mathcal{P} = -\frac{2}{3} \omega_0 (|\theta_{21}|^2 / \hbar) \mathcal{E} \mathcal{D}, \quad (8.77)$$

$$\frac{\partial \mathcal{D}}{\partial t} = \gamma_{\parallel} (\mathcal{D}_0 - \mathcal{D}) + (2/\hbar \omega_0) \mathcal{E} \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t}. \quad (8.78)$$

Уравнение (8.76) следует непосредственно из уравнения Максвелла, а (8.77) и (8.78) — материальные уравнения, получаемые в теории лазеров с помощью квантовой механики. Поскольку наше рассмотрение ограничивается лишь основными чертами, мы опустили флуктуирующие силы, оставляя задачу их учета читателю в качестве упражнения. κ — потери в «резонаторе», γ — ширина атомного перехода, $\gamma_{\parallel}^{-1} = T_1$ — время релаксации инверсии атомных уровней, ω_0 — частота атомного перехода, \hbar — постоянная Планка. Физический смысл этих уравнений тот же, что и в уравнениях на стр. 265. \mathcal{D}_0 — «ненасыщенное» значение инверсии, обусловленное накачкой и процессами релаксации. Ограничимся случаем фиксированного направления вектора поляризации поля и распространения волны в направлении оси x . Поскольку поле осциллирует на резонансной частоте ω_0 , положим

$$\mathcal{E} = e^{i\omega_0 t - ik_0 x} \hat{E}^{(-)}(x, t) + \text{Компл. сопр.}, \quad (8.79)$$

где $\omega_0 = ck_0$ и $\hat{E}^{(+)} = \hat{E}^{(-)*}$. Аналогичным образом представим и \mathcal{P} в виде двух частей. $\hat{E}^{(-)}(x, t)$ и $\hat{P}^{(-)}(x, t)$ — медленно ме-

няющиеся функции x и t , поэтому можно пренебречь, например, $\dot{\hat{E}}$ по сравнению с $\omega_0 \hat{E}$ и т. д. После этого мы получаем следующую систему уравнений:

$$\partial \hat{E}^{(-)} / \partial t + c \frac{\partial \hat{E}^{(-)}}{\partial x} + \kappa E^{(-)} = -2\pi i \omega_0 \hat{P}^{(-)}, \quad (8.80)$$

$$\partial \hat{P}^{(-)} / \partial t + \gamma \hat{P}^{(-)} = \frac{i}{3} (|\Theta_{21}|^2 / \hbar) \hat{E}^{(-)} \hat{D}, \quad (8.81)$$

$$\partial \hat{D} / \partial t = \gamma_{\parallel} (D_0 - \hat{D}) + (2i/\hbar) (\hat{E}^{(+)} \hat{P}^{(-)} - \hat{E}^{(-)} \hat{P}^{(+)}). \quad (8.82)$$

Эти уравнения эквивалентны уравнениям (8.2) — (8.4), если считать, что $\kappa_{\lambda} = \kappa$ и перейти к представлению дискретных бегущих мод. Пусть вначале инверсия D_0 мала. Рассмотрим, что произойдет с \hat{E} , \hat{P} , \hat{D} , если увеличивать значение D_0 .

1) D_0 мало, $D_0 < \kappa \gamma / g^2$.

Решение имеет вид

$$\hat{E} = \hat{P} = 0, \quad \hat{D} = D_0, \quad (8.83)$$

т. е. лазерная генерация отсутствует. Для проверки решения (8.83) на устойчивость проведем линейный анализ устойчивости, положив

$$\hat{E} = a e^{\lambda t - ikx}, \quad (8.84)$$

$$\hat{P} = b e^{\lambda t - ikx}, \quad (8.85)$$

$$\hat{D} - D_0 = c e^{\lambda t - ikx}. \quad (8.86)$$

В результате получаем следующие характеристические значения:

$$\lambda^{(1)} = -\gamma_{\parallel}, \quad (8.87)$$

$$\lambda^{(2,3)} = \frac{1}{2} \{-\gamma - \kappa + ick \pm \sqrt{\quad}\}, \quad (8.88)$$

где

$$\sqrt{\quad} = [(\gamma + \kappa + ick)^2 + 4g^2 (D_0 - \hat{D}_{\text{пор.1}}) + 4ic\gamma\kappa]^{1/2}. \quad (8.89)$$

Теперь введем сокращенное обозначение порогового значения

$$\hat{D}_{\text{пор.1}} = \kappa \gamma / g^2, \quad \text{где } g^2 = 2\pi \omega_0 |\Theta_{12}|^2 / 3\hbar. \quad (8.90)$$

Более внимательное рассмотрение (8.88) и (8.89) показывает, что $\lambda^2 \geq 0$ для $D_0 \geq \hat{D}_{\text{пор.1}}$ и *неустойчивость* имеет место сначала в точке $k = 0$.

2) $\hat{D}_{\text{пор.1}} \leq D_0 \leq \hat{D}_{\text{пор.2}}$.

Просто убедиться в том, что решение

$$\hat{E}(x, t) = \hat{E}_{\text{cw}}, \quad \hat{P}(x, t) = \hat{P}_{\text{cw}}, \quad \hat{D}(x, t) = \hat{D}_{\text{cw}} \quad (8.91)$$

теперь устойчиво. (Индекс sw означает «в режиме непрерывной генерации».) Правые части (8.91) представляют собой постоянные, не зависящие от пространственной и временной координат и удовлетворяющие уравнениям (8.80)—(8.82). Это решение соответствует решению, полученному в разд. 8.4—8.6 для области лазерной генерации в пренебрежении флуктуациями. Для дальнейшего удобно нормализовать E , P , D с учетом (8.91), положив

$$E = \hat{E}/E_{cw}, \quad P = \hat{P}/\hat{P}_{cw}, \quad D = \hat{D}_{пор}, \quad (8.92)$$

и ввести эффективный параметр накачки

$$\Lambda = (D_0 - D_{пор})/D_{пор}. \quad (8.93)$$

Более подробный анализ показывает, что E , P , D можно выбрать действительными, так что система (8.80)—(8.82) принимает вид

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \gamma\right)P = \gamma ED, \quad (8.94)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \gamma_{\parallel}\right)D = \gamma_{\parallel}(\Lambda + 1) - \gamma_{\perp}\Lambda EP, \quad (8.95)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \kappa + c\frac{\partial}{\partial x}\right)E = \kappa P. \quad (8.96)$$

Решения E , P , D вследствие их нормированности имеют вид

$$E = P = D = 1. \quad (8.97)$$

Снова исследуем решение на устойчивость, положив

$$\begin{pmatrix} E \\ D \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e \\ \delta \\ p \end{pmatrix}. \quad (8.98)$$

Обозначим

$$\mathbf{q}(x, t) = \begin{pmatrix} e \\ \delta \\ p \end{pmatrix}. \quad (8.99)$$

Положив $\mathbf{q}(x, t) = \mathbf{q}(0)e^{\lambda t - ikx/c}$, получаем для λ характеристическое уравнение третьего порядка, которое допускает неустойчивое решение, т. е. $\text{Re } \lambda > 0$, если выполняется условие

$$\Lambda > \Lambda_c \equiv 4 + 3\varepsilon + 2\sqrt{2(1 + \varepsilon)(2 + \varepsilon)}, \quad (8.100)$$

где $\varepsilon = \gamma_{\parallel}/\gamma$.

3) $D_0 \geq D_{пор, 2}$.

При $\Lambda = \Lambda_c$ действительная часть постоянной «затухания» λ_u (индекс u соответствует неустойчивой моде) обращается в

нуль, но у λ остается не равная нулю мнимая часть, определяемая выражением

$$\lambda_u^2 = \frac{1}{2} (\varepsilon - 3\Lambda_c) \gamma_{\parallel} \gamma. \quad (8.101)$$

При $\Lambda = \Lambda_c$ волновое число k также не равно нулю

$$k = k_c = -i \left(\lambda_u \frac{\kappa \gamma \gamma_{\parallel}}{2(\gamma + \gamma_{\parallel})} (\Lambda_c + \varepsilon) \right). \quad (8.102)$$

Представим q в виде суперпозиции плоских волн и собственных векторов линеаризованных уравнений (предполагая, что рассматривается кольцевой лазер с резонатором длины L и периодическими граничными условиями):

$$q = \sum_{k, l} \mathbf{O}^{(l)} \left(c \frac{\partial}{\partial x} \right) \xi_{k, j} \chi_k, \quad (8.103)$$

где

$$\chi_k = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i k x / c}. \quad (8.104)$$

Дальнейшие вычисления повторяют соответствующие вычисления в разд. 7.7 и 7.8. Решая уравнения для амплитуды устойчивых мод с точностью до членов четвертого порядка по амплитуде неустойчивой моды $\xi_{k_c, u}$, получаем уравнение

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + c \frac{\partial}{\partial x} \right) \xi_{k_c, u} = \tilde{\lambda} \xi_{k_c, u} + \tilde{a} |\xi_{k_c, u}|^2 \xi_{k_c, u} - \tilde{b} |\xi_{k_c, u}|^4 \xi_{k_c, u}. \quad (8.105)$$

Выделяя в ξ действительную амплитуду и фазовый множитель

$$\xi_{k_c, u} = R e^{i\varphi}, \quad (8.106)$$

получаем уравнение для R

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + c \frac{\partial}{\partial x} \right) R = \beta R + a R^3 - b R^5 \equiv - \frac{\partial V}{\partial R}, \quad (8.107)$$

где

$a = \text{Re } \tilde{a} > 0$ или < 0 в зависимости от длины L ,

$b = \text{Re } \tilde{b} > 0$,

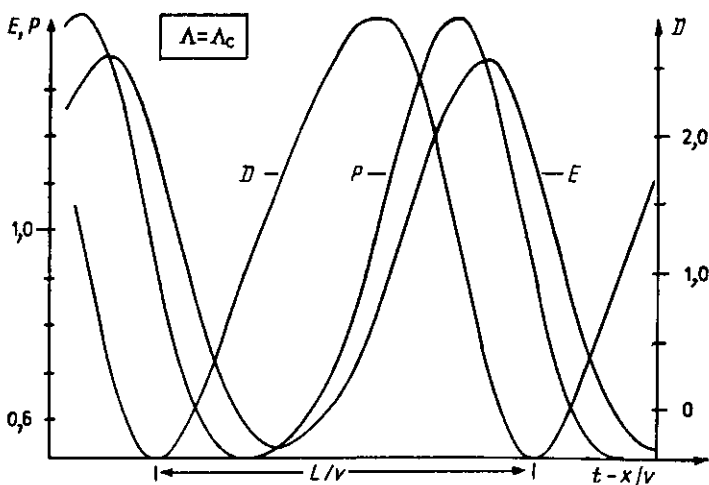
$\tilde{\lambda} > 0$ для $\Lambda > \Lambda_c$,

< 0 для $\Lambda < \Lambda_c$.

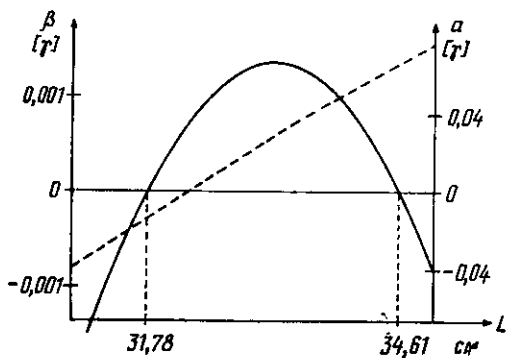
(8.108)

Переходя к новым переменным

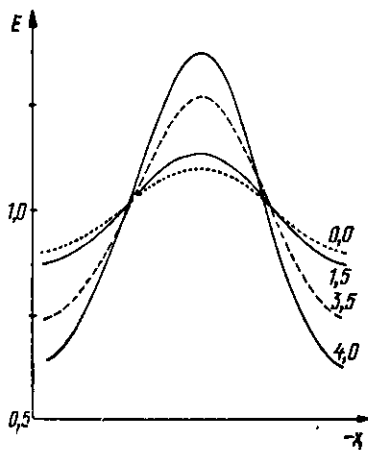
$$\tilde{x} = x/c - t, \quad \tilde{t} = t, \quad (8.109)$$



Фиг. 8.4. Напряженность электрического поля E , поляризация P и инверсия D при $\Lambda = \Lambda_c$ (по работе [8.16]).



Фиг. 8.4а. Коэффициенты β , a из (8.107) как функция длины лазера L . Левая ордината соответствует β , правая — a . Выбраны следующие значения параметров: $\gamma = 2 \cdot 10^9$ с, $\kappa = 0,1\gamma$, $\gamma_{||} = 0,5\gamma$; $\Lambda = 11,5$ (по работе [8.18]).



Фиг. 8.4б. Нарастание во времени напряженности электрического поля ультракороткого лазерного импульса в случае перехода первого рода (по работе [8.17]).

преобразуем (8.96) в дифференциальное (по времени) уравнение первого порядка, где \bar{x} играет роль параметра, который в конце концов выпадает из окончательного решения. Интерпретируя правую часть (8.107) как производную от потенциальной функции V , а левую часть как кинетический оператор затухающего движения частиц, можно с помощью потенциальных кривых рассмотреть, как ведет себя амплитуда. Сначала рассмотрим случай $\text{Re } \bar{a} > 0$. Форма соответствующей потенциальной кривой аналогична изображенной на фиг. 8.3. При условии

$$d \equiv 4\beta b/a^2 < -1 \quad (8.110)$$

имеется лишь один минимум, $R=0$, т. е. решение, соответствующее непрерывному режиму генерации, устойчиво. При $-1 < d < 0$ осциллирующее решение все еще устойчиво, но появление нового минимума на потенциальной кривой показывает, что теперь имеется второе, новое состояние, достижимое при жестком возбуждении. Наконец, если $d > 0$, $R=0$, решение $R=0$ становится неустойчивым (точнее, точкой маргинальной устойчивости), а новое устойчивое состояние находится в точке $R=R_2$. Таким образом, амплитуда лазерного импульса скачком изменяет свое значение от $R=0$ до $R=R_2$. Коэффициенты (8.105) представляют собой довольно сложные выражения и здесь не приводятся. Уравнение (8.107) было решено численными методами; полученная амплитуда R и соответствующая фаза затем подставлялись в (8.103). В результате оказалось, что электрическое поле E выражается формулой

$$E = (1 + E_0) + E_1 \cos(\omega_c \tau + \varphi_1) + E_2 \cos(2\omega_c \tau + \varphi_2) + E_3 \cos(3\omega_c \tau + \varphi_3), \quad \tau = t - k_c x / \omega_c c, \quad (8.111)$$

куда включены члены до третьей гармоники включительно. На фиг. 8.4 представлены соответствующие графики напряженности поля E , поляризации P и инверсии D при $\Lambda = \Lambda_c$. Эти результаты можно сравнить с кривыми, полученными путем численного решения непосредственно уравнений (8.94) — (8.96) для случая $\Lambda = 11$. Было найдено очень хорошее согласие результатов, например, для электрического поля.

Рассмотрим теперь случай $\text{Re } \bar{a} < 0$. Формы соответствующих потенциальных кривых для случаев $\beta < 0$ или $\beta > 0$ соответственно показаны сплошными линиями на фиг. 6.6, *a* и *b*, т. е. теперь мы имеем дело с фазовым переходом второго рода и мягкой модой. Поведение соответствующих напряженности поля, поляризации и инверсии похоже на изображенное на фиг. 8.4.

Зависимость коэффициентов α и β (8.108) от длины лазера L при заданной мощности накачки показана на фиг. 8.4а.

Метод обобщенных уравнений Гинзбурга — Ландау позволяет рассмотреть также и нарастание ультракоротких лазерных импульсов. В этом случае сначала решаются уравнения (8.107) и (8.109) для параметра порядка, зависящего от времени, а затем определяют амплитуды подчиненных мод. Типичный результат представлен на фиг. 8.4б.

8.9. Неустойчивости в гидродинамике: проблемы Бенара и Тейлора

Рассматриваемые ниже проблемы привлекают физиков по крайней мере уже в течение века. Это — поразительные примеры того, как системы, полностью разупорядоченные в состоянии теплового равновесия, будучи выведенными из состояния теплового равновесия, могут внезапно в высокой степени упорядочиваться. Среди этих проблем — так называемые проблемы Бенара и Тейлора. Рассмотрим сначала проблему Бенара, или, как она иначе называется, конвективную неустойчивость. Пусть имеется горизонтальный слой жидкости бесконечной протяженности. Снизу его подогревают, благодаря чему поддерживается температурный градиент. Выраженный в подходящих безразмерных единицах, этот градиент называется числом Рэлея R . Пока число Рэлея не слишком велико, жидкость остается спокойной, а тепло переносится за счет теплопроводности. Однако, если R превосходит некоторое определенное значение, в жидкости внезапно возникает конвективное движение. Наиболее удивительно то, что конвективные структуры весьма регулярны и могут образовывать либо цилиндрические, либо гексагональные конфигурации. Шестиугольники (см. фиг. 1.16) представляют собой вид сверху конвективных ячеек. Жидкость поднимается в центре ячейки и опускается у ее границ или наоборот. Задача теоретика, очевидно, состоит в объяснении механизма этого внезапного перехода типа «беспорядок — порядок» и в предсказании формы и устойчивости ячеек. В более точной теории следует включить в рассмотрение флуктуации.

С этой проблемой тесно связана так называемая проблема Тейлора. Пусть между длинным неподвижным внешним цилиндром и концентрическим ему вращающимся внутренним цилиндром находится слой жидкости. Если скорость вращения внутреннего цилиндра, выраженная в подходящих безразмерных величинах (число Тейлора), достаточно мала, течение жидкости происходит вдоль круговых линий тока (течение Куэтта). Но если число Тейлора превосходит критическое значение, то вдоль

аксиального направления появляются пространственно-периодические вихри — вихри Тейлора.

Рассмотрим конвективную неустойчивость подробно. Физические величины, фигурирующие в этой задаче, — это поле скоростей с компонентами u_j ($j = 1, 2, 3, \leftrightarrow x, y, z$) в точке пространства x, y, z , давление p , температура T . Перед тем как перейти к математическим подробностям, наметим общий ход анализа. Поле скоростей, давление и температура подчиняются определенным нелинейным уравнениям гидродинамики, которые можно привести к виду с явной зависимостью от числа Рэлея R , задаваемого извне. При малых значениях мы находим решение, положив компоненты скорости равными нулю. Устойчивость этого решения доказывается путем линеаризации всех уравнений относительно стационарных значений u, p, T , где мы получаем *затухающие волны*. Если, однако, число Рэлея превосходит определенное критическое значение R_c , решения становятся неустойчивыми. Процедура теперь становится довольно похожей на ту, с которой мы встречались в теории лазеров (ср. разд. 8.8). Решения, которые становятся неустойчивыми, определяют набор мод. Реальное поле (u, T) разлагается по этим модам с неизвестными амплитудами. Для амплитуд мод мы получаем нелинейные уравнения, которые сильно напоминают уравнения теории лазеров и приводят к определенным конфигурациям, которые создаются устойчивыми модами. Включая в рассмотрение тепловые флуктуации, мы снова приходим к задаче, в которой фигурируют детерминированные силы и флуктуирующие силы, вполне в духе гл. 7. Их совместное действие определяет, в частности, область перехода, где $R \approx R_c$.

8.10. Основные уравнения

Перейдем теперь к математическому рассмотрению, исходя из основных уравнений гидродинамики и используя так называемое приближение Буссинеска. При этом пренебрежем температурной зависимостью всех коэффициентов, за исключением плотности ρ . Зависимость плотности от температуры

$$\delta\rho = \rho_0(T - T_0)$$

[ρ_0 — средняя плотность, α — коэффициент теплового расширения, T — абсолютная температура, T_0 — эталонная температура, при которой $\rho(T) = \rho_0$] учитывается только в члене, описывающем действие гравитационной силы на жидкость. Для краткости запишем соответствующие уравнения в безразмерной форме:

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (8.112)$$

— уравнение неразрывности несжимаемой жидкости (по повторяющимся индексам предполагается суммирование),

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial x_i} + P\Theta\lambda_i + P\Delta u_i + F_i^u, \quad (8.113)$$

$$\lambda = (0, 0, 1).$$

Это уравнение описывает ускорение жидкости под действием внешних и внутренних сил. $\bar{\omega}$ определяется как

$$\bar{\omega} = p/\rho_0 + gz - \frac{1}{2}\beta\alpha z^2; \quad (8.114)$$

g — ускорение свободного падения, P — число Прандтля

$$P = \nu/\kappa, \quad (8.115)$$

где ν — кинетическая вязкость, κ — коэффициент теплопроводности, $\Delta = \partial^2/\partial x_1^2 + \partial^2/\partial x_2^2 + \partial^2/\partial x_3^2$. $F_i^{(u)}$ — флуктуирующая сила. Наконец,

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = -u_j \frac{\partial \Theta}{\partial x_j} + Ru_z + \Delta\Theta + F^{(\Theta)} \quad (8.116)$$

— уравнение теплопроводности, где $\Theta = T - T_0 - \beta z$ (β — температурный градиент в вертикальном направлении). Число Рэлея R задается формулой

$$R = \alpha g \beta d^4 / \nu \kappa, \quad (8.117)$$

где d — толщина слоя жидкости. $F^{(\Theta)}$ — флуктуирующая сила. Граничные условия для u , Θ следующие: бесконечный в горизонтальном направлении слой жидкости заключен между плоскостями $z = -d/2$ и $z = d/2$. Для вязкой жидкости на твердой границе

$$u_i = \Theta = 0 \quad (8.118)$$

и на свободной границе

$$u_z = \frac{\partial}{\partial u_z} \epsilon_{12k} u_k = \Theta = 0. \quad (8.119)$$

Включив в рассмотрение дополнительные члены, можно выйти за пределы приближения Буссинеска. Мы не будем их здесь рассматривать явно, отметим лишь, что некоторые из них не инвариантны по отношению к отражению от вертикальной плоскости симметрии жидкости. Это обстоятельство имеет важные последствия для структуры окончательно получающихся уравнений.

8.11. Затухающие и нейтральные решения ($R \leq R_c$)

Обратимся теперь к (8.112) и (8.116). Допустим сначала, что $R < R_c$. Линеаризуя нелинейные уравнения относительно значений $u = \Theta = 0$, получаем после некоторых вычислений затухающие решения

$$u \sim e^{-\gamma t}; \quad \gamma > 0. \quad (8.120)$$

Определим теперь критическое значение R_c как такое значение, при котором γ обращается в нуль. $R = R_c$, таким образом, определяет маргинальные (нейтральные) состояния. Громоздкое, но прямое вычисление показывает, что нейтральные решения могут быть записаны в виде

$$u_i^{(1)}(\mathbf{x}) = \delta_i v^{(1)}, \quad (8.121)$$

где оператор δ_i равен

$$\delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial z} - \lambda_i \Delta; \quad \lambda = (0, 0, 1), \quad (8.122)$$

а

$$v_1 = w(x, y) g(z). \quad (8.123)$$

Функции w и $g(z)$ определяются следующим образом: для свободных границ (начало координат — в середине слоя)

$$g(z) = (\pi^2 + k^2)^2 \cos \pi z \quad (8.124)$$

и

$$w(x, y) = \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}, \quad (8.125)$$

где коэффициенты $A_{\mathbf{k}}$ все еще произвольны и вектор \mathbf{k} лежит в x, y -плоскости

$$\mathbf{k} = (k_x, k_y), \quad (8.126)$$

причем по абсолютной величине \mathbf{k} равен

$$k = \frac{\pi}{\sqrt{2}}. \quad (8.127)$$

Не входя в детали нейтрального решения, отметим лишь, что оно может быть описано суперпозицией формальных векторов

$$\Psi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(1)} \\ \Theta_{\mathbf{k}}^{(1)} \end{pmatrix}. \quad (8.128)$$

Для дальнейшего определим результат транспонирования (8.128) как

$$\bar{\Psi}_{\mathbf{k}} = (\mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(1)}, \Theta_{\mathbf{k}}^{(1)}). \quad (8.129)$$

Для $\Theta_{\mathbf{k}}^{(1)}$ также можно дать явные выражения.

8.12. Решение вблизи $R = R_c$ (область нелинейности). Эффективные уравнения Ланжевена

Применим теперь методы из разд. 7.7 или 7.9 для исключения устойчивых мод. Запишем нейтральные (или неустойчивые) решения в виде

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{x}) \quad (8.130)$$

и найдем затем уравнения для медленно меняющихся амплитуд $A_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, t)$. Пренебрегая всеми членами, выходящими за рамки приближения Буссинеска, получаем систему уравнений

$$\frac{\partial A_{\mathbf{k}}}{\partial t} = \gamma \left(\frac{\partial}{\partial x_{(\mathbf{k})}} - \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \frac{\partial^2}{\partial y_{(\mathbf{k})}^2} \right) A_{\mathbf{k}} + \alpha A_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}'} \beta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} |A_{\mathbf{k}'}|^2 A_{\mathbf{k}} + F_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, y, t), \quad (8.131)$$

которые имеют вид уравнений Ланжевена для $A_{\mathbf{k}}$. $\partial/\partial x_{(\mathbf{k})}$ — производная в направлении вектора \mathbf{k} , фигурирующего в $A_{\mathbf{k}}$, $\partial/\partial y_{(\mathbf{k})}$ — производная в перпендикулярном направлении. Далее имеем

$$\beta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \bar{\beta} \quad \text{при } \mathbf{k} = \mathbf{k}' \quad (8.132)$$

и положим

$$\beta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \bar{\beta}(1 + \beta_{ij}) \quad \text{при } \mathbf{k} \neq \mathbf{k}'. \quad (8.133)$$

Для дальнейшего явный вид β_{ij} не очень важен. Заметим только, что коэффициенты β_{ij} положительны. Коэффициенты α , $\bar{\beta}$, γ в (8.131) определяются как

$$\gamma = \frac{4P}{P+1}, \quad (8.134)$$

$$\alpha = \frac{3P\pi^2}{2(P+1)} \frac{R - R_c}{R_c}, \quad (8.135)$$

$$\bar{\beta} = \frac{P}{2(P+1)}. \quad (8.136)$$

Флуктуирующие силы $F_{\mathbf{k}}$ находим как проекции исходных флуктуирующих сил на нейтральные решения, т. е.

$$F_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, y, t) = \left\langle \left(\bar{\Psi}_{\mathbf{k}}, \begin{pmatrix} \mathbf{F}^{(u)} \\ F^{(\theta)} \end{pmatrix} \right) \right\rangle. \quad (8.137)$$

Угловые скобки обозначают усреднение по пространственным координатам в области, большой по сравнению с $1/|k|$, но малой по сравнению с длиной волны флуктуаций $A_{\mathbf{k}}$. Из этого

определения легко выводятся следующие корреляционные функции:

$$\langle\langle F_{\mathbf{k}}(x, y, t) F_{\mathbf{k}'}(x', y', t') \rangle\rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta(x - x') \delta(y - y') \delta(t - t') Q. \quad (8.138)$$

Двойные угловые скобки обозначают статистическое усреднение по тепловым флуктуациям. Используя флуктуирующие силы, введенные Ландау и Лифшицем, получаем

$$Q = \frac{\pi^2}{4(P+1)} \left(\frac{\eta k_B T}{\rho^2 \kappa^3 d} + \frac{P^2}{R_c} \frac{\alpha^2 g^2 d^3 k_B T^2}{\rho^2 c_p^2 \kappa^2 v^2} \right). \quad (8.139)$$

Если учесть дополнительные к приближению Буссинеска члены, нарушающие зеркальную симметрию, то к правой части (8.131) нужно добавить член

$$- \delta \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} A_{\mathbf{k}_1}^* A_{\mathbf{k}_2}^* \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}, 0}. \quad (8.140)$$

(Для полноты добавим, что включение дополнительных членов требует «перенормировки» R_c , k и изменения функции $g(z)$ в (8.123). Поскольку это не изменяет структуры последующих уравнений, мы не будем вдаваться в подробности.)

Уравнение вида (8.131) хорошо известно нам из разделов, посвященных теории лазера, и мы можем использовать развитые там методы решения. Прежде чем переходить к решению, запишем (8.131) [при необходимости с включением (8.140)] в виде

$$\frac{\partial A_{\mathbf{k}}}{\partial t} = \tilde{L} A_{\mathbf{k}} + N_{\mathbf{k}}(\{A\}) + F_{\mathbf{k}}, \quad (8.141)$$

где L — линейный оператор, фигурирующий в правой части (8.131), а $N_{\mathbf{k}}$ включает в себя все нелинейные члены этого уравнения.

8.13. Уравнение Фоккера — Планка и его стационарное решение

Теперь мы можем просто записать соответствующее уравнение Фоккера — Планка. Оно имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} = & - \iint dx dy \sum_{\mathbf{k}} \frac{\delta}{\delta A_{\mathbf{k}}(x, y)} \{(\tilde{L} A_{\mathbf{k}}(x, y) + N_{\mathbf{k}}(\{A(x, y)\})) f + \\ & + \text{Компл. сопр.}\} + Q \iint dx dy \sum_{\mathbf{k}} \frac{\delta^2}{\delta A_{\mathbf{k}}(x, y) \delta A_{\mathbf{k}}^*(x, y)} f. \end{aligned} \quad (8.142)$$

Ищем его решение в виде

$$f = \mathcal{N} \exp \Phi. \quad (8.143)$$

Несколько обобщая (6.116), получаем следующее явное решение:

$$\Phi = \frac{2}{Q} \iint \left\{ \sum_k \gamma A_k^* \left(\frac{\partial}{\partial x_{ik}} - \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \frac{\partial^2}{\partial y_{ik}^2} \right)^2 A_k + \right. \\ \left. + \sum_k \alpha |A_k|^2 - \frac{1}{3} \sum_{k, k', k''} (\delta A_k^* A_{k'}^* A_{k''}^* \delta_{k+k'+k'', 0} + \text{Компл. сопр.}) - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \sum_{k, k'} \beta_{kk'} |A_k|^2 |A_{k'}|^2 \right\} dx dy. \quad (8.144)$$

Рассмотрение (8.144) в общем виде выходит за рамки наших целей. Мы лишь хотим показать, как выражения (8.143) и (8.144) позволяют описать пороговую область и устойчивость различных модовых конфигураций. Будем пренебрегать зависимостью медленно меняющихся амплитуд A_k от x, y . Положим сначала $\delta = 0$. Формулы (8.143) и (8.144) позволяют исследовать устойчивость различных конфигураций мод. Поскольку Φ зависит лишь от модуля A_k ,

$$\Phi = \Phi(|A_k|^2), \quad (8.145)$$

введем новую переменную

$$|A_k|^2 = w_k. \quad (8.146)$$

Значения w_k , при которых Φ имеют экстремум, определяются из условия

$$\frac{\partial \Phi}{\partial w_k} = 0 \quad \text{или} \quad \alpha - \sum_{k'} \beta_{kk'} w_{k'} = 0. \quad (8.147)$$

Знак второй производной указывает на то, что все экстремумы представляют собой минимум

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial w_k \partial w_{k'}} = -\beta_{kk'} < 0. \quad (8.148)$$

По соображениям симметрии можно ожидать, что

$$w_k = w/N. \quad (8.149)$$

Теперь из (8.147) получаем

$$\Phi(w) = \frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{\beta}, \quad (8.150)$$

где использовано обозначение

$$\frac{1}{N^2} \sum_{k, k'} \beta_{kk'} = \bar{\beta}.$$

Сравним решение, в котором фигурируют все моды, с одно-модовым решением, для которого выполняется условие

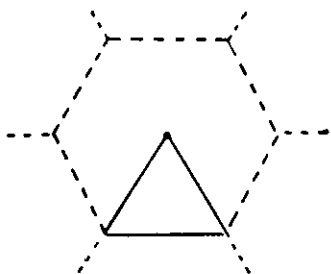
$$\alpha - \beta_{\mathbf{k}\mathbf{k}}\omega = 0, \quad (8.151)$$

так что

$$\Phi(\omega) = \frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{\beta}. \quad (8.152)$$

При сравнении (8.150) с (8.152) оказывается, что одномодовая конфигурация более вероятна, чем многомодовая. Наш анализ можно обобщить на случай других конфигураций мод, что снова приводит к выводу об устойчивости лишь одномодовой конфигурации.

Используя (8.121) — (8.125), рассмотрим вид поля скоростей такой одномодовой конфигурации. Направив \mathbf{k} вдоль оси x , сразу же находим, что z -компонента поля скоростей u_z не зависит от y и имеет вид синусоидальной волны. Таким образом, в качестве устойчивых конфигураций мы получаем цилиндры.



Фиг. 8.5. Образование шестиугольника из элементарных треугольников (детали см. в тексте).

Перейдем теперь к вопросу о том, как объяснить еще более впечатляющие гексагональные конфигурации. Для этого в (8.144) включим в рассмотрение кубические члены, которые возникают из-за пространственной неоднородности в z -направлении, т. е. из членов, дополнительных к приближению Буссинеска. Возьмем для сравнения только три моды с амплитудами A_i , A_i^* , $i = 1, 2, 3$, и запишем потенциальную функцию в виде

$$\Phi = \alpha(|A_1|^2 + |A_2|^2 + |A_3|^2) - \delta(A_1^*A_2^*A_3^* + \text{Компл. сопр.}) - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \beta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} |A_{\mathbf{k}}|^2 |A_{\mathbf{k}'}|^2, \quad (8.153)$$

где суммы по \mathbf{k} вычисляются по треугольнику, как показано на фиг. 8.5. Он возникает из условия $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = 0$ и $|k_i| = \text{const}$ [ср. (8.127)]. Для нахождения экстремумов Φ берем производные от (8.153) по A_i , A_i^* и получаем шесть уравнений. Их решение имеет вид

$$A_i^* = A_i; \quad A_1 = A_2 = A_3 = A. \quad (8.154a)$$

Используя (8.154a) вместе с (8.121) — (8.125), мы получаем, например, $u_z(\mathbf{x})$. Сосредоточивая внимание на зависимости этой

функции от x , y и используя фиг. 8.5, находим (положив $x' = \pi/\sqrt{2} x$)

$$u_z(\mathbf{x}) \sim A \{e^{ix'} + e^{-ix'} + e^{i(-x'/2 + y'\sqrt{3}/2 + \dots)}\}, \quad (8.1546)$$

или, в более компактном виде,

$$u_z(x) \sim 2A \left\{ \cos x' + \cos \left(\frac{x'}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} y' \right) + \cos \left(\frac{x'}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} y' \right) \right\}.$$

Рассматривая сплошные линии на фиг. 8.5 как вспомогательные, легко убедиться в том, что шестиугольник на этом рисунке — элементарная ячейка $u_z(\mathbf{x})$ (8.1546). Сравним вероятность такой гексагональной конфигурации с цилиндрической. Для этого вычислим (8.153) с помощью (8.154а), используя явное выражение для A , что дает

$$\Phi_{\text{макс}}(A) = \hat{\beta} \left\{ \frac{3}{2} \hat{\alpha}^2 + \frac{1}{2} \hat{\delta}^2 \hat{\alpha} - A_{\text{макс}} \left(2\hat{\alpha}\hat{\delta} - \frac{1}{2} \hat{\delta}^3 \right) \right\}. \quad (8.155)$$

Здесь использованы обозначения

$$\frac{1}{3} \hat{\beta} = \bar{\beta}, \quad \sum_k \beta_{k1} = \hat{\beta}, \quad (8.156)$$

$$\hat{\alpha} = \frac{\bar{\alpha}}{\bar{\beta}}, \quad (8.157)$$

$$\hat{\delta} = \frac{\bar{\delta}}{\bar{\beta}}. \quad (8.158)$$

Рассмотрим (8.155) в двух предельных случаях.

$$1) \hat{\delta}^2 \gg \hat{\alpha}. \quad (8.159)$$

В этом случае получаем

$$\Phi_{\text{макс}}(A) \approx \frac{1}{2} \hat{\beta} \hat{\delta}^3 A_{\text{макс}}. \quad (8.160)$$

$$2) \hat{\delta}^2 \ll \hat{\alpha}. \quad (8.161)$$

В этом случае

$$\Phi_{\text{макс}}(A) = \frac{\hat{\alpha}^2}{2\hat{\beta}}. \quad (8.162)$$

Сравнение (8.160) или (8.162) соответственно с одномоновым потенциалом (8.152) выявляет следующее: для чисел Рэлея $R > R_c$, лишь незначительно превосходящих R_c , гексагональная конфигурация более вероятна, чем цилиндрическая, но при дальнейшем увеличении числа Рэлея одномодовая конфигурация (цилиндры) становится более вероятной.

В заключение обсудим наши результаты, используя аналогию с фазовым переходом, рассмотренную в разд. 6.7 и 6.8. При $\delta = 0$ рассматриваемая система проявляет все черты неравновесного фазового перехода второго рода (нарушение симмет-

рии, мягкие моды, критические флуктуации и т. д.). В полной аналогии со случаем лазера симметрия может быть нарушена действием внешнего сигнала. Это достигается созданием периодически изменяющегося в пространстве распределения температуры, налагаемого на постоянное распределение у нижней границы жидкости.

Таким способом можно задать значение фазы (т. е. положения цилиндров) и до некоторой степени диаметр цилиндров (т. е. длину волны). При $\delta \neq 0$ мы получаем переход первого рода с гистерезисом.

8.14. Модель статистической динамики неустойчивости Ганна вблизи порога¹

Эффект Ганна, или неустойчивость Ганна, имеет место в полупроводниках с двумя зонами проводимости, для которых положения энергетических минимумов не совпадают друг с другом. Пусть нижняя зона проводимости получает электроны от доноров. Когда электроны ускоряются приложенным электрическим полем, их скорость растет и, таким образом, с увеличением поля растет ток. С другой стороны, электроны замедляются благодаря рассеянию на колебаниях решетки (или дефектах). В результате поддерживается отличное от нуля среднее значение скорости v . При малых полях E v увеличивается с ростом E . Однако по достижении достаточно

высоких скоростей электроны могут туннелировать в более высокую зону проводимости, где они снова ускоряются. Если эффективная масса в верхней зоне проводимости больше, чем в нижней, ускорение электронов в верхней зоне меньше, чем в нижней зоне. Конечно, в обоих случаях электроны замедляются благодаря столкновениям с колебаниями решетки. Эффективная средняя скорость электронов в верхней зоне проводимости оказывается меньше, чем в нижней зоне. Поскольку по мере роста напряженности поля все большее число электронов попадает в верхнюю зону проводимости, средняя скорость электронов всего образца уменьшается. Поэтому зависимость средней скорости $v(E)$ от напря-



Фиг. 8.6. Средняя скорость электронов как функция напряженности электрического поля.

¹ Читатели, не знакомые с основными свойствами полупроводников, могут тем не менее прочитать эту главу, начиная с (8.163)—(8.165). Она дает пример того, как можно получить пульсирующие режимы как решения нелинейных уравнений определенных типов.

женности электрического поля получается такой, как показано на фиг. 8.6. Умножая v на концентрацию электронов n_0 , получаем плотность тока. До сих пор речь шла об элементарном эффекте, который не имеет ничего (или очень мало) общего с кооперативным эффектом. Теперь мы должны принять во внимание то, что электроны сами создают электрическое поле, так что вступает в игру механизм обратной связи. Мы хотим показать, что получающиеся при этом уравнения сильно напоминают уравнения лазера и, в частности, с их помощью можно легко объяснить возникновение импульсов тока.

Рассмотрим основные уравнения. Во-первых, это уравнение, описывающее сохранение числа электронов. Обозначая плотность электронов в точке x в момент времени t через n , а электронный ток, поделенный на заряд электрона e , через J , запишем уравнение непрерывности

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0. \quad (8.163)$$

Ток J обусловлен двумя вкладками. С одной стороны, имеется потоковое движение электронов $nv(E)$, с другой — на это движение налагается диффузия с коэффициентом диффузии D . Поэтому запишем «ток» в виде

$$J = nv(E) - D \frac{\partial n}{\partial x}. \quad (8.164)$$

Источники электрического поля — заряды. Обозначая концентрацию доноров через n_0 , записываем в соответствии с электростатикой уравнение для E

$$\frac{dE}{dx} = e'(n - n_0), \quad (8.165)$$

где введено обозначение

$$e' = \frac{4\pi e}{\epsilon_0};$$

ϵ_0 — статическое значение диэлектрической проницаемости. Исключим величины n и J из вышеприведенных уравнений и получим замкнутое уравнение для E . Для этого выразим в (8.163) n посредством (8.165) и J посредством (8.164), что дает

$$\frac{1}{e'} \frac{\partial^2 E}{\partial t \partial x} + \frac{d}{dx} \left(nv(E) - D \frac{dn}{dx} \right) = 0. \quad (8.166)$$

Исключая снова n в (8.166) с помощью (8.165) и преобразуя полученное уравнение, получаем

$$\frac{1}{e'} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial E}{\partial t} + e'n_0v(E) + v(E) \frac{dE}{dx} - D \frac{d^2 E}{dx^2} \right) = 0. \quad (8.167)$$

Это уравнение можно сразу же проинтегрировать по координате. Постоянная интегрирования, которую мы обозначим через

$$\frac{1}{e} I(t), \quad (8.167a)$$

может быть функцией времени. После интегрирования и некоторых преобразований приходим к основному уравнению

$$\frac{\partial E}{\partial t} = e' n_0 v(E) - v(E) \frac{dE}{dx} + D \frac{d^2 E}{dx^2} + \frac{4\pi}{e_0} I(t). \quad (8.168)$$

Функция $I(t)$, имеющая смысл плотности тока, определяется из условия, что приложенный извне потенциал

$$U = \int_0^L dx E(x, t) \quad (8.169)$$

должен быть постоянным вдоль всего образца. Задача теперь заключается в решении (8.168). Для вычислений требуется знать явный вид функции $v(E)$. Мы зададим ее, как это часто делается, в виде

$$v(E) = \frac{\mu_1 E (1 + BE/E_0)}{1 + (E/E_0)^2}, \quad (8.170)$$

где μ_1 — подвижность электронов нижней зоны, B — отношение подвижностей в верхней и нижней зонах. Чтобы решить (8.168), разложим E в ряд Фурье:

$$E(x, t) = E_0 + \sum_{m \neq 0} E_m(t) e^{imk_0 x}. \quad (8.171)$$

Суммирование проводится по всем положительным и отрицательным целым числам, а волновое число k_0 равно

$$k_0 = \frac{2\pi}{L}. \quad (8.172)$$

Разлагая $v(E)$ в ряд по степеням E и сравнивая затем коэффициенты при одних и тех же экспонентах в (8.168), получаем систему уравнений

$$\partial E_m / \partial t = (\alpha_m - i\omega_m) E_m - \sum_{m_1 + \dots + m_s = m} \frac{1}{s!} A_{s, m_1} E_{m_1} E_{m_2} \dots E_{m_s}. \quad (8.173)$$

Члены в правой части (8.173) имеют следующий смысл:

$$\alpha_m = \omega_R - Dk_0^2 m^2, \quad (8.174)$$

где

$$\omega_R = e' n_0 v_0^{(1)}, \quad (8.175)$$

$v_0^{(1)}$ — дифференциальная подвижность, а ω_R — отрицательная частота диэлектрической релаксации. ω_m определяется выражением

$$\omega_m = mk_0 v(E_0). \quad (8.176)$$

Коэффициенты A равны

$$A_{s, m} = e' n_0 v_0^{(s)} + imsk_0 v_0^{(s-1)}, \quad (8.177)$$

где производные от v определяются как

$$v_0^{(s)} = d^s v(E)/dE^s |_{E=E_0}. \quad (8.178)$$

Подстановка (8.171) в условие (8.169) определяет E_0 :

$$E_0 = U/L. \quad (8.179)$$

Теперь наша задача состоит в обсуждении и по крайней мере приближенном решении основного уравнения (8.173). Пренебрегая сначала нелинейными членами, проведем линейный анализ устойчивости. Мы видим, что мода E_m становится неустойчивой, если $\alpha_m > 0$. Это может иметь место, если $v_0^{(1)}$ отрицательно. Чтобы убедиться в том, что такая ситуация действительно реализуется, достаточно взглянуть на фиг. 8.6. Рассмотрим ситуацию, когда только одна мода $m = \pm 1$ становится неустойчивой, а другие моды по-прежнему остаются устойчивыми. Для демонстрации основных черт ограничимся анализом случая только двух мод с $m = \pm 1, \pm 2$ и предположим, что

$$E_m = c_m e^{-i\omega_m t}. \quad (8.180)$$

Теперь уравнения (8.173) сводятся к уравнениям

$$\partial c_1 / \partial t = \alpha c_1 + V c_2 c_1^* - \frac{W}{2} |c_1|^2 c_1 - W |c_2|^2 c_1 \quad (8.181)$$

и

$$\partial c_2 / \partial t = -\beta c_2 + \frac{V}{2} c_1^2 - W |c_1|^2 c_2 - \frac{W}{2} |c_2|^2 c_2; \quad (8.182)$$

здесь использованы обозначения

$$\alpha \equiv \alpha_1 > 0, \quad \alpha_2 \equiv -\beta < 0, \quad (8.183)$$

$$V = 2V_k^{(3)} = 2 \left\{ -\frac{1}{2} e' n_0 v_0^{(2)} + imk_0 v_0^{(1)} \right\}, \quad (8.184)$$

$$V \approx -e' n_0 v_0^{(2)}, \quad (8.185)$$

$$W = -6V_k^{(4)} \approx e' n_0 v_0^{(3)}. \quad (8.186)$$

В реальных случаях вторым членом в (8.184) можно пренебречь по сравнению с первым, так что (8.184) сводится к (8.185).

В формуле (8.186) сделано аналогичное приближение. Теперь можно применить процедуру адиабатического исключения, описанную в разд. 7.1 и 7.2. Положив

$$\partial c_2 / \partial t = 0, \quad (8.187)$$

получаем из (8.182)

$$c_2 = \frac{V}{2} \frac{c_1^2}{\beta + W |c_1|^2}. \quad (8.188)$$

После подстановки c_2 в (8.181) получаем уравнение в окончательном виде

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = \left\{ \alpha + \frac{V^2}{2} \frac{|c_1|^2}{\beta + W |c_1|^2} - \frac{W}{2} |c_1|^2 - \frac{WV^2}{4} \frac{|c_1|^4}{(\beta + W |c_1|^2)^2} \right\} c_1. \quad (8.189)$$

Правую часть (8.189) легко представить в виде (взятой со знаком минус) производной от потенциала Φ , так что (8.189) можно записать так:

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = - \frac{\partial \Phi}{\partial c_1^*}.$$

Используя обозначение $I = |c_1|^2$, запишем Φ в виде

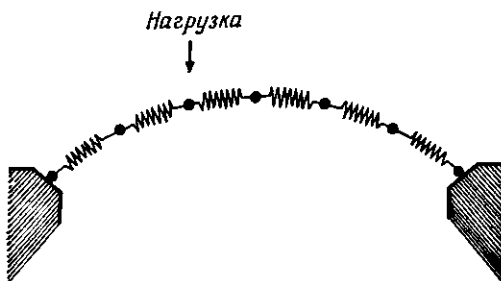
$$\Phi = \frac{W}{4} I^2 - \left(\alpha + \frac{V^2}{4W} \right) I - \frac{\beta^2 V^2 / 4W^2}{\beta + WI}. \quad (8.190)$$

При изменении параметра α мы получаем семейство потенциальных кривых $\Phi(I)$, подобных кривым, изображенным на фиг. 8.3. Добавив флуктуирующую силу в (8.189), мы можем учесть флуктуации. Тогда с помощью стандартных методов можно вывести уравнение Фоккера — Планка, соответствующее (8.189), и найти устойчивые и неустойчивые точки. Читателю предоставляется самому убедиться в том, что здесь мы снова имеем фазовый переход первого рода с гистерезисом и с разрывным скачкообразным переходом из одного равновесного положения в другое. Поскольку c_1 и c_2 связаны с осциллирующими членами [ср. (8.171) и (8.180)], напряженность электрического поля осциллирует без затухания, что и наблюдается в эффекте Ганна.

8.15. Устойчивость упругих конструкций: некоторые основные идеи

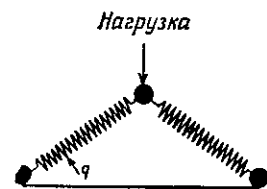
Проведенное в разд. 5.1 и 5.3 общее рассмотрение устойчивости и неустойчивости систем, описываемых потенциальной функцией, можно непосредственно использовать и в теории

устойчивости упругих конструкций. Возьмем в качестве примера мост. Модель моста можно представить как набор соединенных между собой упругих элементов (фиг. 8.7). Нас интересует деформация такой конструкции, в особенности ее разрушение под действием нагрузки. Чтобы показать, как связаны эти во-



Фиг. 8.7. Модель моста.

просы с анализом, проведенным в разд. 5.1 и 5.3, возьмем простую арку (фиг. 8.8). Она состоит из двух линейных пружин с жесткостью k , соединенных друг с другом и с жестким основанием.



Фиг. 8.8. Модель простой арки.

система имела лишь одну степень свободы, описываемую одной переменной q . Привлекая элементарные геометрические соображения, можно показать, что энергия деформации двух пружин равна

$$U(q) = 2 \frac{1}{2} k \left(\frac{R}{\cos \alpha} - \frac{R}{\cos q} \right)^2. \quad (8.191)$$

Поскольку наш анализ ограничен рассмотрением малых углов q , можно разложить косинус в ряд, что дает

$$U(q) = \frac{1}{4} k R^2 (\alpha^4 - 2\alpha^2 q^2 + q^4). \quad (8.192)$$

Смещение груза в вертикальном направлении равно

$$\mathcal{E}(q) = R(\operatorname{tg} \alpha - \operatorname{tg} q). \quad (8.193)$$

Аппроксимируя $\operatorname{tg} x$ посредством x ($x = \alpha$ или q), запишем \mathcal{E} в виде

$$\mathcal{E}(q) = R(\alpha - q). \quad (8.194)$$

Потенциальная энергия груза равна взятому со знаком минус весу груза, умноженному на смещение, т. е.

$$-P\mathcal{E}(q). \quad (8.195)$$

Потенциал всей системы, состоящей из пружин и груза, равен сумме потенциалов (8.192) и (8.195)

$$V(q) = U - P\mathcal{E}, \quad (8.196)$$

т. е.

$$V = \frac{1}{4} kR^2 (\alpha^4 - 2\alpha^2 q^2 + q^4) - PR(\alpha - q). \quad (8.197)$$

Таким образом, поведение системы описывается простым потенциалом. Равновесному состоянию соответствует минимум потенциала

$$\frac{\partial V}{\partial q} = kR^2 (-\alpha^2 q + q^3) + PR = 0. \quad (8.198)$$

Это уравнение определяет экстремальное значение координаты q как функцию P

$$q = q(P). \quad (8.199)$$

В инженерной механике часто определяют нагрузку как функцию смещения; эта зависимость также может быть получена из (8.198):

$$P = P(q). \quad (8.200)$$

Знак второй производной

$$\frac{\partial^2 V}{\partial q^2} = kR^2 (3q^2 - \alpha^2) \quad (8.201)$$

говорит о том, максимум или минимум имеет потенциал. Отметим, что (8.199) надо подставить в (8.201). При критическом значении нагрузки (8.201) меняет знак с положительного на отрицательный, и система разрушается. Читателю предлагается в качестве упражнения следующая задача: рассмотреть потенциал (8.197) как функцию параметра P и показать, что при критическом значении P система внезапно переходит из одного устойчивого состояния в другое устойчивое состояние. *Указание:* потенциальные кривые имеют вид фиг. 6.7, т. е. происходит фазовый переход первого рода.

В инженерной механике переходы второго рода также легко моделировать консолью на шарнире. Рассмотрим жесткий стер-

жень длины l , упирающийся острием в твердое основание и поддерживаемый пружиной с жесткостью k (фиг. 8.9). Нагрузка действует в вертикальном направлении. Введем в качестве координаты угол q между отклоненным стержнем и вертикалью.

Потенциальная энергия пружины

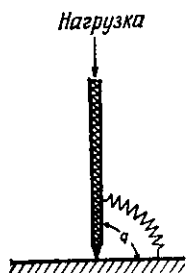
$$U = \frac{1}{2} kq^2. \quad (8.202)$$

Смещение груза равно

$$\mathcal{E} = L(1 - \cos q). \quad (8.203)$$

Так же, как и раньше, записываем полную энергию

$$V = U - P\mathcal{E} = \frac{1}{2} kq^2 - PL(1 - \cos q). \quad (8.204)$$



Фиг. 8.9. Консоль на шарнире.

После разложения косинуса по малому q до членов четвертого порядка, получаем потенциальные кривые, изображенные на

фиг. 6.6. Мы оставляем читателю рассмотрение получающихся неустойчивостей, которые соответствуют фазовому переходу второго рода. Отметим, что такая локальная неустойчивость имеет место, если $PL > k$. Этот пример может служить примером развертки, введенной в разд. 5.5. На практике равновесное положение пружины может слегка отличаться от положения, показанного на фиг. 8.9. Обозначая равновесное значение угла в отсутствие нагрузки через ε , запишем потенциальную энергию пружины в виде

$$U(q, \varepsilon) = \frac{1}{2} k(q - \varepsilon)^2, \quad (8.205)$$

и, таким образом, полная потенциальная энергия равна

$$V = \frac{1}{2} k(q - \varepsilon)^2 - PL(1 - \cos q). \quad (8.206)$$

Снова, разлагая косинус до членов четвертого порядка, получаем, что потенциал

$$V \approx \frac{1}{2} k(q - \varepsilon)^2 - PLq^2/2 + PL \frac{1}{24} q^4 \quad (8.207)$$

имеет вид (5.133), включая теперь и линейный член, с которым мы имели дело при обсуждении разверток. Соответственно симметрия, присущая (8.204), теперь оказывается нарушенной, что отображается на потенциальных кривых фиг. 5.20, вид которых зависит от знака ε . Мы оставляем читателю в виде упражнения задачу определения равновесных положений, устойчивых и неустойчивых состояний как функций нагрузки.

Замечания относительно общего случая

Теперь мы можем определить общую проблему устойчивости упругих механических конструкций следующим образом. Каждая статическая механическая система описывается определенным набором обобщенных координат q_1, \dots, q_n , в число которых могут входить, например, углы. В более сложных случаях используются также непрерывно распределенные координаты, например для описания деформаций упругих оболочек, используемых в охлаждающих установках. Задача тогда состоит в отыскании минимума потенциальной энергии как функции одной или нескольких внешних нагрузок. Особую важность представляет изучение неустойчивых точек, в которых, как мы неоднократно видели ранее, проявляется критическое поведение. Один минимум, например, может разделиться на два минимума (бифуркация) или может быть достигнута предельная точка, в которой система полностью теряет свою устойчивость. Следует отметить одно следствие из общего рассмотрения, проведенного в разд. 5.5, важное для характеристики неустойчивых точек. Оказывается, что достаточно рассматривать лишь такие степени свободы, у которых коэффициенты диагональной квадратичной формы обращаются в нуль. Координаты новых минимумов могут описывать совершенно другие механические конструкции. В качестве примера упомянем результат, полученный для тонких оболочек. Когда достигается точка бифуркации, оболочки деформируются так, что возникают гексагональные структуры. Их возникновение — типичный пример явления, возникающего после продольного изгиба. Точно такие же структуры наблюдаются, например, в гидродинамике (ср. разд. 8.13).

Химические и биохимические системы

9.1. Химические и биохимические реакции

По существу можно различать два типа химических процессов.

1) В определенный момент времени соединяются несколько различных химических веществ. Затем мы изучаем процессы, которые при этом происходят. В обычной термодинамике сравнивают исходные реагенты и конечные продукты и исследуют, в каком направлении идет процесс. Эти вопросы мы не будем рассматривать в данной книге. Мы рассмотрим следующую ситуацию, которая может служить моделью в случае биохимических реагентов.

2) Несколько реагентов непрерывно подводятся к реактору, где непрерывно производятся новые химические вещества. Продукты реакции постоянно удаляются, так что устанавливается стационарное состояние. Такие процессы могут происходить только в условиях, далеких от теплового равновесия. При этом возникает ряд интересных вопросов, имеющих отношение к теориям образования структур в биологических системах и теории эволюции. Мы хотим подробнее рассмотреть следующие вопросы.

Во-первых, при каких условиях можно получить определенные продукты в больших, точно контролируемых концентрациях?

Во-вторых, могут ли химические реакции образовывать пространственные и пространственно-временные структуры?

Для ответа на эти вопросы мы исследуем следующие проблемы:

- а) детерминистские уравнения реакций без диффузии,
- б) детерминистские уравнения реакций с учетом диффузии,
- в) те же проблемы, рассматриваемые со стохастической точки зрения.

9.2. Детерминированные процессы без диффузии.

Случай одной переменной

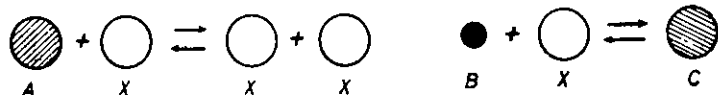
Рассмотрим модель химической реакции, в которой молекула сорта A вступает в реакцию с молекулой сорта X , в результате чего возникает добавочная молекула X . Поскольку моле-

кула X производится при участии молекул того же сорта X в качестве катализатора, этот процесс называется «автокаталитической реакцией».

Рассматривая также и обратный процесс, мы получаем следующую схему (фиг. 9.1):



Соответствующие константы скорости реакции обозначаются



Фиг. 9.1. (Ср. текст.)

Фиг. 9.2. (Ср. текст.)

через k_1 и k'_1 . Пусть теперь молекула X при взаимодействии с молекулой B превращается в молекулу C (фиг. 9.2)



Снова возможен и обратный процесс. Константы скорости реакции обозначаются через k_2 и k'_2 . Обозначим концентрации молекул различных типов A , X , B , C следующим образом:

$$\begin{array}{ll} A & a \\ X & n \\ B & b \\ C & c \end{array} \quad (9.3)$$

Допустим, что концентрации молекул A , B и C и константы скорости реакции k_1 , k'_1 поддерживаются постоянными. Мы хотим исследовать эволюцию во времени и стационарное состояние концентрации n . Чтобы вывести соответствующие уравнения для n , найдем скорость образования молекул с концентрацией n . Сделаем это на конкретном примере. Другие случаи могут быть рассмотрены аналогичным образом.

Рассмотрим процесс (9.1) в направлении слева направо. Число молекул X , производимых за одну секунду, пропорционально концентрации a молекул сорта A и концентрации n молекул сорта X . Коэффициент пропорциональности равен как раз константе скорости реакции k_1 . Таким образом, соответствующая скорость образования равна $a \cdot n \cdot k_1$. Рассмотрим

все возможные процессы 1 и 2, протекающие в направлениях, указанных стрелками:

$$\left. \begin{array}{l} 1 \rightarrow a \cdot n \cdot k_1 \\ 1 \leftarrow -n \cdot n \cdot k'_1 \end{array} \right\} r_1 = k_1 a n - k'_1 n^2, \\ \left. \begin{array}{l} 2 \rightarrow -b \cdot n \cdot k_2 \\ 2 \leftarrow c \cdot k'_2 \end{array} \right\} r_2 = -k_2 b n + k'_2 c. \quad (9.4)$$

Знак минус указывает на уменьшение концентрации n . Объединяя два подпроцесса каждого из процессов 1 и 2 вместе, найдем соответствующие скорости r_1 и r_2 , как это показано в (9.4). Полное изменение n во времени $dn/dt \equiv \dot{n}$ равна сумме r_1 и r_2 , так что наше основное уравнение имеет вид

$$\dot{n} = r_1 + r_2. \quad (9.5)$$

Поскольку в (9.4) фигурирует довольно большое число постоянных a, \dots, k_1, \dots , удобно перейти к новым переменным. Изменяя соответствующим образом единицы измерения времени и концентрации, можно записать

$$k'_1 = 1, \quad k_1 a = 1. \quad (9.6)$$

Вводя далее обозначения

$$k_2 b = \beta, \quad k'_2 c = \gamma, \quad (9.7)$$

можно привести (9.5) к виду

$$\dot{n} = (1 - \beta)n - n^2 + \gamma \equiv \varphi(n). \quad (9.8)$$

Если $\gamma = 0$, (9.8) совпадает с уравнением лазера [ср. (5.84)]. Рассмотрим сначала стационарное состояние $\dot{n} = 0$ при $\gamma = 0$. Для него получаем

$$n = \begin{cases} 0 & \text{для } \beta > 1, \\ 1 - \beta & \text{для } \beta < 1, \end{cases} \quad (9.9)$$

т. е. при $\beta > 1$ молекулы сорта X отсутствуют, а при $\beta < 1$ поддерживается постоянная концентрация n . Этот переход из состояния «нет молекул» в состояние «есть молекулы сорта X » при изменении β очень напоминает фазовый переход (см. разд. 6.7). Мы покажем это, проведя аналогию с уравнением ферромагнетика, записав (9.8) при $\dot{n} = 0$ в виде

$$\gamma = n^2 - (1 - \beta)n. \quad (9.10)$$

Аналогия легко устанавливается с помощью следующего соответствия:

$$\begin{aligned} M &\leftrightarrow n, \\ H &\leftrightarrow \gamma, \\ T/T_c &\leftrightarrow \beta, \\ H &= M^2 - \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) M, \end{aligned} \quad (9.11)$$

где M — намагниченность, H — магнитное поле, T — абсолютная температура, T_c — критическая температура.

При изучении временной эволюции и равновесных состояний удобно ввести потенциал (ср. разд. 5.1). Тогда уравнение (9.8) принимает вид

$$\dot{n} = -\frac{\partial V}{\partial n}, \quad (9.12)$$

где

$$V(n) = \frac{n^3}{3} - (1 - \beta) \frac{n^2}{2} - \gamma n. \quad (9.13)$$

В этой книге мы уже несколько раз встречались с потенциалом такого вида и поэтому оставляем читателю в качестве упражнения задачу нахождения равновесных положений. Переходя к изучению временной эволюции n , рассмотрим сначала случай а) $\gamma = 0$.

Задача сводится к решению уравнения

$$\dot{n} = -(\beta - 1)n - n^2 \quad (9.14)$$

с начальными условиями

$$t = 0; \quad n = n_0. \quad (9.15)$$

В случае $\beta = 1$ решение имеет вид

$$n = n_0 (1 + tn_0)^{-1}, \quad (9.16)$$

т. е. n асимптотически приближается к нулю. Пусть теперь $\beta \neq 1$. Решение (9.14) с учетом (9.15) дает

$$n = \frac{1 - \beta}{2} - \frac{\lambda}{2} \frac{c \exp(-\lambda t) - 1}{c \exp(-\lambda t) + 1}. \quad (9.17)$$

Здесь использованы обозначения

$$\lambda = |1 - \beta|, \quad (9.18)$$

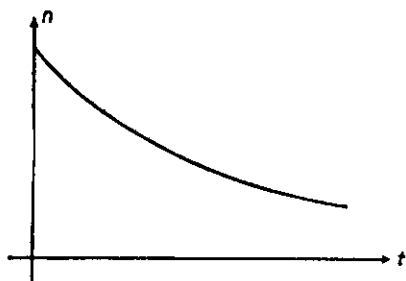
$$c = \frac{|1 - \beta| + (1 - \beta) - 2n_0}{|1 - \beta| + (1 - \beta) + 2n_0}. \quad (9.19)$$

В частности, находим, что при $t \rightarrow \infty$ решение (9.17) стремится к следующим равновесным значениям:

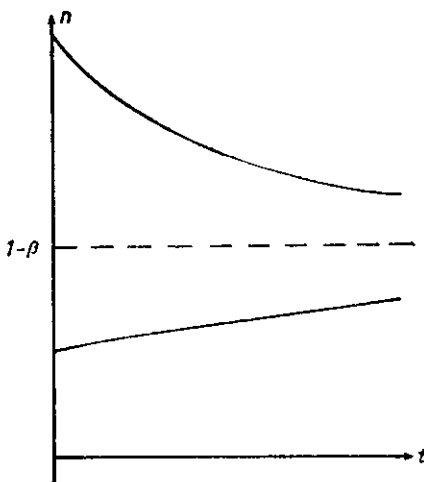
$$n_{\infty} = \begin{cases} 0 & \text{для } \beta > 1, \\ (1 - \beta) & \text{для } \beta < 1. \end{cases} \quad (9.20)$$

Временная эволюция n для случаев $\beta > 1$ и $\beta < 1$ представлена на фиг. 9.3 и 9.4.

б) $\gamma \neq 0$.



Фиг. 9.3. Решение (9.17) для случая $\beta > 1$.



Фиг. 9.4. Решение (9.17) для случая $\beta < 1$ при двух различных начальных условиях.

В этом случае решение имеет вид

$$n(t) = \frac{(1 - \beta)}{2} - \frac{\lambda}{2} \frac{c \exp(-\lambda t) - 1}{c \exp(-\lambda t) + 1}, \quad (9.21)$$

где c то же, что и в (9.19), но коэффициент λ теперь равен

$$\lambda = \sqrt{(1 - \beta)^2 + 4\gamma}. \quad (9.22)$$

Очевидно, что n монотонно стремится к равновесному значению и осцилляции отсутствуют.

В качестве второй модели подобного типа рассмотрим схему реакции



Уравнение (9.23) соответствует процессу, в котором участвуют три молекулы. Обычно предполагается, что такие процессы происходят очень редко и практически имеют место только бимолекулярные процессы. Можно, однако, получить трехмолекулярный процесс из последовательных бимолекулярных процессов $A + X \rightarrow Y$, $Y + X \rightarrow 3X$, если промежуточный этап происходит очень быстро и концентрацию промежуточного продукта можно (математически) исключить в адиабатическом приближении (см. разд. 7.1). Уравнения равновесия (9.23), (9.24) дают

$$\dot{n} = -n^3 + 3n^2 - \beta n + \gamma \equiv \varphi(n), \quad (9.25)$$

где введен соответствующий масштаб времени и концентрации. Уравнения такого типа ($\dot{n} \equiv \dot{q}$) нам уже не раз встречались (ср. разд. 5.5). Его лучше всего рассматривать, вводя потенциал. Тогда легко найти, что здесь может быть либо одно устойчивое значение, либо два устойчивых и одно неустойчивое значения. Уравнение (9.25) описывает фазовый переход первого рода (см. разд. 6.7). Эта аналогия еще более явно проступает при сравнении стационарного уравнения (9.25) ($\dot{n} = 0$) с уравнением Ван-дер-Ваальса для газа. Уравнение Ван-дер-Ваальса для реального газа имеет вид

$$p = \frac{RT}{v} - \frac{a_1}{v^2} + \frac{a_2}{v^3}. \quad (9.26)$$

Аналогия устанавливается с помощью таблицы соответствия

$$\begin{aligned} n &\leftrightarrow 1/v, & v &\text{— объем,} \\ \gamma &\leftrightarrow \text{давление } p, \\ \beta &\leftrightarrow RT \end{aligned} \quad (9.27)$$

(R — газовая постоянная; T — абсолютная температура): Читателю, который знаком с уравнением Ван-дер-Ваальса, предлагается, используя эту аналогию, рассмотреть типы фазовых переходов, которые может испытывать концентрация молекул n .

9.3. Реакция и уравнения диффузии

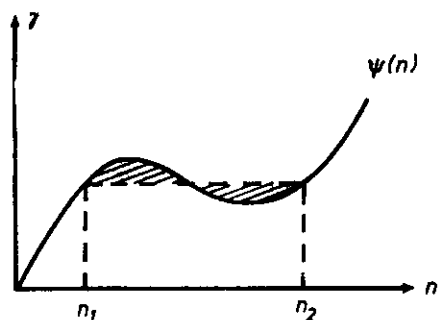
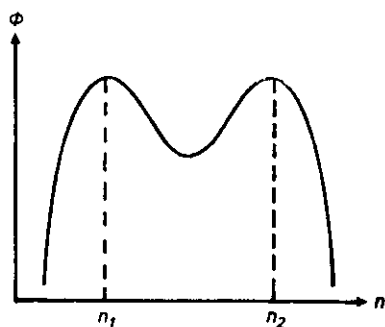
Рассмотрим сначала в качестве переменной лишь одну концентрацию, которая теперь может изменяться в пространстве благодаря диффузии. С уравнением диффузии мы уже встречались в разд. 4.1 и 4.3. Изменение концентрации во времени \dot{n} теперь определяется реакциями, которые описываются, например, правой частью (9.8), и, кроме того, диффузионным членом (рассматривается одномерная модель):

$$\dot{n} = \kappa \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \varphi(n). \quad (9.28)$$

$\Phi(n)$ можно получить из потенциала V или из отрицательного по отношению к нему потенциала Φ :

$$\Phi(n) = \frac{\partial}{\partial n} \Phi(n) \left(= -\frac{\partial V}{\partial n} \right). \quad (9.29)$$

Рассмотрим стационарное состояние $\dot{n} = 0$ и выведем критерий пространственного сосуществования двух фаз, в случае когда



Фиг. 9.5. Функция $\Phi(n)$ в случае существования двух фаз n_1, n_2 при наличии плоского граничного слоя (по работе [9.11]).

Фиг. 9.6. Нахождение равновесного значения γ при помощи построения Максвелла.

изменение концентрации происходит внутри определенного слоя, так что

$$\begin{aligned} n \rightarrow n_1 & \quad z \rightarrow +\infty, \\ n \rightarrow n_2 & \quad z \rightarrow -\infty. \end{aligned} \quad (9.30)$$

Для исследования основного уравнения

$$x \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = -\frac{\partial}{\partial n} \Phi(n) \quad (9.31)$$

привлечем аналогию с осциллятором или еще более общую аналогию с частицей, находящейся в поле с потенциалом $\Phi(n)$, подразумевая, что

$$\begin{aligned} x & \leftrightarrow t \quad \text{время,} \\ \Phi & \leftrightarrow \quad \text{потенциал,} \\ n & \leftrightarrow q \quad \text{координата.} \end{aligned} \quad (9.32)$$

Отметим, что теперь совершенно формально пространственная координата x интерпретируется как время, а концентрация q как координата частицы. Потенциал Φ изображен на фиг. 9.5.

При каком условии частица имеет два положения равновесия, так чтобы находясь в одном равновесном положении в момент $t = -\infty$, она попадала в другое равновесное положение при $t \rightarrow +\infty$? Из механики ясно, что это может иметь место лишь тогда, когда величины максимумов в точках $q_1 (\equiv n_1)$ и $q_2 (\equiv n_2)$ совпадают

$$\Phi(n_1) = \Phi(n_2). \quad (9.33)$$

Переписывая (9.33) в другом виде и используя (9.29), находим условие

$$0 = \Phi(n_2) - \Phi(n_1) = \int_{n_1}^{n_2} \varphi(n) dn. \quad (9.34)$$

Возвратимся теперь к нашему конкретному примеру (9.25) и положим

$$\varphi(n) = - \underbrace{n^3 + 3n^2 - \beta n + \gamma}_{-\Psi(n)}. \quad (9.35)$$

Это позволяет записать (9.34) в виде

$$0 = \gamma(n_2 - n_1) - \int_{n_1}^{n_2} \Psi(n) dn. \quad (9.36)$$

Разрешим (9.36) относительно γ :

$$\gamma = \frac{1}{(n_2 - n_1)} \int_{n_1}^{n_2} \Psi(n) dn. \quad (9.37)$$

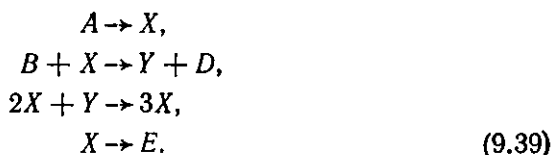
График зависимости γ от n приведен на фиг. 9.6. Очевидно, условие равновесия подразумевает, что заштрихованные площади на фиг. 9.6 равны друг другу. Это есть в точности условия Максвелла, что четко выявляется, если использовать таблицу соответствия (9.27):

$$\begin{aligned} \gamma &= \beta n - 3n^2 + n^3, \\ \updownarrow \\ p &= RT \frac{1}{v} - \frac{a_1}{v^2} + \frac{a_2}{v^3}. \end{aligned} \quad (9.38)$$

Этот пример ясно показывает плодотворность сравнения совершенно различных систем, как равновесных, так и неравновесных.

9.4. Модель реакции с диффузией в случае двух или трех переменных: брюсселятор и орегонатор

В этом разделе мы рассмотрим сначала «брюсселятор», характеризующийся следующей схемой реакций между молекулами сортов A, X, Y, B, D, E :



В уравнения химических реакций входят концентрации

$$\begin{array}{ll} A & a \\ B & b \\ X & n_1 \\ Y & n_2 \end{array} \quad (9.40)$$

Концентрации a и b рассматриваются как заданные величины, в то время как n_1 и n_2 — переменные. Используя метод, полностью аналогичный использованному в предыдущих разделах, запишем уравнения реакции с диффузией для случая одной пространственной координаты x :

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} = a - (b + 1)n_1 + n_1^2 n_2 + D_1 \frac{\partial^2 n_1}{\partial x^2}, \quad (9.41)$$

$$\frac{\partial n_2}{\partial t} = b n_1 - n_1^2 n_2 + D_2 \frac{\partial^2 n_2}{\partial x^2}, \quad (9.42)$$

где D_1 и D_2 — коэффициенты диффузии. Концентрации $n_1 = n_1(x, t)$ и $n_2 = n_2(x, t)$ подчиняются граничным условиям двух типов: либо

$$n_1(0, t) = n_1(1, t) = a, \quad (9.43a)$$

$$n_2(0, t) = n_2(1, t) = b/a, \quad (9.43b)$$

либо

$$n_i \text{ остаются конечной при } x \rightarrow \pm \infty. \quad (9.44)$$

Уравнения (9.41) и (9.42) можно, конечно, обобщить на случай двух или трех измерений. Легко убедиться, что стационарное решение (9.41), (9.42) имеет вид

$$n_1^0 = a, \quad n_2^0 = \frac{b}{a}. \quad (9.45)$$

Для проверки того, не появляются ли решения других типов, т. е. новые пространственные и временные структуры, исследуем (9.41) и (9.42) на устойчивость. Для этого положим

$$n_1 = n_1^0 + q_1, \quad n_2 = n_2^0 + q_2 \quad (9.46)$$

и линеаризуем (9.41) и (9.42) по отношению к q_1, q_2 . Линеаризованные уравнения — это

$$\frac{\partial q_1}{\partial t} = (b-1)q_1 + a^2q_2 + D_1 \frac{\partial^2 q_1}{\partial x^2}, \quad (9.47)$$

$$\frac{\partial q_2}{\partial t} = -bq_1 - a^2q_2 + D_2 \frac{\partial^2 q_2}{\partial x^2}. \quad (9.48)$$

Граничные условия (9.43а) и (9.43б) принимают вид

$$q_1(0, t) = q_1(1, t) = q_2(0, t) = q_2(1, t) = 0, \quad (9.49)$$

в то время как (9.44) сводится к требованию, чтобы при $x \rightarrow \pm\infty$ q_i оставалось конечным. Положив, как и везде в этой книге,

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix}, \quad (9.50)$$

(9.47) и (9.48) можно записать как

$$\dot{\mathbf{q}} = L\mathbf{q}, \quad (9.51)$$

где матрица L определяется следующим образом:

$$L = \begin{pmatrix} D_1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + b - 1 & a^2 \\ -b & D_2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - a^2 \end{pmatrix}. \quad (9.52)$$

Чтобы удовлетворить граничным условиям (9.49), положим

$$\mathbf{q}(x, t) = \mathbf{q}_0 \exp(\lambda_1 t) \sin l\pi x, \quad (9.53)$$

где

$$l = 1, 2, \dots$$

Подставляя (9.53) в (9.51), получаем систему однородных линейных алгебраических уравнений относительно \mathbf{q}_0 . Она имеет отличие от нуля решения лишь в том случае, когда ее детерминант обращается в нуль:

$$\begin{vmatrix} -D'_1 + b - 1 - \lambda & a^2 \\ -b & -D'_2 - a^2 - \lambda \end{vmatrix} = 0, \quad \lambda = \lambda_l. \quad (9.54)$$

Здесь использовано обозначение

$$D'_j = D_j l^2 \pi^2, \quad j = 1, 2. \quad (9.54a)$$

Чтобы (9.54) обращалось в нуль, λ должна удовлетворять характеристическому уравнению

$$\lambda^2 - \alpha\lambda + \beta = 0, \quad (9.55)$$

где

$$\alpha = (-D'_1 + b - 1 - D'_2 - a^2) \quad (9.56)$$

и

$$\beta = (-D'_1 + b - 1)(-D'_2 - a^2) + ba^2. \quad (9.57)$$

Неустойчивость имеет место, если $\text{Re } \lambda > 0$. Фиксируя значение a , но изменяя концентрацию b , найдем то значение $b = b_c$, при котором решение (9.53) становится неустойчивым. Решение (9.55) имеет вид

$$\lambda = \frac{\alpha}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\alpha^2 - 4\beta}. \quad (9.58)$$

Рассмотрим сначала случай, когда λ действительно. Для этого необходимо выполнение условия

$$\alpha^2 - 4\beta > 0, \quad (9.59)$$

а условие $\lambda > 0$ требует, чтобы

$$\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 4\beta} > 0. \quad (9.60)$$

С другой стороны, если считать, что λ комплексна, то

$$\alpha^2 - 4\beta < 0, \quad (9.61)$$

и для возникновения неустойчивости необходимо условие

$$\alpha > 0. \quad (9.62)$$

Выражения неравенств (9.59)–(9.62) через соответствующие величины a , b , D'_1 , D'_2 мы приводить не будем, а ограничимся конечным результатом. Имеются следующие области неустойчивости.

1) Неустойчивости типа мягкой моды, λ действительна, $\lambda \geq 0$:

$$(D'_1 + 1)(D'_2 + a^2)/D'_2 < b. \quad (9.63)$$

Это неравенство следует из требования $\beta < 0$, см. (9.59).

2) Неустойчивость типа жесткой моды, λ комплексна, $\text{Re } \lambda \geq 0$:

$$D'_1 + D'_2 + 1 + a^2 < b < D'_1 - D'_2 + 1 + a^2 + 2a \sqrt{1 + D'_1 - D'_2}. \quad (9.64)$$

Левое неравенство следует из (9.62), правое — из (9.61). Неустойчивости возникают сначала при таких значениях волнового числа, для которых наименьшее значение b раньше всего удовлетворяет неравенствам (9.63) или (9.64). Очевидно, что

комплексная λ соответствует возбуждению жесткой моды, в то время как действительная λ связана с мягкой модой. Так как неустойчивость (9.63) возникает при $k \neq 0$ и действительном λ , возникает статическая пространственно неоднородная структура. Теперь можно использовать моды, описанные в разд. 7.6—7.11. Приведем окончательные результаты для двух различных наборов граничных условий. Для граничных условий (9.43) положим

$$q(x, t) = \xi_u q_{0,u} \sqrt{2} \sin l_c \pi x + \sum_{j,l} \xi_{sfl} q_{0sfl} \sqrt{2} \sin l \pi x, \quad (9.65)$$

где индекс u относится к неустойчивой моде в соответствии с обозначениями разд. 7.7. Сумма по j содержит устойчивые моды, которые адиабатически исключаются, что в случае мягкой моды приводит к уравнению

$$\dot{\xi}_u = c_1 (b - b_c) \xi_u + c_3 \xi_u^3 \quad (9.66)$$

при условии, что l четно. Коэффициенты c_1 и c_3 равны

$$c_1 = \frac{D'_{2c}{}^2}{a^2} (1 + D'_{1c} - D'_{2c} (a^2 + D'_{2c})/a^2)^{-1} + O[(b - b_c)], \quad (9.66a)$$

$$c_3 = - \frac{D'_{2c}{}^2}{[D'_{2c} - a^2 (D'_{1c} + 1 - D'_{2c})]^2} \{ (D'_{1c} + 1) (D'_{2c} + a^2) \} \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{2^6 l_c^4}{\pi^2 a^2} (D'_{2c} - a^2) \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(1 - (-1)^i)^2}{i^2 (i^2 - 4l_c^2)} \frac{a^2 (D'_1 + 1) - D'_2 (D'_{1c} + 1)}{a^2 b_c - (b_c - 1 - D'_1) (D'_2 + a^2)} \right\} \quad (9.66b)$$

и

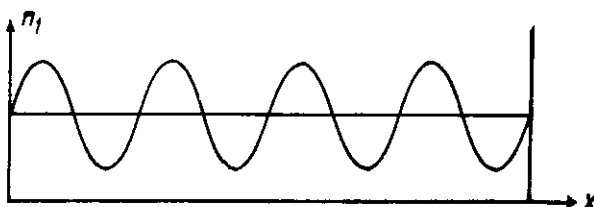
$$D'_{1c} = \pi^2 l_c^2 D_1, \quad (9.66в)$$

где l_c — то критическое значение l , при котором возникает первая неустойчивость. График ξ_u как функции параметра b был приведен на фиг. 5.4 (где $b \equiv k$ и $\xi_u \equiv q$). Очевидно, что $b = b_c$ — точка бифуркации и при $b = b_c$ возникает пространственно-периодическая структура (ср. фиг. 9.7). С другой стороны, если l нечетно, уравнение для ξ_u имеет вид

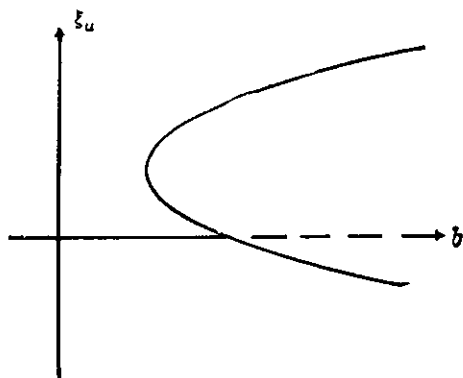
$$\dot{\xi}_u = c_1 (b - b_c) \xi_u + c_2 \xi_u^2 + c_3 \xi_u^3, \quad (9.67)$$

где c_1, c_2, c_3 действительны, $c_1 > 0, c_3 < 0$. c_1 и c_3 даны в (9.66a) и (9.66b),

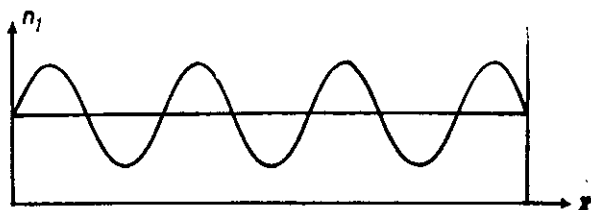
$$c_2 = \frac{2^{3/2}}{3\pi a l_c} (1 - (-1)^{l_c}) D'_{2c}{}^{1/2} (D'_{2c} + a^2)^{1/2} \times \\ \times \frac{(D'_{2c} - a^2) (D'_{1c} + 1)}{[D'_{2c} - a^2 (D'_{1c} + 1 - D'_{2c})]^{1/2}}. \quad (9.67a)$$



Фиг. 9.7. Пространственно-неоднородное распределение концентрации после прохождения точки неустойчивости; l_c четное.



Фиг. 9.8. Параметр порядка ξ_u как функция параметра «накачки» b . Упражнение для читателя: сопоставьте значения ξ_u при фиксированных b и минимумы потенциальных кривых, приведенных в разд. 6.3.



Фиг. 9.9. Пространственно-неоднородное распределение после прохождения точки неустойчивости; l_c нечетное.

ξ_u как функция b изображена на фиг. 9.8. Соответствующая пространственная структура представлена на фиг. 9.9.

Мы предлагаем читателю в виде упражнения изобразить потенциальные кривые, соответствующие (9.66) и (9.67), и рассмотреть точки равновесия по аналогии с разд. 5.1. До сих пор мы рассматривали лишь неустойчивости, связанные с мягкой модой. Если нет конечных границ, то зададим q в виде

$$q = \xi_{u, k_c} q_{0u k_c} \exp(ik_c x) + \sum_{j, k} \xi_{s/j k} q_{0s/j k} \exp(ikx). \quad (9.68)$$

Методы, описанные в разд. 7.8, позволяют вывести следующие уравнения для $\xi_{u, k_c} \equiv \xi$:

а) мягкая мода

$$\dot{\xi} = (\lambda_1 + \lambda'_1 \nabla^2) \xi - A |\xi|^2 \xi, \quad (9.69)$$

где

$$\lambda_1 = (b - b_c)(1 + a^2 - \mu^2 - a\mu^3)^{-1} + O[(b - b_c)^2], \quad (9.69a)$$

$$\lambda'_1 = 4a\mu((1 - \mu^2)(1 + a\mu)k_c^2)^{-1}, \quad (9.69б)$$

$$A = (9(1 - \mu^2)\mu^3(1 - a\mu)^2 a)^{-1}(-8a^3\mu^3 + 5a^2\mu^2 + 20a\mu - 8) \quad (9.69в)$$

и

$$\mu = (D_1/D_2)^{1/2};$$

б) жесткая мода

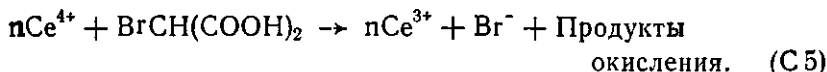
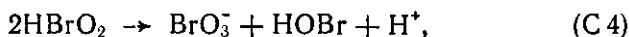
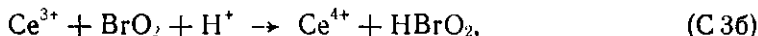
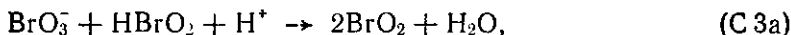
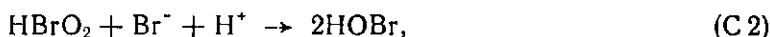
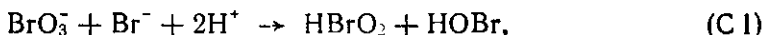
$$\begin{aligned} \dot{\xi} = & \frac{1+a^2}{2}\xi + (D_1 + D_2 - ia(D_1 - D_2))\nabla^2\xi - \\ & - \left(\frac{1}{2} \left(\frac{2+a^2}{a^2} \right) - i \frac{4-7a^2+4a^2}{3a^3} \right) |\xi|^2 \xi. \end{aligned} \quad (9.70)$$

Отметим, что A может стать отрицательным. В этом случае необходимо включить в рассмотрение высшие степени ξ . По мере увеличения концентраций b можно ожидать появления более сложных временных и пространственных структур, что и было подтверждено вычислениями на ЭВМ.

Рассмотренные выше уравнения могут служить моделью ряда биохимических реакций; с их помощью можно также понять, по крайней мере качественно, реакции Белоусова — Жаботинского, в которых наблюдались и временные и пространственные осцилляции. Следует отметить, что эти реакции не стационарные, а скорее представляют собой долгоживущее переходное состояние, возникающее после соединения реагентов. Было также рассмотрено несколько других решений уравнений, подобных (9.41) и (9.42). Так, в пространстве двух измерений с полярными координатами, в системе, где мягкая и жесткая

моды возникают одновременно, были обнаружены осциллирующие кольцевые структуры.

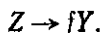
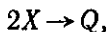
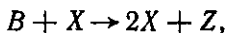
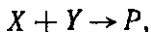
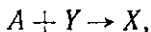
Перейдем теперь ко второй модели, которая была введена для описания некоторых существенных черт реакции Белоусова — Жаботинского. Чтобы получить представление о химии этого процесса, мы приводим следующую схему реакций:



Этапы (C 1) и (C 4) являются бимолекулярными процессами, включающими в себя перенос атома кислорода и сопровождаемыми быстрыми переносами протонов: образующийся при этом продукт HOBr быстро преобразуется, прямо или опосредованно, при бромировании малоновой кислоты. Этап (C 3a) определяет скорость всего процесса (C 3a) + 2(C 3б). Ион Ce^{4+} , возникающий на этапе (C 3б), исчезает на этапе (C 5) при окислении бромомалоновой кислоты и других органических продуктов с образованием иона брома. Полный химический механизм значительно более сложен, но эта упрощенная модель достаточна для объяснения осцилляторного поведения системы.

Модель для вычислений

Существенные кинетические черты химического механизма можно отобразить с помощью модели, называемой орегонатор:



Эта вычислительная модель может быть связана с химическим механизмом с помощью следующих сопоставлений: $A \equiv B \equiv \text{BrO}_3^-$, $X \equiv \text{HBrO}_2$, $Y \equiv \text{Br}^-$ и $Z \equiv 2\text{Ce}^{4+}$. При этом требуется учитывать три переменные, именно концентрации веществ X , Y , Z .

Упражнение

Покажите, что уравнения равновесия, соответствующие вышеприведенной схеме (в соответствующих единицах), имеют вид

$$\dot{n}_1 = s(n_2 - n_2 n_1 + n_1 - g n_1^2),$$

$$\dot{n}_2 = s^{-1}(-n_2 - n_2 n_1 + f n_3),$$

$$\dot{n}_3 = \omega(n_1 - n_3).$$

9.5. Стохастическая модель химической реакции без диффузии. Процессы рождения и гибели. Случай одной переменной

В предыдущих разделах мы рассматривали химические реакции с самой общей точки зрения, т. е. мы интересовались поведением макроскопических плотностей. В этом и последующем разделах мы учтем дискретную природу процессов. Рассмотрим некоторое число молекул N (вместо концентрации n) и то, как оно изменяется в ходе отдельной реакции. Поскольку отдельная реакция между молекулами является случайным событием, N — случайная переменная. Определим распределение вероятностей $P(N)$. Весь процесс мы рассматриваем в довольно общем виде. Допустим сначала, что реакция пространственно-однородна, другими словами, пренебрежем пространственным изменением N . Кроме того, не будем рассматривать такие детали, как влияние на реакцию локальной температуры или распределения скоростей молекул. Просто предположим, что при заданных условиях реакция происходит, и требуется установить вид уравнения, описывающего происходящее при этом изменение распределения вероятностей $P(N)$. Для пояснения всей процедуры рассмотрим схему реакции, которая уже встречалась раньше



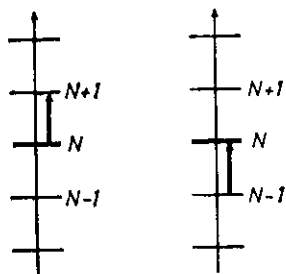
Число $N = 0, 1, 2 \dots$ представляет собой число молекул сорта X . В ходе любой из реакций (9.71) или (9.72) N изменяется на единицу. Выведем теперь кинетическое уравнение, описывающее временное изменение $P(N, t)$ в духе гл. 4. Чтобы показать, как это можно сделать, рассмотрим простейший из процессов, именно (9.72) в направлении k_2' . По аналогии

с разд. 4.1 рассмотрим все переходы, увеличивающие или уменьшающие число N .

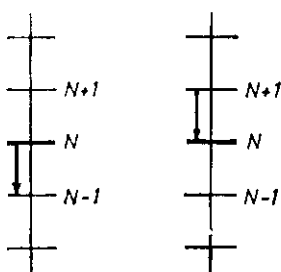
1) Переход $N \rightarrow N + 1$. «Рождение» молекулы X (фиг. 9.10).

Число таких переходов в секунду равно вероятности числа заполнения $P(N, t)$, умноженной на вероятность перехода (в секунду) $\omega(N + 1, N)$. $\omega(N + 1, N)$ пропорциональна концентрации c молекул C и константе скорости реакции k'_2 . Ниже мы увидим, что коэффициентом пропорциональности является объем V .

2) Переход $N - 1 \rightarrow N$ (фиг. 9.10).



Фиг. 9.10. Изменение $P(N)$ благодаря рождению молекулы.



Фиг. 9.11. Изменение $P(N)$ благодаря уничтожению молекулы.

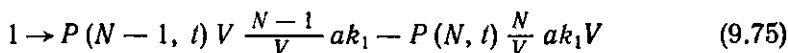
Поскольку в исходном состоянии имеется $N - 1$ молекул, полная скорость переходов равна $P(N - 1, t) k'_2 c V$. Чтобы учесть уменьшение числа заполнения благодаря первому процессу $N \rightarrow N + 1$, возьмем соответствующую скорость перехода со знаком минус. Тогда получим выражение для полной скорости переходов

$$2 \leftarrow V P(N - 1, t) k'_2 c - P(N, t) k'_2 c V. \quad (9.73)$$

Подобным же образом можно рассмотреть первый процесс в (9.72), происходящий со скоростью k_2 . В нем число молекул N уменьшается на единицу [«гибель» молекулы X (фиг. 9.11)]. Если исходить из уровня N , то скорость изменения N пропорциональна вероятности того, что состояние N заполнено, умноженной на концентрацию молекул b , умноженную на число имеющихся молекул X и константу скорости реакции k_2 . Коэффициент пропорциональности должен быть определен позднее. Этот же процесс, однако, переводит систему с уровня N на уровень $N + 1$. Полная скорость переходов равна

$$2 \rightarrow P(N + 1, t) (N + 1) b k_2 - P(N, t) \frac{N}{V} b k_2 V. \quad (9.74)$$

Теперь достаточно ясно, как получить скорости переходов для процессов 1. При этом мы будем исходить из схемы



и

$$1 \leftarrow P(N+1, t) V \frac{(N+1)N}{V^2} k'_1 - P(N, t) \frac{N(N-1)}{V^2} k'_1 V. \quad (9.76)$$

Теперь подставим скорости, задаваемые (9.73)–(9.76), в кинетическое уравнение Больцмана, поскольку они определяют полную вероятность перехода в единицу времени. Если записать кинетическое уравнение в общем виде, именно:

$$\dot{P}(N, t) = \omega(N, N-1) P(N-1, t) + \omega(N, N+1) P(N+1, t) - \{ \omega(N+1, N) + \omega(N-1, N) \} P(N, t), \quad (9.77)$$

то для процессов (9.71) и (9.72) можно получить следующие вероятности переходов (в секунду):

$$\omega(N, N-1) = V \left(a k_1 \frac{(N-1)}{V} + k'_2 c \right), \quad (9.78)$$

$$\omega(N, N+1) = V \left(k'_1 \frac{(N+1)N}{V^2} + k_2 \frac{b(N+1)}{V} \right). \quad (9.79)$$

Выражения (9.78) и (9.79) приводят в уравнении (9.77) к внутренней трудности, именно: стационарное решение (9.77) есть $P(0)=1$, $P(N)=0$ для $N \neq 0$. (С аналогичной проблемой мы еще встретимся в разд. 10.2.) По этой причине имеет смысл дополнительно к (9.71) и (9.72) включить в рассмотрение третий процесс, описывающий спонтанное рождение молекул сорта X из молекул сорта A с константой скорости k_1 :



Тогда скорости переходов для процессов (9.71), (9.72) и (9.80) будут равны

$$\omega(N, N-1) = V \left(a k_1 \frac{N}{V} + k'_2 c \right) \quad (9.81)$$

и

$$\omega(N, N+1) = V \left(k'_1 \frac{(N+1)N}{V^2} + k_2 b \frac{(N+1)}{V} \right). \quad (9.82)$$

Используя методы гл. 4, можно легко найти решение кинетического уравнения (9.77) при скоростях переходов (9.78) и (9.79) или (9.81) и (9.82) по крайней мере для стационарного случая. Оно имеет вид [ср. (4.119)]

$$P(N) = P(0) \prod_{v=0}^{N-1} \frac{\omega(v+1, v)}{\omega(v, v+1)}. \quad (9.83)$$

Дальнейшее рассмотрение очень просто проводится аналогично тому, как это сделано в разд. 4.6. В зависимости от параметра b P достигает экстремального значения либо при $N = 0$, либо при $N = N_0 \neq 0$.

Теперь мы должны определить коэффициенты пропорциональности, которые оставались неопределенными в (9.73) — (9.76). Их можно легко найти, потребовав, чтобы кинетическое уравнение приводило к тому же уравнению для плотности n , которое было введено в разд. 9.2, по крайней мере в случае больших чисел N . С этой целью получим уравнение для среднего значения N , умножая (9.77) на N и суммируя по всем N . После простых вычислений находим

$$\frac{d}{dt} \langle N \rangle = \langle w(N+1, N) \rangle - \langle w(N-1, N) \rangle, \quad (9.84)$$

где, как обычно,

$$\langle N \rangle = \sum_{N=0}^{\infty} NP(N, t)$$

и

$$\langle w(N \pm 1, N) \rangle = \sum_{N=0}^{\infty} w(N \pm 1, N) P(N, t).$$

Используя (9.78) и (9.79), получаем

$$\frac{d}{dt} \langle N \rangle = V \left\{ ak_1 \frac{1}{V} \langle N+1 \rangle + k_2'c - k_1' \frac{1}{V} \langle N(N-1) \rangle - k_2b \frac{1}{V} \langle N \rangle \right\}. \quad (9.85)$$

Сравнивая это выражение с (9.4) и (9.5), мы видим, что они полностью согласуются, если положить $n = \langle N \rangle / V$, пренебречь единицей по сравнению с N и приближенно считать, что $\langle N(N-1) \rangle$ равно $\langle N \rangle^2$. Последняя замена была бы точной, если бы P было распределением Пуассона (см. упражнение к разд. 2.12). В общем случае распределение P не пуассоновское, как в этом можно убедиться из рассмотрения (9.83) и явного вида w . Однако распределение Пуассона получается, если обе реакции (9.71) и (9.72) удовлетворяют условию детального равновесия. Чтобы показать это, представим вероятности переходов (9.78) и (9.79) в виде суммы вероятностей, относящихся к процессу 1 и процессу 2:

$$w(N, N-1) = w_1(N, N-1) + w_2(N, N-1), \quad (9.86)$$

$$w(N-1, N) = w_1(N-1, N) + w_2(N-1, N). \quad (9.87)$$

Здесь использованы обозначения

$$\omega_1(N, N-1) = ak_1(N-1), \quad (9.88)$$

$$\omega_1(N-1, N) = k'_1 N(N-1) \frac{1}{V}, \quad (9.89)$$

$$\omega_2(N, N-1) = Vk'_2 c, \quad (9.90)$$

$$\omega_2(N-1, N) = k_2 bN. \quad (9.91)$$

Если принцип детального равновесия выполняется, то

$$\omega_1(N, N-1)P(N-1) = \omega_1(N-1, N)P(N) \quad (9.92)$$

и

$$\omega_2(N, N-1)P(N-1) = \omega_2(N-1, N)P(N). \quad (9.93)$$

Поделив (9.92) на (9.93) и используя (9.88)–(9.91), находим соотношение

$$\frac{ak_1}{k'_1 N/V} = \frac{k'_2 c}{k_2 bN/V}. \quad (9.94)$$

Очевидно, что обе части (9.94) имеют вид μ/N , где μ — определенная постоянная. Соотношение (9.94) эквивалентно закону действующих масс. (В соответствии с этим законом

$$\frac{\text{Произведение концентраций продуктов реакции}}{\text{Произведение концентраций исходных веществ}} = \text{const.}$$

В нашем случае числитель равен $n \cdot n \cdot c$, а знаменатель $a \cdot n \cdot b \cdot n$). Используя то, что отношение (9.94) равно μ/N , легко убедиться, что

$$\omega(N, N-1) = \frac{\mu}{N} \omega(N-1, N). \quad (9.95)$$

Подставляя это соотношение в (9.83), получаем

$$P(N) = P(0) \frac{\mu^N}{N!}, \quad (9.96)$$

где $P(0)$ определяется из условия нормировки и равно

$$P(0) = e^{-\mu}. \quad (9.97)$$

Таким образом, в рассматриваемом случае мы действительно приходим к распределению Пуассона

$$P(N) = \frac{\mu^N}{N!} e^{-\mu}. \quad (9.98)$$

В общем случае неравновесной ситуации, однако, принцип детального равновесия [см. (9.92) и (9.93)] не справедлив, и вследствие этого мы получаем распределение, отличное от пуас-

соновского. Можно показать в совершенно общем виде, что в состоянии теплового равновесия принцип детального равновесия выполняется, так что при этом всегда получается распределение Пуассона. Но это не так в других случаях, когда система находится вдали от состояния теплового равновесия.

Упражнения к разд. 9.5

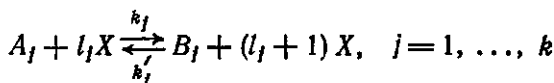
1) Выведите выражения для скоростей переходов в кинетическом уравнении (9.77) для следующих процессов:



2) Рассмотрите экстремумы распределения вероятностей как функции концентраций a, b .

3) Получите уравнение (9.84).

4) Рассмотрите набор реакций



при условии, что для каждой реакции j выполняется принцип детального равновесия. Покажите, что распределение $P(N)$ является пуассоновским.

Указание. Используйте $\omega_j(N, N-1)$ в виде:

$$\omega_j(N, N-1) \sim (N-1)(N-2) \dots (N-l_j),$$

$$\omega_j(N-1, N) \sim N(N-1)(N-2) \dots (N-l_j+1).$$

Отметим, что для $N \leq l_j$ деление на ω_j невозможно.

9.6. Стохастическая модель химической реакции с диффузией. Случай одной переменной

В большинстве химических и биохимических реакций важнейшую роль играет диффузия, в особенности там, где речь идет о формировании пространственных структур. Для адекватного описания таких ситуаций разделим полный объем на малые ячейки объема v . Пронумеруем ячейки индексом l и обозначим число молекул в каждой ячейке через N_l . Рассмотрим теперь совместную вероятность того, что ячейки l заняты N_l молекулами:

$$P(\dots, N_l, N_{l+a}, \dots). \quad (9.99)$$

В этой главе мы рассмотрим только молекулы одного сорта, но весь формализм можно легко обобщить на случай молекул нескольких сортов. Число молекул N_l изменяется по двум причинам: как и прежде, благодаря химическим реакциям, но теперь также и благодаря диффузии. Будем снова описывать процесс диффузии как процесс рождения и гибели, в котором одна молекула уничтожается в одной ячейке и одновременно рождается в соседней ячейке. Чтобы найти полное изменение P в результате этого процесса, следует сначала выполнить суммирование по всем ячейкам $l + a$, находящимся рядом с рассматриваемой ячейкой, а затем — по всем ячейкам l . Тогда производная P по времени, определяемая процессом диффузии, будет иметь вид

$$\dot{P}(\dots, N_l, \dots)|_{\text{диффузия}} = \sum_{l, a} D' \{ (N_{l+a} + 1) \times \\ \times P(\dots, N_l - 1, N_{l+a} + 1) - N_l P(\dots, N_l, N_{l+a}, \dots) \}. \quad (9.100)$$

Полное изменение P определяется двумя членами

$$\dot{P} = \dot{P}|_{\text{диффузия}} + \dot{P}|_{\text{реакция}}, \quad (9.101)$$

где $\dot{P}|_{\text{реакция}}$ определяется, например, правой частью (9.77) или по любой другой схеме реакции. В случае если схема реакции нелинейная, уравнение (9.101) точно решить нельзя. Поэтому мы применим другой метод, именно выведем уравнения движения для средних значений или корреляционных функций. Чтобы от дискретных ячеек перейти к континууму, заменим дискретный индекс l на непрерывно меняющуюся координату $x: l \rightarrow x$. В соответствии с этим введем новую стохастическую переменную — локальную плотность частиц

$$\rho(x) = \frac{N_l}{v} \quad (9.102)$$

и ее среднее значение

$$n(x, t) = \frac{1}{v} \langle N_l \rangle = \frac{1}{v} \sum_{\{N_l\}} N_l P(\dots, N_l, \dots). \quad (9.103)$$

Введем затем корреляционную функцию плотностей в точках x и x' :

$$g(x, x', t) = \frac{1}{v^2} \langle N_l N_{l'} \rangle - \langle N_l \rangle \langle N_{l'} \rangle \frac{1}{v^2} - \delta(x - x') n(x, t), \quad (9.104)$$

где использовано определение

$$\langle N_l N_{l'} \rangle = \sum_{\{N_l\}} N_l N_{l'} P(\dots, N_l, \dots, N_{l'}, \dots). \quad (9.105)$$

В качестве конкретного примера рассмотрим схему реакции (9.71), (9.72). Предположим, однако, что обратной реакцией можно пренебречь, т. е. $k'_1 = 0$. Умножая соответствующее уравнение (9.101) на (9.102) и беря от обеих частей среднее значение в соответствии с (9.103), получаем

$$\frac{\partial n(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 n(\mathbf{x}, t) + (\kappa_1 - \kappa_2) n(\mathbf{x}, t) + \kappa_1 \beta, \quad (9.106)$$

где коэффициент диффузии D определяется как

$$D = D'/\sigma, \quad (9.107)$$

$$\kappa_1 = \frac{k_1 a}{v}, \quad \kappa_2 = \frac{k_2 b}{v}, \quad (9.107a)$$

$$\beta = \frac{k'_2 c}{k_1 v}. \quad (9.107b)$$

Детали вывода (9.106) мы оставляем читателю в качестве упражнения. Подобным же образом получаем уравнение для корреляционной функции (9.104)

$$\frac{\partial g}{\partial t} = D (\nabla_x^2 + \nabla_{x'}^2) g + 2(\kappa_1 - \kappa_2) g + 2\kappa_1 n(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (9.108)$$

Сравним (9.106) с (9.28), (9.5), (9.4). В результате оказывается, что мы получили в точности то же уравнение, что и в нестохастическом случае. Кроме того, видим, что если наложить условие $k_1 = 0$, это будет эквивалентно пренебрежению в (9.8) нелинейным членом. Именно по этой причине (9.106), а также (9.108) могут быть решены точно. Стационарное решение (9.108) имеет вид

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{x}')_{ss} = \frac{\kappa_1 n_{ss}}{4\pi D |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \exp \left\{ -|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| ((\kappa_2 - \kappa_1)/D)^{1/2} \right\}, \quad (9.109)$$

где плотность в стационарном состоянии n_{ss} равна

$$n_{ss} = \beta \kappa_1 / (\kappa_2 - \kappa_1). \quad (9.110)$$

Очевидно, что с увеличением расстояния между точками \mathbf{x} и \mathbf{x}' корреляционная функция уменьшается. Корреляционная длина определяется знаменателем в показателе экспоненты и равна

$$l_c = (D/(\kappa_2 - \kappa_1))^{1/2}. \quad (9.111)$$

При равенстве эффективных скоростей реакции κ_1 и κ_2 (которые пропорциональны концентрациям молекул a и b) длина когерентности обращается в бесконечность. Это совершенно аналогично тому, что имеет место при фазовых переходах в равновесных системах. Мы уже проводили параллель между моделью химической реакции и системами, претерпевающими

фазовый переход (ср. разд. 9.2). Отметим, что можно также получить уравнение для корреляции во времени. Оказывается, что в точке перехода время корреляции также обращается в бесконечность. Весь процесс в целом очень напоминает неравновесный фазовый переход в лазере с непрерывным распределением мод. Рассмотрим теперь флуктуации числа молекул в малых объемах и их корреляционные функции. Для этого проинтегрируем стохастическую плотность (9.102) по объему ΔV , предполагая, что он имеет форму сферы радиусом R ,

$$\int_{\Delta V} \rho(x) d^3x = N(\Delta V). \quad (9.112)$$

При этом легко вычислить дисперсию стохастической переменной (9.112), которая, как обычно, определяется формулой

$$\sigma^2[\Delta V] = \langle N(\Delta V)^2 \rangle - \langle N(\Delta V) \rangle^2. \quad (9.113)$$

Используя определения (9.104) и обозначение $R/l_c = r$, после элементарного интегрирования получаем

$$\sigma^2[\Delta V] = \langle N(\Delta V) \rangle \left\{ 1 + \frac{3\kappa_2 l_c^2}{2Dr^3} \left[\left(1 - r^2 + \frac{2}{3}r \right)^3 - e^{-2r}(1+r)^2 \right] \right\}. \quad (9.114)$$

Рассмотрим (9.114) в нескольких представляющих интерес предельных случаях. В критической точке, где $l_c \rightarrow \infty$,

$$\sigma^2[\Delta V] \rightarrow \langle N(\Delta V) \rangle \left(1 + \frac{2\kappa_2 R^2}{5D} \right), \quad (9.115)$$

т. е. с ростом расстояния дисперсия постоянно растет. При конечном l_c и $R \rightarrow \infty$ дисперсия оказывается пропорциональной корреляционной длине

$$\sigma^2[\Delta V] \rightarrow \langle N(\Delta V) \rangle \kappa_2 l_c^2 / D. \quad (9.116)$$

Для объемов с диаметром, малым по сравнению с корреляционной длиной $R \ll l_c$,

$$\sigma^2[\Delta V] \approx \langle N(\Delta V) \rangle \left(1 + \frac{2\kappa_2 R^2}{5D} \right). \quad (9.117)$$

Очевидно, что при $R \rightarrow 0$ (9.117) становится пуассоновским распределением, что согласуется с постулатом о локальном равновесии в малых объемах. С другой стороны, при $R \gg l_c$ дисперсия равна

$$\sigma^2[\Delta V] \approx \langle N(\Delta V) \rangle \kappa_1 | \kappa_2 - \kappa_1 |^{-1} \left(1 - \frac{3}{2} \frac{l_c}{R} \right). \quad (9.118)$$

Этот результат показывает, что при $R \rightarrow \infty$ дисперсия не зависит от расстояния, и ее можно получить из кинетического уравнения, пренебрегая диффузией. Было предложено исследовать такие критические флуктуации методами флуоресцентной спектроскопии, которые должны быть гораздо более эффективными, чем методы, основанные на рассеянии света. Расходимости, возникающие в точке перехода $\kappa_1 = \kappa_2$, устраняются, если принять во внимание нелинейный член $\sim n^2$, т. е. если полагать $k'_1 \neq 0$. Этот случай мы рассмотрим в следующей главе в рамках более сложной модели

Упражнения к разд. 9.6

1) Выведите (9.106) из (9.101) с помощью (9.100), (9.77) — (9.79) для случая $k'_1 = 0$.

Указание. Используйте упр. 3 к разд. 9.5. Отметим, что в принятых нами безразмерных единицах для измерения пространственных координат

$$\frac{1}{2} \sum_a \langle N_{1+a} + N_{1-a} - 2N_1 \rangle = V_1^2 \langle N_1 \rangle.$$

2) Выведите (9.108) из тех же самых уравнений, что и в упр. 1, но для случая $k'_1 = 0$.

Указание. Умножьте (9.101) на $N_l N_l$ и просуммируйте по всем N_l .

3) Найдите стационарное решение (9.101), положив $\dot{P}_{\text{реакция}} = 0$.

Указание. Используйте принцип детального равновесия. Нормализуйте полученную вероятность распределения в конечном объеме, т. е. для случая конечного числа ячеек.

4) Преобразуйте (9.100) для одномерного случая в уравнение Фоккера — Планка:

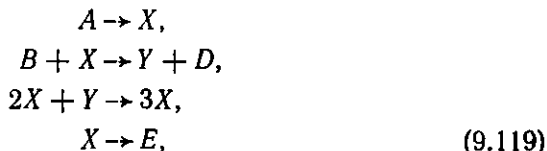
$$\dot{f} = \int dx \left\{ - \frac{\delta}{\delta \rho(x)} \left(D \frac{d^2 \rho(x)}{dx^2} f \right) + D \left(\frac{d}{dx} \frac{\delta}{\delta \rho(x)} \right)^2 (\rho(x) f) \right\}.$$

Указание. Разделите полный объем на ячейки, которые содержат $N_1 \gg 1$.

Предполагается, что для соседних ячеек P изменяется очень мало. Разложите правую часть (9.100) в ряд по степеням $\langle l \rangle$ до второго члена. Воспользуйтесь $\rho(x)$ из (9.102) и перейдите к пределу, в котором l становится непрерывной переменной x , заменяя при этом P на $f = f\{\rho(x)\}$ и используя вариационную производную $\delta/\delta \rho(x)$ вместо $\partial/\partial N_l$ (относительно функциональной производной см. книгу: *Haken H. Quantum Field Theory of Solids*, North-Holland, Amsterdam, 1976).

9.7*. Стохастическое рассмотрение брюсселятора вблизи неустойчивости типа мягкой моды

а) *Кинетическое уравнение Больцмана и уравнение Фоккера — Планка.* Рассмотрим схему реакций из разд. 9.4



где концентрации молекул сорта A и B заданы и поддерживаются постоянными, в то время как числа молекул сорта X и Y переменные. Они обозначаются соответственно через M и N . Поскольку учитывается диффузия, мы делим объем, в котором происходит химическая реакция, на ячейки, которые содержат все еще большое (по сравнению с единицей) число молекул. Пронумеруем ячейки индексом l и обозначим числа молекул в ячейке l через M_l, N_l . Снова введем безразмерные постоянные a, b , пропорциональные концентрациям молекул сорта A, B . Обобщая результаты разд. 9.5 и 9.6, получаем следующее кинетическое уравнение Больцмана для распределения вероятностей $P(\dots, M_l, N_l, \dots)$, которое дает совместную вероятность найти $M_{l'}, N_{l'}, \dots, M_l, N_l, \dots$ молекул в ячейках l', \dots, l :

$$\begin{aligned} \dot{P}(\dots; M_l, N_l; \dots) = & \sum_l v [aP(\dots; M_l - 1, N_l; \dots) + \\ & + b(M_l + 1)v^{-1}P(\dots; M_l + 1, N_l - 1; \dots) + \\ & + (M_l - 2)(M_l - 1)(N_l + 1)v^{-3}P(\dots; M_l - 1, N_l + 1; \dots) + \\ & + (M_l + 1)v^{-1}P(\dots; M_l + 1, N_l; \dots) - \\ & - P(\dots, M_l, N_l; \dots)(a + (b + 1)M_l v^{-1} + M_l(M_l - 1)N_l v^{-3})] + \\ & + \sum_{l_a} [D'_1 \{(M_{l+a} + 1)P(\dots; M_l - 1, N_l; \dots; M_{l+a} + \\ & + 1, N_{l+a}; \dots) - M_{l+a}P(\dots; M_l, N_l; \dots; M_{l+a}, N_{l+a}; \dots)\} + \\ & + D'_2 \{(N_{l+a} + 1)P(\dots, M_l, N_l - 1; \dots; M_{l+a}, N_{l+a} + 1, \dots) - \\ & - N_l P(\dots; M_l, N_l; \dots; M_{l+a}, N_{l+a}; \dots)\}]. \quad (9.120) \end{aligned}$$

Здесь v — объем ячейки l . Первая сумма учитывает химические реакции, вторая сумма, содержащая «коэффициенты диффузии» D'_1, D'_2 , учитывает диффузию двух сортов молекул. Сумма по a пробегает по ячейкам, являющимся ближайшими соседями ячейки l . Если числа M_l, N_l достаточно велики по сравнению с единицей и если функция P медленно зависит от своих аргументов, то можно перейти к уравнению Фоккера —

Планка. Анализ показывает, что такой переход справедлив внутри хорошо определенной области вокруг точки неустойчивости типа мягкой моды. Это подразумевает, в частности, что $a \gg 1$ и $\mu \equiv (D_1/D_2)^{1/2} < 1$. Для получения уравнения Фоккера — Планка разложим выражения типа $(M_1 + 1)P(\dots, M_{1+1}, N_1, \dots)$ и т. д. в ряд по степеням «1», удерживая при этом первые три члена (см. разд. 4.2). Далее 1 заменяется на непрерывный индекс, который можно интерпретировать как пространственную координату x . Это требует замены обычной производной на вариационную производную. Кроме того, мы заменяем $M_{1/v}, N_{1/v}$ на плотности $M(x), N(x)$, которые обозначены через $\rho(x)$ в (9.102), и $P(\dots, M_1, N_1, \dots)$ — на $f(\dots, M(x), N(x), \dots)$. Поскольку подробное изложение этих преобразований занимает много места, приведем лишь конечный результат

$$\begin{aligned} \dot{f} = & \int d^3x [-\{(a - (b + 1)M + M^2N + D_1 \nabla^2 M)\} f]_{M(x)} - \\ & - \{(bM - M^2N + D_2 \nabla^2 N)\} f]_{N(x)} + \\ & + \frac{1}{2} \{(a + (b + 1)M + M^2N)\} f]_{M(x), M(x)} - \\ & - \{(bM + M^2N)\} f]_{M(x), N(x)} + \frac{1}{2} \{(bM + M^2N)\} f]_{N(x), N(x)} + \\ & + D_1 (\nabla (\delta/\delta M(x)))^2 (Mf) + D_2 (\nabla (\delta/\delta N(x)))^2 (Nf)]. \quad (9.121) \end{aligned}$$

Индексы $M(x)$ или $N(x)$ означают взятие вариационной производной по $M(x)$ или $N(x)$. D_1 и D_2 — обычные коэффициенты диффузии. Уравнение Фоккера — Планка (9.121) все еще очень сложно для того, чтобы можно было найти его явное решение. Поэтому разобьем задачу на несколько этапов. Сначала воспользуемся результатами анализа на устойчивость соответствующих уравнений равновесия без учета флуктуаций (см. разд. 9.4). В соответствии с этим рассмотрением при $b < b_c$ существуют устойчивые, пространственно-однородные и стационарные решения $M(x) = a$, $N(x) = b/a$. Введем поэтому новые переменные $q_i(x)$ следующим образом:

$$M(x) = a + q_1(x), \quad N(x) = b/a + q_2(x).$$

Тогда получим уравнение Фоккера — Планка:

$$\begin{aligned} \dot{f} = & \int dx [-\{((b - 1)q_1 + a^2q_2 + g(q_1, q_2) + D_1 \cdot \nabla^2 q_1)\} f]_{q_1(x)} - \\ & - \{(-bq_1 - a^2q_2 - g(q_1, q_2) + D_2 \nabla^2 q_2)\} f]_{q_2(x)} + \\ & + \frac{1}{2} \{\hat{D}_{11}(q)\} f]_{q_1(x), q_1(x)} - \{\hat{D}_{12}(q)\} f]_{q_1(x), q_2(x)} + \\ & + \frac{1}{2} \{\hat{D}_{22}(q)\} f]_{q_2(x), q_2(x)} + D_1 (\nabla (\delta/\delta q_1(x)))^2 (a + q_1) f + \\ & + D_2 (\nabla (\delta/\delta q_2(x)))^2 (b/a + q_2) f], \quad (9.122) \end{aligned}$$

где f теперь — функционал от переменных $q_1(x)$. В (9.122) использованы такие обозначения:

$$g(q_1, q_2) = 2aq_1q_2 + bq_1^2/a + q_1^2q_2, \quad (9.123)$$

$$\hat{D}_{11} = 2a + 2ab + (3b + 1)q_1 + a^2q_2 + 2aq_1q_2 + (b/a)q_1^2 + q_1^2q_2, \quad (9.124)$$

$$\hat{D}_{12} = \hat{D}_{22} = 2ab + 3bq_1 + bq_1^2/a + a^2q_2 + 2aq_1q_2 + q_1^2q_2. \quad (9.125)$$

б) Дальнейшее рассмотрение производится аналогично тому, как это делалось в предыдущих главах. Поскольку детали вывода занимают много места, мы просто перечислим этапы:

1) Представляем $q(x, t)$ в виде суперпозиции собственных решений линеаризованных уравнений (9.47), (9.48). Используем при этом представление волновых пакетов, введенное в разд. 7.7. Коэффициенты разложения $\xi_\mu(x, t)$ представляют собой функции, медленно меняющиеся в пространстве и во времени.

2) Переходим в уравнении Фоккера — Планка к переменным ξ_μ , которые по-прежнему описывают как неустойчивые, так и устойчивые моды.

3) Исключаем амплитуды ξ устойчивых мод методом, описанным в разд. 7.7. Тогда уравнение Фоккера — Планка принимает окончательный вид

$$\dot{f} = - \int d^3x \sum_{\mathbf{k}} [(\delta/\delta\xi_{\mathbf{k}}(x)) \{\lambda_1(V) \xi_{\mathbf{k}}(x) + H_{\mathbf{k}}(\xi)\} - G_{11} \sum_{\mathbf{k}} \delta^2/\delta\xi_{\mathbf{k}} \delta\xi_{\mathbf{k}}^*] f, \quad (9.126)$$

где

$$\xi_{\mathbf{k}}^* = \xi_{-\mathbf{k}}, \quad \lambda_1(V) = \lambda_1(b, V) \approx \lambda_0 + \lambda^{(1)}V^2, \quad (9.127)$$

причем

$$\lambda^{(1)}\xi \approx 4a\mu((1 - \mu^2)(1 + a\mu)k_c^2)^{-1}V^2\xi, \quad (9.128)$$

$$\lambda_0 = (b - b_c)(1 + a^2 - \mu^2 - a\mu^3)^{-1} + O(b - b_c)^2. \quad (9.129)$$

Далее имеем

$$G_{11} = 2(a(1 - \mu^2)^2)^{-1}\mu^2(1 + a\mu)^2$$

и

$$H_{\mathbf{k}}(\xi) = \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''} I_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k}} \bar{c}_1 \xi_{\mathbf{k}'}(x) \xi_{\mathbf{k}''}(x) - \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k}'''} \bar{a}_1 J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k}'''} \xi_{\mathbf{k}'}(x) \xi_{\mathbf{k}''}(x) \xi_{\mathbf{k}'''}(x). \quad (9.130)$$

I и J определены в (7.81) и (7.83). Выражения для I и J дают «правила отбора», которые важны для рассмотрения возникаю-

щих пространственных структур. Легко показать, что в случае одного измерения $I=0$ при граничных условиях (9.44), т. е. χ_k — плоские волны, $I \approx 0$ при $\chi_k \sim \sin kx$ и $k \gg 1$. Далее, $J_{kk'k''k'''} = J \neq 0$ только в том случае, когда две пары k из $\mathbf{k}, k', k'', k'''$ удовлетворяют условию

$$\begin{aligned} k_1 &= -k_2 = -k_c, \\ k_3 &= -k_4 = -k_c, \end{aligned}$$

если используются плоские волны, или

$$k = k' = k'' = k''' = k_c,$$

если $\chi_k \sim \sin kx$. Для случая плоских волн выражение для \bar{a}_1 вычислено в явном виде. Тогда уравнение Фоккера — Планка (9.126) сводится к следующему:

$$\dot{f} = \left[- \int dx (\delta/\delta\xi(x)) ((\lambda_0 + \lambda_1^{(1)} \nabla^2) \xi(x) - A \xi^3(x)) + \int d^3x G_{11} \delta^2/\delta\xi^2 \right] f, \quad (9.131)$$

где коэффициент A равен

$$A = (9(1 - \mu^2) \mu^3 (1 - a\mu)^2 a)^{-1} \cdot (-8a^3 \mu^3 + 5a^2 \mu^2 + 20a\mu - 8). \quad (9.132)$$

Отметим, что при достаточно большом значении $a\mu$ коэффициент A становится отрицательным. Более внимательный анализ показывает, что при этом условии мода $k=0$ приближается к маргинальной ситуации, что приводит к необходимости рассматривать моды $k=0$ (и $|\mathbf{k}|=2k_c$) как неустойчивые моды. Уравнения типа (9.131) или соответствующие уравнения Ланжевена уже несколько раз встречались в этой книге. Из уравнения (9.131) следует, что, когда имеет место неустойчивость типа мягкой моды, химическая реакция испытывает фазовый переход второго рода полностью аналогично тому, как это было в случаях лазера или неустойчивости Бенара (гл. 8).

9.8. Химические цепи

В разд. 9.2—9.4 мы встречались с несколькими конкретными примерами уравнений, описывающих химические процессы. В пространственно-однородном случае эти уравнения имеют вид

$$\dot{n}_i = F_i(n_1, n_2, \dots). \quad (9.133)$$

Уравнения такого типа встречаются и в совершенно других дисциплинах, например в теории электрических цепей. Здесь различные n имеют смысл зарядов, токов или напряжений.

Электронные устройства, такие, как радиоприемники или ЭВМ, содержат электрические цепи. Цепь составлена из отдельных элементов (например, сопротивлений, туннельных диодов, транзисторов), каждый из которых может выполнять определенную функцию, например усиливать ток или выпрямлять его. Кроме того, определенные блоки могут действовать как ячейки памяти или выполнять логические операции, такие, как «и», «или», «нет». Ввиду формальной аналогии между системой уравнений (9.133), описывающей химические реакции, и уравнениями электрических цепей возникает вопрос: можно ли сконструировать логические элементы на основе химических реакций? В теории цепей и связанных с ней дисциплинах показывается, что для данного логического процесса можно построить систему уравнений типа (9.133) с хорошо определенными функциями F_j .

Эти довольно абстрактные соображения можно пояснить на стандартном примере передемпфированного ангармонического осциллятора, уравнение которого имеет вид

$$\dot{q} = \alpha q - \beta q^3. \quad (9.134)$$

В электронике это уравнение может описывать, например, заряд туннельного диода в устройстве, которому соответствует фиг. 7.3. Как мы видели в предыдущих главах, уравнение (9.134) допускает два устойчивых состояния $q_1 = \sqrt{\alpha/\beta}$, $q_2 = -\sqrt{\alpha/\beta}$, т. е. оно описывает бистабильный элемент, который может хранить информацию. В разд. 7.3 мы показали, как путем изменения α этот элемент можно переключать. Когда мы хотим использовать химическую реакцию в качестве такого элемента, следует помнить, что концентрация n — существенно положительная величина. Однако от переменной q можно легко перейти к положительной переменной n с помощью замены

$$q = n - q_0, \quad q_0 > 0. \quad (9.135)$$

Благодаря этому оба устойчивых состояния будут лежать теперь в области положительных значений. Подставляя (9.135) и (9.134) и преобразуя это уравнение, получаем

$$\dot{n} = \alpha_1 + \alpha_2 n + \alpha_3 n^2 - \beta n^3, \quad (9.136)$$

где использованы обозначения

$$\alpha_1 = \beta q_0^3 - \alpha q_0, \quad (9.137)$$

$$\alpha_2 = \alpha - 3\beta q_0^2, \quad (9.138)$$

$$\alpha_3 = 3\beta q_0. \quad (9.139)$$

Уравнение (9.134) допускает бистабильное состояние для q ; точно так же и из (9.136) следует возможность такого состоя-

ния для n . Возникает следующий вопрос: можно ли реализовать (9.136) с помощью химической реакции? В предыдущих разделах мы встречались со схемами реакций, описываемыми первыми тремя членами в (9.136). Последний член можно получить в химической реакции с быстро изменяющимся промежуточным состоянием, адиабатически исключая это состояние. Этапы моделирования логической системы теперь довольно очевидны: 1) рассматриваем соответствующие логические элементы электрической цепи и соответствующие им уравнения, 2) переводим их по аналогии на язык химической реакции, рассмотренной выше. Здесь две основные проблемы. Первая заключается в том, что представляющие интерес рабочие точки должны лежать со стороны положительных значений n . Ее можно решить. Вторая проблема, конечно, состоит в том, чтобы найти реальный химический процесс, удовлетворяющий всем требованиям по отношению к направлениям процесса, констант реакции и т. д.

После того как индивидуальные элементы будут реализованы на основе химических реакций, можно сконструировать и всю цепь. Упомянем типичную цепочку, которая состоит из следующих элементов: триггер (т. е. упомянутый выше бистабильный, переключаемый элемент), линии задержки (элементы памяти) и логические элементы «и», «или», «нет». Проведенное рассмотрение относилось к пространственно-однородным реакциям, но, подразделяя пространство на ячейки и учитывая диффузию, мы можем сконструировать взаимодействующие логические цепи. Возможны, конечно, и другие обобщения, например можно представить себе ячейки, разделенные мембранами лишь с частичной проницаемостью для одного из реагентов или же с переключаемой проницаемостью. Очевидно, что эти проблемы подводят нас к основным вопросам биологии.

Приложения к биологии

В теоретической биологии центральное место занимает вопрос о кооперативных эффектах и самоорганизации. Сложность биологических систем обуславливает огромное поле научных исследований. Мы выбрали несколько типичных примеров из следующих областей:

- 1) экология, динамика популяций,
- 2) эволюция,
- 3) морфогенез.

Мы хотим остановиться на существовании основных идей, на том, как эти идеи переводятся на математический язык и какие выводы можно сделать в настоящее время. Мы ясно увидим, что и здесь взаимодействие «случая» и «необходимости» играет важную роль, в особенности в процессах эволюции. Кроме того, окажется, что большинство явлений допускают интерпретацию в терминах неравновесных фазовых переходов.

10.1. Экология. Динамика популяций

Здесь в основном будут рассмотрены вопросы о распределении и численности видов. По ним была собрана обширная информация, например данные относительно численности различных видов птиц в определенных районах. Мы обсудим несколько основных аспектов: какие факторы контролируют численность популяции? Как много различных популяций могут сосуществовать?

Рассмотрим сначала какую-либо одну популяцию, состоящую, например, из бактерий, растений или животных данного вида. Задача описания судьбы каждой особи представляется безнадежной. Вместо этого следует найти «макроскопические» характеристики, описывающие популяцию. Очевидно, что такая характеристика — число особей в популяции. Это число играет роль параметра порядка. Легко понять, что оно действительно управляет судьбой особей по крайней мере «в среднем». Пусть число (или плотность) особей будет n . Оно меняется в зависи-

мости от скорости рождения (числа рождений) g и скорости гибели (числа смертей) d :

$$\dot{n} = g - d. \quad (10.1)$$

Скорости рождения и смерти зависят от числа имеющихся особей. В простейшей форме можно предположить, что

$$g = \gamma n, \quad (10.2)$$

$$d = \delta n, \quad (10.3)$$

где коэффициенты γ и δ не зависят от n . В этом случае говорят о росте, *не зависящем от плотности*. Коэффициенты γ и δ могут зависеть от внешних параметров, таких, как количество доступной пищи, температура, климат и другие факторы окружающей среды. Если эти факторы поддерживаются постоянными, то уравнение

$$\dot{n} = \alpha n \equiv (\gamma - \delta) n \quad (10.4)$$

описывает либо экспоненциально растущую, либо экспоненциально исчезающую популяцию. (Маргинальное состояние $\gamma = \delta$ неустойчиво по отношению к малым возмущениям γ или δ .) Таким образом, стационарное состояние невозможно. Отсюда следует существенный вывод о том, что коэффициенты γ или δ , либо оба они зависят от плотности n . Как уже отмечалось в некоторых упражнениях в данной книге, важная причина этого помимо прочего — ограниченность количества пищи. Учет этого обстоятельства приводит к уравнению типа

$$\dot{n} = \alpha_0 n - \beta n^2 \quad (\text{уравнение Ферхюльста}), \quad (10.5)$$

где член $-\beta n^2$ учитывает истощение источников питания. Предполагается, что новая пища поступает с постоянной скоростью. Поведение системы, описываемой уравнением (10.5), подробно обсуждалось в разд. 5.4.

Перейдем теперь к случаю нескольких видов. Здесь могут встретиться несколько основных ситуаций:

- 1) конкуренция и сосуществование,
- 2) отношения хищник — жертва,
- 3) симбиоз.

1) Конкуренция и сосуществование

Если различные виды не питаются одной и той же пищей и не взаимодействуют друг с другом (например, особи одного вида не убивают особей другого вида и размножаются в разных местах и т. д.), они определенно могут сосуществовать. Соот-

ветствующие уравнения для численности видов записываются как

$$\dot{n}_j = \alpha_j n_j - \beta_j n_j^2, \quad j = 1, 2, \dots \quad (10.6)$$

Ситуация становится гораздо более сложной, если различные виды живут или пытаются жить за счет *одного и того же* источника пищи и (или) они зависят от одних и тех же условий жизни. Это, например, растения, извлекающие фосфор из почвы, причем одни растения своими листьями закрывают другие, лишая их солнечного света, или птицы, которые строят гнезда в одних и тех же дуплах и т. д. Поскольку основной математический подход остается одним и тем же как в этих, так и в других случаях, в нашем рассмотрении мы будем использовать только термин «пища». Этот вопрос мы рассматривали раньше (разд. 5.4) и показали, что выживает лишь наиболее приспособленный вид. (Неустойчивый) случай, когда оказывается, что все скорости роста и исчезновения совпадают, затрагивать не будем.

Чтобы популяция выжила, важно, таким образом, улучшить ее индивидуальные константы α_j , β_j путем адаптации. Кроме того, для сосуществования важно дополнительное поступление пищи. Рассмотрим в качестве примера два вида, живущие за счет «перекрывающихся» источников питания. Эту ситуацию можно промоделировать уравнениями

$$\dot{n}_1 = (\alpha_{11}N_1 + \alpha_{12}N_2)n_1 - \delta_1 n_1, \quad (10.7)$$

$$\dot{n}_2 = (\alpha_{21}N_1 + \alpha_{22}N_2)n_2 - \delta_2 n_2. \quad (10.8)$$

Здесь N_1 и N_2 обозначают количества доступной пищи. Обобщая рассмотрение разд. 5.4, получаем уравнения для N_1 и N_2 :

$$\dot{N}_1 = \gamma_1(N_1^0 - N_1) - \mu_{11}n_1 - \mu_{12}n_2, \quad (10.9)$$

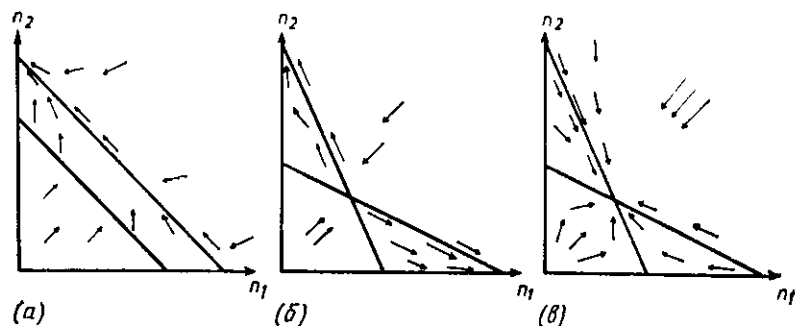
$$\dot{N}_2 = \gamma_2(N_2^0 - N_2) - \mu_{21}n_1 - \mu_{22}n_2. \quad (10.10)$$

Здесь $\gamma_j N_j^0$ — скорость поступления пищи, $-\gamma_j N_j$ — убыль пищи за счет внутренних причин (например, из-за гниения). Допуская возможность адиабатического исключения (см. разд. 7.1), предположим, что можно пренебречь производной по времени от количества пищи. Это позволяет выразить N_1 и N_2 непосредственно через n_1 и n_2 . Подставляя полученные выражения в (10.7), (10.8), получаем следующие уравнения:

$$\dot{n}_1 = [(\alpha_{11}^0 N_1^0 + \alpha_{12}^0 N_2^0) - \delta_1 - (\eta_{11}n_1 + \eta_{12}n_2)]n_1, \quad ((10.11)$$

$$\dot{n}_2 = [(\alpha_{21}^0 N_1^0 + \alpha_{22}^0 N_2^0) - \delta_2 - (\eta_{21}n_1 + \eta_{22}n_2)]n_2. \quad (10.12)$$

Из условия $\dot{n}_1 = \dot{n}_2 = 0$ получаем стационарные значения n_1^0, n_2^0 . Рассматривая «силы» [т. е. правые части в (10.11), (10.12)] в n_1, n_2 -плоскости, можно легко найти условия, зависящие от параметров системы, при которых сосуществование оказывается возможным (фиг. 10.1, а—в). Взятый пример нетрудно обобщить на случай нескольких видов и нескольких источников пищи. Правда подробное исследование условий сосуществования при этом становится затруднительным.



Фиг. 10.1. Рассмотрение правых частей уравнений (10.11) и (10.12) на плоскости n_1, n_2 при различных значениях параметров, приводящих к различным устойчивым конфигурациям. а — точка $n_1 = 0, n_2 = C$ является единственной точкой, т. е. выживает только один вид; б — имеются две устойчивые точки: $n_1 = 0, n_2 \neq 0$ или $n_2 = 0, n_1 \neq 0$, т. е. может выжить один или другой вид; в — в случае $n_1 \neq 0, n_2 \neq 0$ два вида могут сосуществовать. Если стрелки располагать все гуще и гуще, то получатся траектории типа тех, которые обсуждались в разд. 5.2, и точки, где эти направленные траектории сходятся, оказываются точками стока.

Из проведенного рассмотрения ясно, почему для выживания видов столь важную роль играют так называемые экологические ниши и почему выживающие виды иногда столь высоко специализированы. Хорошо известный пример сосуществования и конкуренции — распределение растительности по высоте в горах, когда различные виды растений образуют хорошо очерченные пояса. Детальным изучением таких явлений занимается биогеография.

2) Отношения хищник — жертва

В основном явление состоит в том, что имеются животные двух типов: жертвы, живущие за счет растений, и хищники, питающиеся жертвами. Рыбы в Адриатическом море, зайцы и рыси дали примеры такого типа отношений. Последняя система зайцы — рыси была подробнейшим образом изучена в природе, и относительно нее были сделаны теоретические предсказания.

Основные уравнения Лотки—Вольтерра мы уже обсуждали в разд. 5.4. Они имеют вид

$$\dot{n}_1 = \alpha_1 n_1 - \alpha n_1 n_2, \quad (10.13)$$

$$\dot{n}_2 = \beta n_1 n_2 - 2\kappa_2 n_2, \quad (10.14)$$

где (10.13) описывает жертв, а (10.14) — хищников. Как было показано в разд. 5.4, эти уравнения имеют периодические решения: когда хищники размножаются слишком сильно, то и жертвы уничтожаются ими очень быстро. Поэтому запасы пищи у хищников уменьшаются и соответственно уменьшается численность хищников. В результате число животных-жертв увеличивается и соответственно растут запасы доступной пищи у хищников, которые снова начинают размножаться. Стохастическая трактовка этой проблемы вызывает серьезную трудность: оказывается, что обе популяции вымирают (см. разд. 10.2).

3) Симбиоз

В природе имеются многочисленные примеры того, как кооперация различных видов облегчает их существование. Хорошо известна кооперация деревьев и пчел. Ее можно смоделировать следующим образом. Поскольку скорость размножения одного вида зависит от наличия другого, мы получаем

$$\dot{n}_1 = (\alpha_1 + \alpha'_1 n_2) n_1 - \delta_1 n_1, \quad (10.15)$$

$$\dot{n}_2 = (\alpha_2 + \alpha'_2 n_1) n_2 - \delta_2 n_2, \quad (10.16)$$

где мы пренебрегли членами, описывающими внутривидовое подавление $-\beta_i n_i^2$. В стационарном случае, положив правые части (10.15)—(10.16), равными нулю ($\dot{n}_1 = \dot{n}_2 = 0$), получаем

а) $n_1 = n_2 = 0$ (этот случай неинтересен),

или

б) $\alpha_1 - \delta_1 + \alpha'_1 n_2 = 0;$

$\alpha_2 - \delta_2 + \alpha'_2 n_1 = 0.$

Читателю, наверное, будет интересно рассмотреть свойства устойчивости решения «б». Мы также предлагаем читателю самому убедиться в том, что при достаточно больших начальных значениях n_1 и n_2 всегда имеет место экспоненциальный, лавинообразный рост популяций.

4) Некоторые общие замечания

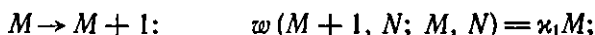
Рассмотренные выше модели в настоящее время широко используются в экологии. Следует, однако, отметить, что они все еще слишком общие. На более высоком уровне рассмотре-

ния следует принять во внимание, например, эффекты запаздывания во времени, времена года, зависимость скорости гибели от возраста и даже различную реактивность внутри данного вида. Даже если проводить анализ так, как это было сделано выше, нужно принять во внимание, что в действительности биологические связи между популяциями более сложны: они организованы по уровням добычи (т. е. питания). Первый уровень составляют зеленые растения. Они служат пищей животным, которые в свою очередь поедаются другими животными и т. д. Кроме того, например, хищник может питаться двумя или несколькими видами жертв. Тогда сильно выраженные осцилляции, которые имеют место в модели Лотки — Вольтерра, в общем случае уменьшаются и система становится более устойчивой.

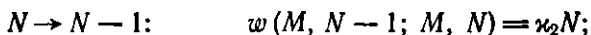
10.2. Стохастическая модель системы хищник — жертва

Аналогия между приведенными выше уравнениями равновесия и уравнениями химических реакций очевидна. Тех читателей, которые хотят рассмотреть примеры (10.5) или (10.11), (10.12) со стохастической точки зрения, мы отсылаем к предыдущим разделам. Здесь мы рассмотрим как еще один пример систему Лотки — Вольтерра. Обозначая число особей двух видов, жертв и хищников, соответственно через M и N и снова используя методы кинетики химических реакций, получаем для скоростей переходов

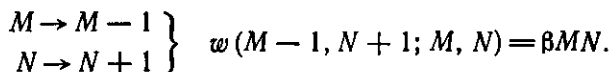
1) скорость размножения жертв



2) скорость гибели хищников



3) скорость поедания хищниками животных-жертв



Тогда кинетическое уравнение для распределения вероятностей $P(M, N, t)$ имеет вид

$$\begin{aligned} \dot{P}(M, N; t) = & \kappa_1 (M - 1) P(M - 1, N; t) + \\ & + \kappa_2 (N + 1) P(M, N + 1; t) + \beta (M + 1)(N - 1) P(M + 1, N - 1; t) - \\ & - (\kappa_1 M + \kappa_2 N + \beta MN) P(M, N; t). \end{aligned} \quad (10.17)$$

Мы, конечно, должны потребовать, чтобы $P = 0$ при $M < 0$ или $N < 0$, или когда оба $M, N < 0$. Покажем теперь, что един-

ственное стационарное решение (10.17) — это

$$P(0, 0) = 1, \text{ а все другие } P = 0. \quad (10.18)$$

Таким образом, оба вида вымирают, даже если вначале они оба сосуществовали. Для доказательства положим $\dot{P} = 0$. Подставляя (10.18) в (10.17), убеждаемся, что при этом уравнение (10.17) действительно удовлетворяется. Кроме того, можно убедиться в том, что все точки (M, N) связаны по крайней мере одной линией с любой другой точкой (M', N') . Таким образом, данное решение единственно. Этот довольно удивительный результат (10.18) просто объяснить: из анализа на устойчивость нестохастических уравнений Лотки — Вольтерра известно, что траектории объявляются «нейтрально устойчивыми». Флуктуации вызывают переход с одной траектории на другую, соседнюю. Если случайным образом жертвы вымирают, то у хищников нет шанса выжить, т. е. $M = N = 0$ оказывается единственно возможным стационарным состоянием.

В природе такое действительно может происходить, хотя биологи указывают на другую возможность выживания жертв: животные-жертвы могут найти убежище, так что определенное минимальное число их выживает. Например, они могут перебраться в другие районы, куда хищники не могут попасть достаточно быстро, или в места, вообще недоступные хищникам.

10.3. Простая математическая модель процессов эволюции

В разд. 10.1 было представлено несколько математических моделей, из которых можно сделать некоторые общие выводы относительно динамики популяций. Эти популяции могут состоять из находящихся на высоком уровне развития растений или животных, равно как из бактерий и даже биологических молекул, «живущих» за счет определенных субстратов. Если попытаться применить эти уравнения к описанию эволюции, то обнаруживается, что они не учитывают одного важного обстоятельства. В процессе эволюции снова и снова появляются новые виды. Чтобы учесть это в уравнениях разд. 10.1, вспомним некоторые основные факты. Известно, что гены могут претерпевать мутации, образуя аллели. Мутации носят случайный характер, хотя частоту их появления можно увеличить за счет внешних факторов, например повышением температуры, ультрафиолетовым облучением, добавлением химических агентов и т. д. Вследствие мутации возникает определенное «мутационное давление», благодаря которому внутри данного вида постоянно возникают особи новых типов. Мы не будем здесь вдаваться в детали этого механизма и учитывать, что возникшие новые свойства сначала являются рецессивными и лишь позднее, после

нескольких этапов размножения, могут стать доминантными. Мы просто предположим, что случайным образом создаются новые типы особей некоторой популяции. Обозначим число этих особей через n_j . Поскольку они могут обладать новыми свойствами, в общем случае показатели их рождения и гибели отличаются от старых показателей. Новая популяция может возникать лишь при наличии флуктуаций, поэтому добавим в уравнения роста популяций флуктуирующие силы

$$\dot{n}_j = \gamma_j n_j - \delta_j n_j + F_j(t), \quad j = 1, 2, \dots \quad (10.19)$$

Свойства сил $F_j(t)$ зависят как от популяции, уже существовавшей до возникновения популяции, описываемой каким-либо из уравнений (10.19), так и от факторов окружающей среды. Система различных «подвидов» подвергается теперь воздействию «давления отбора». Чтобы учесть это, обратимся к рассмотрению разд. 10.1 и воспользуемся полученными там результатами. Поскольку условия окружающей среды (источники пищи и т. д.) остаются прежними, можно применить уравнения типа (10.11), (10.12). Обобщая их на случай N подвидов, питающихся за счет одного и того же источника пищи, получаем

$$\dot{n}_j = \alpha_j (g_0 - \sum g_i n_i) n_j - \kappa_j n_j + F_j(t). \quad (10.20)$$

Если скорость мутаций у определенных мутантов мала, то только те мутанты выживают, которые имеют наибольший коэффициент прироста α_j и наименьший коэффициент потерь κ_j , т. е. «наиболее приспособленные» мутанты. Можно рассмотреть еще более сложные уравнения, в которых размножение подвидов заменяется циклом $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow \dots \rightarrow A$. Такие циклы были постулированы для описания эволюции биомолекул. Замечательно то, что, как следует из материала этой книги, возникновение новых видов благодаря мутациям («флуктуирующей силе») и отбору («вынуждающей силе») можно рассматривать как аналог неравновесного фазового перехода второго рода (такого же, например, как в лазере).

10.4. Модель морфогенеза

При изучении данной книги читатель мог заметить, что в каждой дисциплине имеется своя «модельная» система, наиболее подходящая для изучения характерных свойств. Что касается морфогенеза, то одной из таких «систем» является гидра. Гидра — это организм, состоящий примерно из 100 000 клеток 15 различных типов. Размеры ее составляют несколько миллиметров. По своей длине гидра делится на несколько областей. В одном конце расположена «голова». Таким образом, животное имеет «полярную структуру». Типичный эксперимент с гид-

рой состоит в следующем: часть головной области удаляется и пересаживается на другое место. Тогда, если пересаженная часть находится близко к старой голове, *никакая* новая голова не образуется, или, другими словами, рост головы *подавляется*. С другой стороны, если пересадку производить на место, достаточно удаленное от старой головы, то благодаря *активации* клеток гидры трансплантатом образуется новая голова. Обще-признано, что агенты, вызывающие биологические процессы, подобные морфогенезу, — химические вещества. Таким образом, мы приходим к выводу, что имеются по крайней мере два типа химических веществ (или «реагентов»): *активаторы* и *ингибиторы*. В настоящее время имеются некоторые данные, подтверждающие, что эти активаторные и ингибиторные молекулы действительно существуют, и говорящие о том, что они собой представляют. Предположим, что оба вещества производятся в головной области гидры. Поскольку подавление (ингибция) происходит и на некотором расстоянии от первичной головы, ингибитор должен диффундировать. Это же должен делать и активатор, в противном случае он не смог бы влиять на клетки, окружающие трансплантат.

Попытаемся теперь сформулировать математическую модель. Обозначим концентрацию активатора через a , а концентрацию ингибитора через h . Основные черты можно проследить в рамках одномерной модели. Пусть a и h зависят от координаты x и времени t . Рассмотрим скорость изменения a : da/dt . Это изменение происходит по следующим причинам.

1) Генерация источником (головой):

$$\text{скорость образования: } \rho; \quad (10.21)$$

2) распад: $-\mu a$,

$$(10.22)$$

где μ — постоянная распада;

$$3) \text{ диффузия: } D_a \frac{\partial^2 a}{\partial x^2}, \quad (10.23)$$

где D_a — коэффициент диффузии.

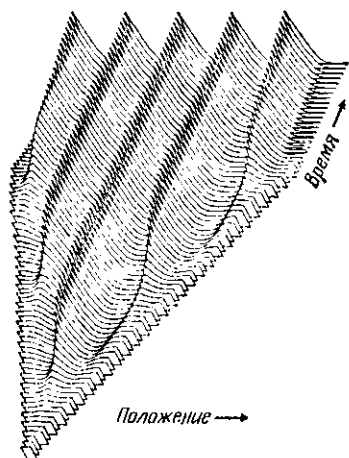
Кроме того, из изучения других биологических систем (например, слизевика, ср. разд. 1.1) известно, что могут иметь место автокаталитические процессы («стимулированная эмиссия»). В зависимости от вида процессов они могут быть описаны следующими скоростями образования:

$$k_1 a \quad (10.24)$$

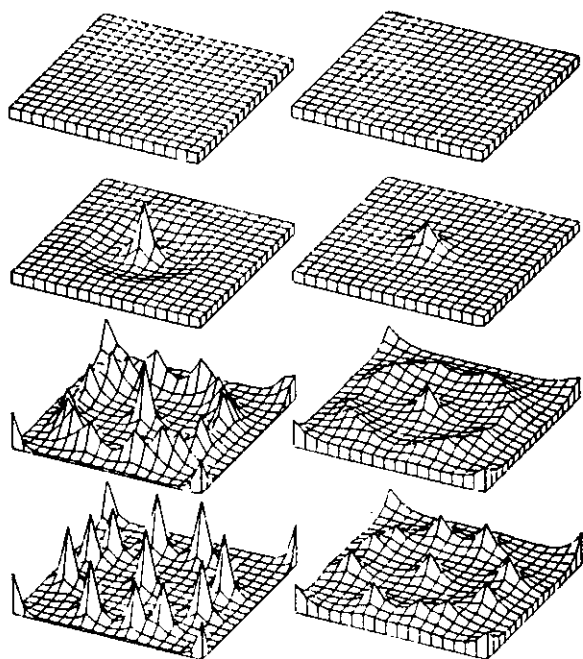
или

$$k_2 a^2 \text{ и т. д.} \quad (10.25)$$

Наконец, надо промоделировать эффект ингибции. Наиболее прямой путь, которым ингибитор может замедлить действие



Фиг. 10.2. Концентрации активатора как функции пространства и времени (решение получено на ЭВМ) (по работе [10.12]).



Фиг. 10.3. Результаты исследования модели морфогенеза. Левый вертикальный ряд: концентрация активатора как функция двух пространственных координат. Правый вертикальный ряд: то же самое для ингибитора. Горизонтальные ряды соответствуют различным моментам времени, которое растет при переходе от верхнего ряда к нижнему (решение получено на ЭВМ) (по работе [10.10]).

активатора, состоит в понижении концентрации a . Скорость ингибиции можно задать в виде

$$- ah. \quad (10.26)$$

Другая возможность состоит в том, что h уменьшает скорость автокатализа (10.24) или (10.25). Чем больше h , тем ниже скорость образования продукта (10.21) или (10.25). В случае (10.25) это приводит к выражению вида

$$k \frac{a^2}{h}. \quad (10.27)$$

Очевидно, что в выводе основных уравнений существует некий произвол, и окончательный выбор можно сделать лишь на основе детального химического анализа. Однако, отбирая типичные члены, такие, как (10.21)—(10.23), (10.27), можно получить уравнение для полной скорости изменения a

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \rho + k \frac{a^2}{h} - \mu a + D_a \frac{\partial^2 a}{\partial x^2}. \quad (10.28)$$

Обратимся теперь к выводу уравнения для ингибитора h . В нем определенно имеется член, описывающий распад со скоростью

$$- \nu h, \quad (10.29)$$

и член, описывающий диффузию

$$D_h \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}. \quad (10.30)$$

Теперь надо учесть различные процессы генерации. Гирер и Мейнхард, чьи уравнения мы здесь приводим, предложили (помимо других уравнений) задать скорость образования в виде

$$ca^2, \quad (10.31)$$

рассматривая генерацию посредством активатора. Тогда получаем

$$\frac{\partial h}{\partial t} = ca^2 - \nu h + D_h \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}. \quad (10.32)$$

Результаты аналитического исследования с использованием концепции параметра порядка будут представлены в разд. 10.5. Здесь мы приведем численные решения, применимые не только к случаю гидры, но и к другим примерам морфогенеза. Мы представим здесь два типичных результата: на фиг. 10.2 показано, как взаимодействие между активатором и ингибитором приводит к росту периодической структуры. На фиг. 10.3 показана получающаяся двумерная картина распределения концентрации активатора. Очевидно, что в обоих случаях ингибитор

подавил второй центр (новую голову гидры!) в областях, близких к первому центру (старой голове гидры!). При получении таких картин оказывается существенным, что h диффундирует сильнее, чем a , т. е. $D_h > D_a$. В рамках более продвинутых моделей типа активатор—ингибитор, можно смоделировать, например, структуру листьев.

В заключение отметим аналогию, которая, по-видимому, не случайная, а указывает на общий принцип, используемый природой. Так, действие нейронных цепей (например, в коре головного мозга) также управляется взаимодействием между короткодействующей активацией и далекодействующей ингибцией, но на этот раз активаторами и ингибиторами являются нейроны.

10.5. Параметры порядка и морфогенез

В этом разделе мы используем аналитические методы, развитые в разд. 7.6—7.8, для определения возникающих структур, описываемых уравнениями (10.28) и (10.32). Рассмотрим двумерный случай и соответственно заменим $\partial^2 a / \partial x^2$ и $\partial^2 h / \partial x^2$ на

$$\Delta a \equiv \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial y^2} \quad \text{и} \quad \Delta h \equiv \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2}.$$

Допустим, что ρ — контрольный параметр, который можно произвольно изменять, в то время как все другие постоянные заданы. Чтобы уменьшить число параметров, удобно перейти к новым переменным путем преобразования

$$\mathbf{x}' = \sqrt{\frac{v}{D_a}} \mathbf{x}, \quad t' = vt, \quad a' = \frac{k}{c} a, \quad h' = \frac{vc}{k^2}. \quad (10.33)$$

Тогда получим

$$\dot{a}' = \rho' \frac{a'^2}{h'} - \mu' a' + \Delta' a', \quad (10.34)$$

$$\dot{h}' = a'^2 - h' + D' \Delta' h', \quad (10.35)$$

где введены обозначения

$$\rho' = \frac{\rho c}{vk}, \quad \mu' = \frac{\mu}{v}, \quad (10.36)$$

$$D' = \frac{D_h}{D_a}. \quad (10.37)$$

В дальнейшем штрихи у переменных будем опускать. Стационарное однородное решение уравнений (10.34) и (10.35) имеет вид

$$a_0 = \frac{1}{\mu} (\rho + 1), \quad (10.38)$$

$$h_0 = a_0^2. \quad (10.39)$$

Для исследования на устойчивость проведем разложение относительно стационарных решений

$$q_1 = a - a_0, \quad q_2 = h - h_0. \quad (10.40)$$

Тогда (10.34) и (10.35) можно представить в виде [ср. (7.62)]:

$$\dot{\mathbf{q}} = K(\Delta) \mathbf{q} + \mathbf{g}(\mathbf{q}), \quad (10.41)$$

где K задается формулой

$$K(\Delta) = \begin{pmatrix} \mu \left(\frac{2}{\rho+1} - 1 \right) + \Delta & -\frac{\mu^2}{(\rho+1)^2} \\ \frac{2}{\mu}(\rho+1) & -1 + D\Delta \end{pmatrix}, \quad (10.42)$$

а $\mathbf{g}(\mathbf{q})$ содержит нелинейности. При линейном исследовании на устойчивость мы опускаем нелинейный член $\mathbf{g}(\mathbf{q})$ и предполагаем, что \mathbf{q} имеет вид

$$\mathbf{q} = \mathbf{O} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x} + \lambda t}. \quad (10.43)$$

Решение соответствующего характеристического уравнения дает

$$\lambda^\pm(k) = \frac{\alpha(k)}{2} \pm \sqrt{\frac{\alpha^2(k)}{4} - \beta(k)}, \quad (10.44)$$

где

$$\alpha(k) = -(D+1)k^2 + \frac{2\mu}{\rho+1} - \mu - 1, \quad (10.45)$$

$$\beta(k) = (k^2 + \mu)(1 + Dk^2) - \frac{2\mu Dk^2}{\rho+1}. \quad (10.46)$$

Условие первого появления неустойчивости типа мягкой моды имеет вид

$$\operatorname{Re} \{\lambda^+(k)\} \geq 0, \quad \operatorname{Im} \{\lambda^+(k)\} = 0. \quad (10.47)$$

Из (10.44) нетрудно установить, что (10.47) выполняется, если

$$(1) \alpha < 0 \quad \text{и} \quad (2) \beta \leq 0. \quad (10.48)$$

Из условия 1 получаем

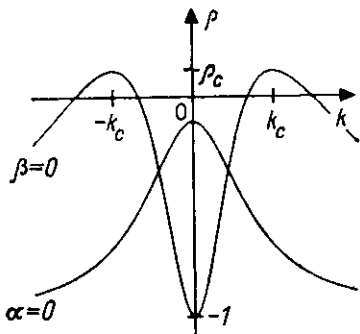
$$\rho > \frac{2\mu}{(\mu+1) + (D+1)k^2} - 1, \quad (10.49)$$

тогда как условие 2 дает

$$\rho \leq \frac{2\mu Dk^2}{(1 + Dk^2)(\mu + k^2)} - 1. \quad (10.50)$$

Зависимость критического значения ρ от волнового вектора \mathbf{k} (10.49) представлена на фиг. 10.4. Когда $\rho > \rho_c$, условие неустойчивости (10.47) не может быть выполнено,

При критическом ρ_c условие неустойчивости $\beta = 0$ может быть выполнено сначала при двух критических значениях k , именно $k = +k_c$ и $k = -k_c$. При $\rho = \rho_{\max}$ может выполняться условие $\alpha = 0$, которое указывает на возникновение неустойчивости типа жесткой моды. В дальнейшем анализе мы сконцентрируем внимание на случае мягкой моды. Значения k_c , ρ_c и ρ_{\max} равны



Фиг. 10.4. Кривые на k, ρ -плоскости, полученные из условий (10.45) = 0 и (10.46) = 0. Параметры D и μ фиксированы. Область выше кривой $\beta = 0$ определяет область устойчивости, ниже кривой — область неустойчивости. Поскольку условие $\alpha < 0$ выполняется для всех k , неустойчивость возникает при $\rho = \rho_c$.

$$k_c = \sqrt[4]{\frac{\mu}{D}}, \quad (10.51)$$

$$\rho_c = \frac{2\sqrt{\mu D}}{2 + \sqrt{\mu D} + \frac{1}{\sqrt{\mu D}}} - 1, \quad (10.52)$$

$$\rho_{\max} = \frac{\mu - 1}{\mu + 1}. \quad (10.53)$$

Чтобы сначала возникала неустойчивость типа мягкой моды, надо потребовать, чтобы было $\rho_c > \rho_{\max}$; отсюда следует, что

$$D > 2\mu + 1 + 2\sqrt{\mu + 1}. \quad (10.54)$$

Используя (10.37) и (10.36), получаем из (10.54), что коэф-

фициент диффузии для ингибитора должен быть на определенную величину больше, чем коэффициент диффузии активатора. Другими словами, чтобы возникла неосциллирующая структура, требуется наличие «дальнодействующей ингибиции» и «короткодействующей активации».

Предположим, что мы имеем *двумерный слой*, размеры которого равны L_1 и L_2 , и примем сначала периодические граничные условия. Детально разработанный метод решения описан в разд. 7.6—7.8, и мы повторим здесь только главные этапы этой процедуры. Допустим, что ρ близко к ρ_c .

Допустим, что q имеет вид [см. (7.72)]

$$q = \sum_j \mathbf{O}^j(\Delta) \sum_k \xi_k^j(t) e^{ik \cdot x}, \quad j = \pm. \quad (10.55)$$

Чтобы продемонстрировать основные черты, будем пренебрегать медленными изменениями и предположим, что ξ_k^j не зависит от x . Коэффициенты \mathbf{O}^j подчиняются уравнению

$$K(\Delta) \mathbf{O}^j(\Delta) = \lambda^j(\Delta) \mathbf{O}^j(\Delta). \quad (10.56)$$

Предположим также, что волновой вектор \mathbf{k} задается как

$$\mathbf{k} = 2\pi \begin{pmatrix} n/L_1 \\ m/L_2 \end{pmatrix}, \quad n, m = 0, \pm 1, \pm 2. \quad (10.57)$$

Поскольку решение должно быть действительным, потребуем, чтобы

$$\xi_k^l = \xi_k^{l*}, \quad \xi_0^+ = \xi_0^{-*}. \quad (10.58)$$

Подставляя (10.55) в уравнения (10.42) и умножая полученные уравнения слева на комплексно-сопряженное от $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ и на оператор, сопряженный оператору \mathbf{O}^j , после некоторых преобразований получим уравнения

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \lambda^j(\mathbf{k}) \right) \xi_k^l = (\text{Нелинейный член})_k^l. \quad (10.59)$$

Нелинейный член в правой части имеет вид

$$\begin{aligned} (\text{Нелинейный член})_k^l &= \sum_{j', j''} \sum_{k', k''} a_{kk'k''}^{j'j''} \xi_{k'}^{j'} \xi_{k''}^{j''} I_{k, k', k''} + \\ &+ \sum_{j', j'', j'''} \sum_{k', k'', k'''} b_{kk'k''k'''}^{j'j''j'''} \xi_{k'}^{j'} \xi_{k''}^{j''} \xi_{k'''}^{j'''} J_{kk', k'', k'''} \end{aligned} \quad (10.60)$$

где оставлены лишь существенные члены до третьего порядка включительно.

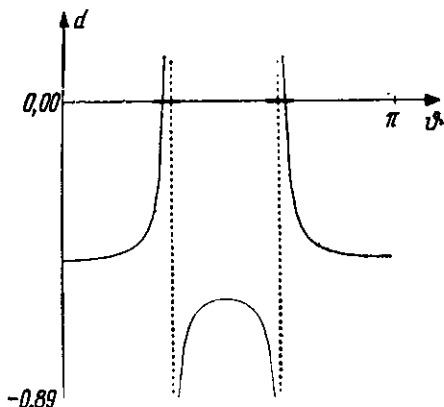
Интегралы I, J имеют вид

$$\begin{aligned} I_{k, k', k''} &= \frac{1}{L_1 L_2} \int_F d^2 \mathbf{x} e^{i(k' + k'' - k) \cdot \mathbf{x}} = \delta_{k, k' + k''} \quad (10.61) \\ J_{k, k', k'', k'''} &= \frac{1}{L_1 L_2} \int_F d^2 \mathbf{x} e^{i(k' + k'' + k''' - k) \cdot \mathbf{x}} = \delta_{k, k' + k'' + k'''} \end{aligned} \quad (10.62)$$

Исключаем устойчивые моды так, как это делалось в разд. 7.7. Большое преимущество использования «принципа подчинения» состоит в колоссальном уменьшении числа степеней свободы, поскольку мы оставляем теперь лишь неустойчивые моды с индексом $\mathbf{k} = \mathbf{k}_c$. Эти моды служат, как и повсюду в этой книге, *параметрами порядка*. Их кооперация или конкуренция, как мы сейчас покажем, определяют вид возникающих структур. Введем новые обозначения, заменяя вектор \mathbf{k}_c его модулем и углом φ , который этот вектор образует с фиксированной осью: $\xi_{\mathbf{k}_c} \rightarrow \xi_{k_c, \varphi}$. Угол φ изменяется от 0 до π . Получающееся в результате уравнение для параметра порядка имеет вид

$$\begin{aligned} \xi_{k_c, \varphi}^+ &= \lambda \xi_{k_c, \varphi}^+ + c \xi_{k_c, \varphi + \pi/3}^+ + \xi_{k_c, \varphi - \pi/3}^+ + \\ &+ \xi_{k_c, \varphi}^+ \sum_{\varphi'} d(|\varphi - \varphi'|) |\xi_{k_c, \varphi'}^+|^2; \end{aligned} \quad (10.63)$$

λ пропорциональна $(\rho - \rho_c)$, тогда как C можно считать не зависящим от ρ . Константы $d(|\varphi - \varphi'|)$, вычисленные на ЭВМ, представлены на фиг. 10.5. Уравнения (10.63) — это система



Фиг. 10.5. $d(\theta)$ как функция θ . В вычислениях область расходимости исключается так, как это показано пунктирными линиями. Эту процедуру можно обосновать построением волновых пакетов.

связанных уравнений для зависящей от времени функции $\xi_{k_c, \varphi}^+$. Их можно записать с помощью потенциала:

$$\dot{\xi}_{\varphi} = -\frac{\partial V}{\partial \xi_{\varphi}^*}, \quad \xi_{\varphi, k_c}^+ \equiv \xi_{\varphi}, \quad (10.64)$$

где потенциальная функция

$$V = -\sum_{\varphi=0}^{\pi} \left[|\lambda \xi_{\varphi}|^2 + \frac{c}{3} (\xi_{\varphi} \xi_{\varphi+\pi/3} \xi_{\varphi-\pi/3} + \text{Компл. сопр.}) + \frac{1}{2} |\xi_{\varphi}|^2 \sum_{\varphi'=0}^{\pi} d(|\varphi - \varphi'|) |\varphi_{\varphi'}|^2 \right]. \quad (10.65)$$

Можно допустить, как это делается повсюду в этой книге (см. в особенности разд. 8.13), что возникающая в конце концов структура определяется такой конфигурацией ξ , при которой потенциал V имеет локальный минимум. Таким образом, мы должны искать такие ξ , для которых

$$\frac{\partial V}{\partial \xi_{\varphi}^*} = 0 \quad (10.66)$$

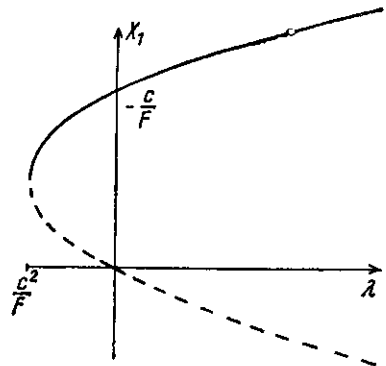
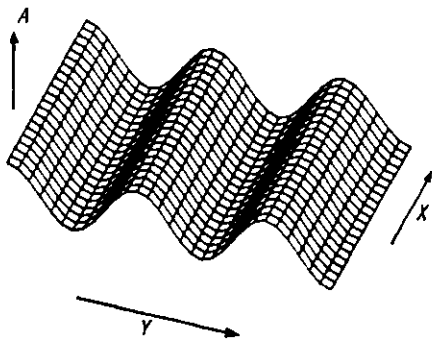
и

$$\sum_{\varphi, \varphi'} \frac{\partial V}{\partial \xi_{\varphi}^* \partial \xi_{\varphi'}} \delta \xi_{\varphi} \delta \xi_{\varphi}^* > 0 \quad (10.67)$$

система глобально устойчива, если

$$d(|\varphi - \varphi'|) < 0 \quad (10.68)$$

или если матрица $-d(|\varphi - \varphi'|)$ имеет лишь положительные собственные значения.



Фиг. 10.6. Структура цилиндрического типа.

Фиг. 10.7. Амплитуда x_1 как функция λ . Сплошная линия соответствует устойчивому решению, штриховая — неустойчивому.

Рассмотрим три типичных примера, которые сильно напоминают образование структур в гидродинамике (см. разд. 8.13).

1) Полностью однородное состояние, для которого все ξ_φ равны 0, полностью устойчиво при $\lambda < 0$.

2) Состояние с «цилиндрическими ячейками», если

$$\xi_{\varphi_1} = x_1, \quad (10.69)$$

$$\xi_\varphi = 0 \quad \text{при} \quad \varphi \neq \varphi_1, \quad (10.70)$$

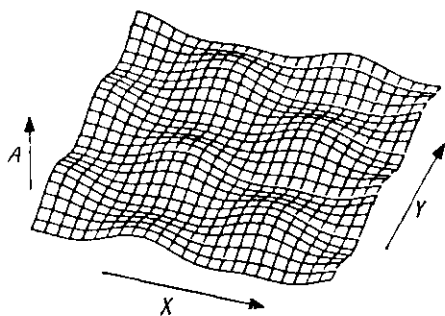
где

$$x_1^2 = -\frac{\lambda}{d(\pi)}. \quad (10.71)$$

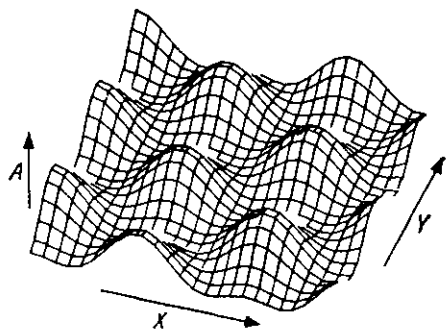
Угол φ_1 между осью цилиндра и фиксированной осью произволен, т. е. происходит нарушение симметрии по отношению к φ . Эта конфигурация локально устойчива при

$$\lambda > 0, \quad d(\theta \neq \pi) < d(\pi) < 0. \quad (10.72)$$

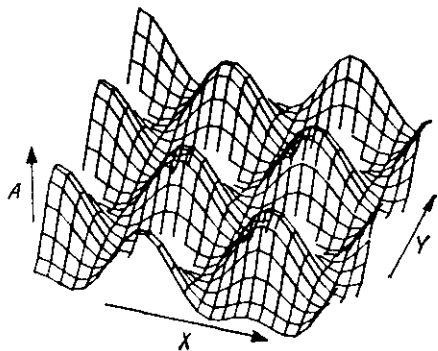
Вид получающейся пространственной структуры может быть определен подстановкой (10.69), (10.70) в (10.55). В настоящем рассмотрении и на соответствующих рисунках мы пренебрегаем влиянием подстраивающихся мод. Учет их приводил бы к небольшому заострению отдельных пиков. Соответствующая структура показана на фиг. 10.6.



Фиг. 10.8. — 10.10. Возникновение гексагональной пространственной структуры концентрации активатора (для трех последовательных моментов времени).



Фиг. 10.9.



Фиг. 10.10.

Другой интересный тип структуры — гексагональный — реализуется, когда минимум V достигается при

$$\xi_{\varphi_1} = \xi_{\varphi_1 + \pi/3} = \xi_{\varphi_1 - \pi/3} = x_1, \quad (10.73)$$

$$\xi_{\varphi} = 0 \quad \text{во всех других случаях;} \quad (10.74)$$

x_1 задается формулой

$$x_1 = \frac{1}{2F} (-c \pm \sqrt{c^2 - 4F\lambda}), \quad F = d(\pi) + 2d\left(\frac{\pi}{3}\right). \quad (10.75)$$

Эта конфигурация локально устойчива при

$$F_{\varphi} < F < 0, \quad cx_1 > \frac{c^2}{-F}.$$

$$F_{\varphi} = d(|\varphi - \varphi_1|) + d\left(|\varphi - \varphi_1 + \frac{\pi}{3}|\right) + d\left(|\varphi - \varphi_1 - \frac{\pi}{3}|\right). \quad (10.76)$$

Бифуркационная схема, соответствующая решению (10.75), показана на фиг. 10.7. Сплошная линия соответствует устойчивой конфигурации, штриховая — неустойчивой. Уравнения для параметра порядка позволяют определить не только стационарное, но также и нестационарное решения. Будем исходить из однородного решения, на которое налагается малая неоднородность вида (10.73), (10.74), и решим нестационарное уравнение (10.63).

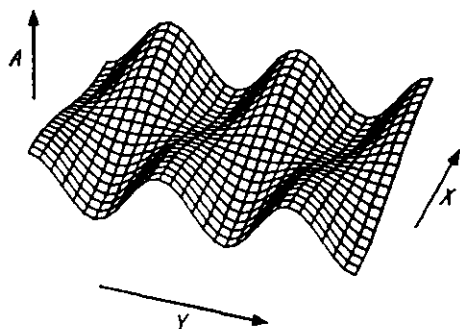
Получающиеся решения, описывающие пространственные структуры, представлены на фиг. 10.8—10.10. Это еще раз показывает, насколько полезны уравнения для параметра порядка.

В следующем примере мы рассмотрим решение нелинейных уравнений в прямоугольной области с беспотоковыми граничными условиями (вблизи точки неустойчивости). Раскладываем искомое решение по полной ортогональной системе функций, соответствующей беспотоковым граничным условиям, т. е. по функциям вида

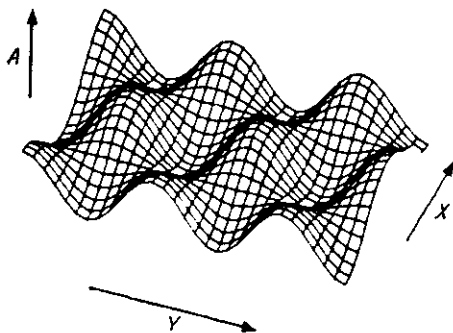
$$\cos k_x x \cdot \cos k_y y, \quad \text{где} \quad \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \end{pmatrix} = \pi \begin{pmatrix} n/L_1 \\ m/L_2 \end{pmatrix}. \quad (10.77)$$

Процедура полностью аналогична рассмотренной выше. k_x и k_y могут быть выбраны так, что значение $k_x^2 + k_y^2$ будет близко к k_c^2 . Когда $L_1 \approx L_2$, одновременно могут стать неустойчивыми несколько мод («вырождение»). Для простоты рассмотрим случай *одной* неустойчивой моды (т. е. $L_1 \neq L_2$). Амплитуда ее подчиняется уравнению

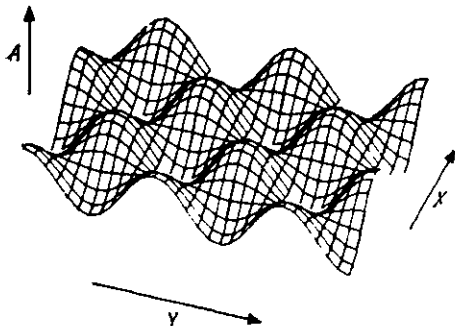
$$\dot{\xi} = \lambda\xi + d'\xi^3 \quad (10.78)$$



Фиг. 10.11. Концентрация активатора, соответствующая моде (10.77) при $k_x = \pi/L_1$ и $k_y = 5\pi/L_2$.



Фиг. 10.12. Концентрация активатора, соответствующая моде (10.77) при $k_x = 2\pi/L_1$ и $k_y = 5\pi/L_2$.



Фиг. 10.13. Концентрация активатора, соответствующая моде (10.77) при $k_x = 3\pi/L_1$ и $k_y = 5\pi/L_2$.

Решение этого нестационарного уравнения описывает рост пространственной структуры. Примеры получающихся в результате структур показаны на фиг. 10.11—10.13.

Последний пример, который мы рассмотрим, относится к случаю цилиндрических беспотоковых граничных условий. В этом случае мы вводим полярные координаты r и φ и заменяем плоские волны, которые использовались в разложении (10.55), цилиндрическими функциями вида $e^{im\varphi} J_m(kr)$, где $J_m(kr)$ — функция Бесселя.

Беспотоковое граничное условие требует, чтобы

$$\left. \frac{\partial}{\partial r} J_m(kr) \right|_{r=R} = 0. \quad (10.79)$$

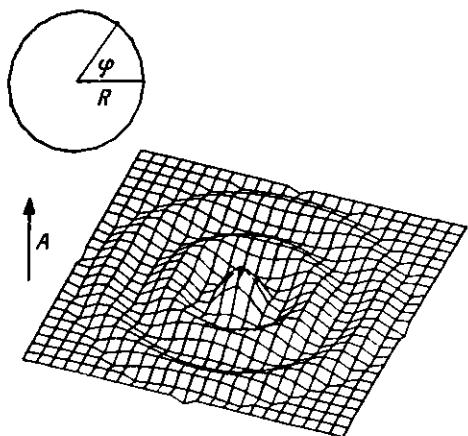
Это уравнение определяет последовательность значений k , для которых выполняется условие (10.79). Разложение q теперь имеет вид

$$q = \sum_l \sum_k \mathbf{O}'(k) \sum_m \times$$

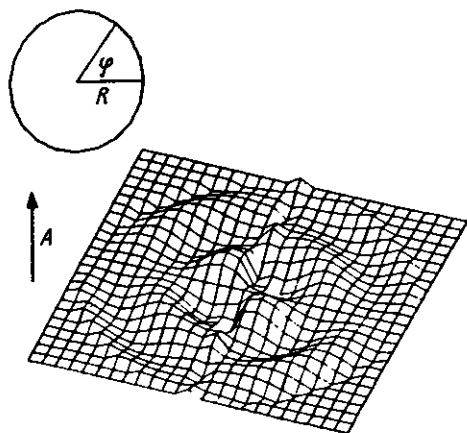
$$\times \xi_{k,m}^l(t) e^{im\varphi} J_m(kr). \quad (10.80)$$

Подставляя (10.80) в исходное уравнение (10.41), получаем уравнения для ξ . Принцип подчинения позволяет исключить устойчивые моды, и мы получаем, таким образом, уравнения лишь для параметра порядка. Поскольку последовательность значений k дискретная (учтем также симметрию), можно предполо-

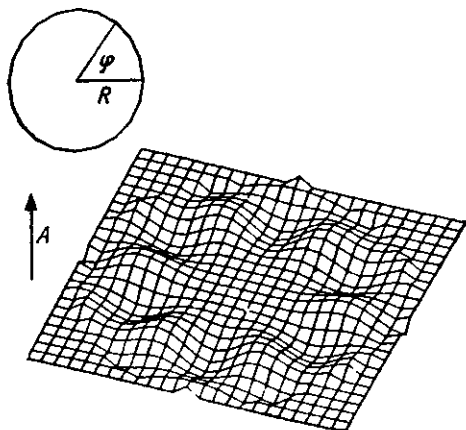
Фиг. 10.14. Концентрация активатора как функция пространственных координат при наличии цилиндрических беспотоковых граничных условий, описываемая осесимметричной функцией Бесселя с $m = 0$.



Фиг. 10.15. Концентрация активатора при наличии цилиндрических беспотоковых граничных условий, описываемая осесимметричной функцией Бесселя с $m = 1$.



Фиг. 10.16. Концентрация активатора при наличии цилиндрических граничных условий, описываемая осесимметричной функцией Бесселя с $m = 3$.



жить, что неустойчивой сначала становится лишь одна мода. Окончательное уравнение для параметра порядка снова имеет вид (10.78).

Заметное отличие возникает между случаями, когда неустойчивая мода (параметр порядка) имеет $m \equiv m_c = 0$ и когда $m_c \neq 0$. Если $m_c = 0$, то правая часть уравнения (10.78) должна быть дополнена членом, квадратичным по ξ , который отсутствует в случае $m_c \neq 0$. Как это хорошо известно из теории фазовых переходов (см. разд. 6.7), в первом случае ($m_c = 0$) мы получаем фазовый переход первого рода с резким переходом из однородного состояния в неоднородное и гистерезисными эффектами. Во втором случае ($m_c \neq 0$) — фазовый переход второго рода, и структура непрерывным образом возникает из однородного состояния при прохождении ρ через значение ρ_c . Несколько типичных примеров подобных структур представлены на фиг. 10.14—10.16.

В заключение отметим, что можно также учесть медленные изменения и флуктуации в полной аналогии со случаем неустойчивости Бенара (см. разд. 8.13 и 8.14), используя методы, развитые в этой книге. Сравнение рисунков, приведенных в данном разделе и разд. 10.3, выявляет их качественное сходство, но не точное совпадение. Причина в том, что аналитическое рассмотрение относится к «чистым случаям», в то время как численное решение учитывает искусственным образом введенные флуктуации. Как мы знаем, в последнем случае аналитический подход дал бы распределение вероятностей структур всего ансамбля, тогда как численное решение будет эквивалентным «элементарному событию», т. е. определенной реализации.

10.6. Некоторые замечания относительно моделей морфогенеза

Современное моделирование морфогенеза основано на идее о том, что благодаря диффузии и реакции определенных химических веществ образуется прообраз структуры («морфогенетическое поле»). Оно влияет на гены, вызывая дифференциацию клеток. Подобные модели частично подтверждаются прямыми наблюдениями определенных химических веществ, например фактора роста нейронов. С другой стороны, возможно, требуется рассмотреть также и другие механизмы межклеточной коммуникации, например контакты между клетками с использованием распознавания мест их расположения.

Помимо этого замечания, исходя из общих идей книги, можно сделать следующий важный вывод. С одной стороны, мы видели, что определенная модель, например в гидродинамике, а теперь и в морфогенезе, может давать совершенно различные

структуры в зависимости от индивидуальных параметров, от граничных условий и флуктуаций. С другой стороны, совершенно различные системы могут давать одни и те же структуры, например гексагональные. Вследствие этого мы приходим к выводу, что различные модели морфогенетических процессов могут приводить к одним и тем же окончательным структурам. В каждом случае существует полный класс моделей (дифференциальных уравнений), дающих одну и ту же структуру. По этой причине при изучении морфогенеза представляется весьма важным ввести другие критерии для того, чтобы решить, какой тип моделей адекватен с теоретической точки зрения. Это можно сделать, например, привлекая общие принципы, относящиеся к фундаментальным процессам, например принцип «дальнодействия ингибиции и близкодействия активации». Возможно, что в дальнейшем потребуются введение других механизмов или принципов. Кроме того, совершенно очевидно, что при выборе между различными механизмами важная роль отводится эксперименту.

В соответствии с общим духом настоящей книги представляется интересной следующая аналогия между фазовыми переходами.

Физическая система

Полная симметрия
Нарушение симметрии
Переход первого рода

Биологическая система

Тотипотентные клетки
Дифференциация клеток
Необратимое изменение

Эта аналогия указывает на то, что дифференциация клеток может происходить спонтанно, точно так же, как в ферромагнетике возникает спонтанная намагниченность. К сожалению, недостаток места не позволяет нам развить глубже эту, конечно же, интересную аналогию.

Дальнейшие этапы в развитии морфогенетических моделей должны включать рассмотрение морфогенеза нейронных цепей с учетом необратимого накопления информации, т. е. образования долговременной памяти или, в более широком смысле, процесса обучения и его связи с возникновением, например, химических структур в мозге.

В заключение сделаем следующее замечание. Мы все время подчеркивали существование глубоких аналогий между совершенно различными системами, и возникает искушение рассматривать биологические системы в полной аналогии с физическими или химическими системами, находящимися вдали от состояния теплового равновесия. Следует подчеркнуть, однако, важное различие. В то время как в рассматриваемых физических и

химических системах при выключении потока энергии или материи структура разрушается, в биологических системах значительная часть структуры сохраняется в течение заметного времени. Таким образом, представляется вероятным, что биологические системы соединяют в себе недиссипативные и диссипативные структуры. Кроме того, биологические системы направлены на определенные цели или задачи. Поэтому более приемлемо рассматривать их как функциональные структуры.

Дальнейшие исследования должны дать адекватные методы описания таких функциональных структур. Можно надеяться, однако, что идеи и методы, описанные в нашей книге, послужат первым шагом в этом направлении.

Социология: стохастическая модель формирования общественного мнения

Интуитивно представляется довольно очевидным, что процессы формирования общественного мнения, действия социальных групп и т. д. — кооперативные процессы. С другой стороны, строгое рассмотрение этих явлений кажется чрезвычайно трудной, если не невозможной задачей, поскольку действие индивидуумов определяется большим числом часто не известных причин. С другой стороны, мы видели, что по отношению к системам, состоящим из многих подсистем, существуют по крайней мере два уровня описания: на одном анализируют индивидуальную систему и ее взаимодействие с окружением, на другом описывают статистическое поведение, используя макроскопические переменные. Именно на этом уровне становится возможным количественное описание взаимодействующих социальных групп.

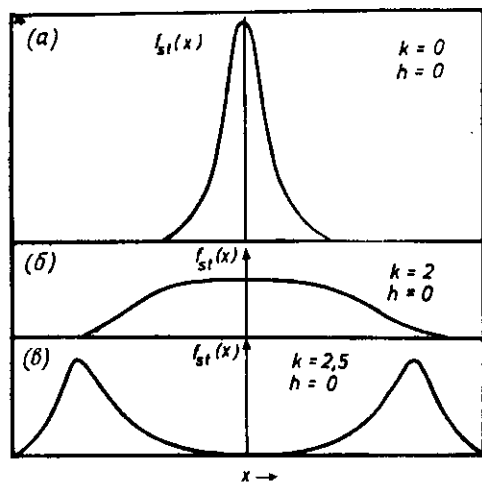
На первом этапе нужно найти макроскопические переменные, описывающие общество. Для этого мы должны обратиться к характерным понятиям, таким, как общественное мнение. Конечно, понятие «мнение» определено весьма неточно. Однако общественное мнение можно измерять посредством, например, опросов, выборов, и т. д. Для наибольшей ясности рассмотрим простейший случай, когда существуют только два типа мнений, обозначаемых знаками плюс и минус. Очевидно, что теперь параметр порядка — это число индивидуумов n_+ , n_- с соответствующими мнениями «+» и «-». Теперь мы вводим основное представление формирования общественного мнения — изменения числа индивидуумов n_+ , n_- как кооперативного эффекта, а именно формирование мнения индивидуума происходит под влиянием групп людей с тем же самым или противоположным мнением. Таким образом, мы предполагаем, что существует вероятность изменения мнения индивидуума с плюса на минус за единицу времени и наоборот. Обозначим соответствующие вероятности перехода как

$$p_{+-}(n_+, n_-) \text{ и } p_{-+}(n_+, n_-). \quad (11.1)$$

Нас интересует функция распределения вероятностей $f(n_+, n_-, t)$. Можно легко получить следующее кинетическое уравнение:

$$\frac{df[n_+, n_-; t]}{dt} = (n_+ + 1)p_{+-}[n_+ + 1, n_- - 1]f[n_+ - 1, n_- - 1; t] + (n_- + 1)p_{-+}[n_+ - 1, n_- + 1]f[n_+ - 1, n_- + 1; t] - \{n_+p_{+-}[n_+, n_-] + n_-p_{-+}[n_+, n_-]\}f[n_+, n_-; t]. \quad (11.2)$$

Основная трудность данной проблемы состоит, конечно, не в решении этого уравнения, которое можно найти стандартными



Фиг. 11.1. *а* — центрированное распределение для случая довольно частых изменений мнения (независимое принятие решений); *б* — распределение в переходной области между случаями независимого и сильно адаптированного принятия решений; *в* — «поляризация общественного мнения» в случае сильного взаимодействия между соседями. (По работе [11.1].)

методами, а в определении вероятности перехода. Подобно тому как это делается в физике, где не слишком много известно об индивидуальных взаимодействиях, для вывода p можно воспользоваться правдоподобными рассуждениями. Одна из таких возможностей — это следующая. Пусть скорость изменения мнения какого-либо индивидуума увеличивается из-за влияния группы индивидуумов с противоположным мнением и уменьшается из-за влияния группы с совпадающим мнением. Допустим далее, что существует определенный социальный климат, облегчающий процесс изменения мнения или затрудняющий процесс его формирования. Наконец, можно представить себе наличие внешнего влияния на отдельного индивидуума: пусть это

будет, например, информация, поступающая из-за границы и т. д. Нетрудно представить эти допущения в математической форме, если привлечь модель Изинга для ферромагнетика. Сопоставляя мнения «+» или «-» с направлением спина, по аналогии с моделью Изинга мы должны положить

$$p_{+-}[n_+, n_-] \equiv p_{+-}(q) = \nu \exp \left\{ \frac{-(Iq + H)}{\Theta} \right\} = \nu \exp \{-(kq + h)\},$$

$$p_{-+}[n_+, n_-] \equiv p_{-+}(q) = \nu \exp \left\{ \frac{-(Iq + H)}{\Theta} \right\} = \nu \exp \{+(kq + h)\},$$
(11.3)

где I — мера способности к адаптации по отношению к соседям, H — параметр предпочтительности мнения ($H > 0$ означает, что мнение «+» предпочитается мнению «-»), Θ — коллективный параметр общественного климата, в физике соответствующий параметру $k_B T$ (k_B — постоянная Больцмана, T — температура), ν — частота процессов «перескоков». Наконец,

$$q = (n_+ - n_-)/2n, \quad n = n_+ + n_-.$$
(11.4)

Для количественного рассмотрения (11.2) допустим, что социальные группы достаточно велики, так что q можно рассматривать как непрерывно меняющуюся переменную. Переходя в (11.2) к этой непрерывной переменной и положив

$$\omega_{+-}(q) \equiv n_+ p_{+-}[n_+, n_-] = n \left(\frac{1}{2} + q \right) p_{+-}(q),$$
(11.5)

$$\omega_{-+}(q) \equiv n_- p_{-+}[n_+, n_-] = n \left(\frac{1}{2} - q \right) p_{-+}(q),$$

преобразуем (11.2) в уравнение в частных производных (см., например, разд. 4.2). Решение его находится интегрированием

$$f_{st}(q) = c K_2^{-1}(q) \exp \left\{ 2 \int_{-1/2}^q \frac{K_1(y)}{K_2(y)} dy \right\},$$
(11.6)

где

$$K_1(q) = \nu \{ \text{sh}(kq + h) - 2q \text{ch}(kq + h) \},$$

$$K_2(q) = (\nu/n) \{ \text{ch}(kq + h) - 2q \text{sh}(kq + h) \}.$$
(11.7)

На фиг. 11.1 представлены эти результаты для случая, когда внешний параметр отсутствует. Как можно ожидать из известных данных по модели Изинга, имеются два типичных результата. Один соответствует высокотемпературному пределу — вследствие довольно частых перемен мнения получается одноцентровое распределение мнений. Если параметр социального

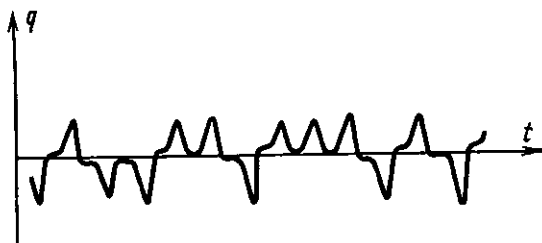
климата Θ уменьшается или если константа связи между индивидуумами увеличивается, то возникают две группы мнений, которые описывают хорошо известное явление «поляризации» общества. Следует отметить, что настоящая модель дает возможность объяснить, по крайней мере качественно, и другие процессы, например неустойчивую ситуацию, когда параметр социального климата приближается к критическому значению. В этом случае внезапно возникают две большие группы индивидуумов с определенным мнением, которые рассасываются медленно, и остается неясным, какая из групп («+» или «-») в конце концов победит. Если снова привлечь рассмотрение разд. 6.7, то становится очевидным, что здесь применимы такие понятия теории фазовых переходов, как критическое замедление (читатель может вспомнить продолжительность студенческой революции во Франции в 1968 г.), критические флуктуации и т. д. Такое статистическое описание, конечно, не может дать однозначные предсказания из-за стохастической природы рассмотренных процессов. Тем не менее такие модели, безусловно, весьма ценны для понимания общих свойств кооперативного поведения, даже когда речь идет о людях, хотя поведение одного какого-либо человека может быть чрезвычайно сложным и недоступным для математического описания. Совершенно очевидно, что рассмотренная здесь модель может служить для дальнейших последовательных обобщений.

Хаос

12.1. Что такое хаос?

Иногда ученые вводят в научный язык драматические слова, заимствованные из обиходного языка, приписывая им сугубо специальное значение. Мы уже встречались с подобным примером в теории «катастроф» Тома.

В этой главе мы познакомимся с термином «хаос». В специальном смысле это слово означает нерегулярное движение.



Фиг. 12.1. Пример хаотического изменения со временем величины q .

В предыдущих главах рассматривались многочисленные примеры *регулярных* движений, таких, например, как периодические колебания, или появления пиков через точно определенные интервалы времени. С другой стороны, в разделах, касающихся броуновского движения и случайных процессов, мы рассмотрели примеры, когда случайные, т. е. принципиально непредсказуемые причины, вызывали *нерегулярное* движение. Удивительно то, что движение, изображенное на фиг. 12.1, описывается полностью детерминистскими уравнениями. Чтобы охарактеризовать это новое явление, определим хаос как *нерегулярное движение, описываемое детерминистскими уравнениями*.

Правда, мы предупреждаем читателя, что в литературе имеются несколько иные определения хаоса и критерии того, как проверить факт его возникновения. Трудность состоит в основном в проблеме адекватного определения понятия

«нерегулярного движения». Например, сложное движение, представленное в виде суперпозиции движений с различными частотами, может до некоторой степени напоминать нерегулярное движение, и поэтому подобный случай следует исключать из класса хаотических движений. Мы возвратимся к этому вопросу в разд. 12.5, где будет рассмотрено типичное поведение корреляционной функции хаотических процессов. В настоящее время исследование «хаоса» во многих случаях проводится с помощью ЭВМ. Рассмотрим один из наиболее известных примеров, именно так называемую модель турбулентности Лоренца, в которой проявляются некоторые наиболее интересные свойства хаоса.

12.2. Модель Лоренца

В этом разделе мы рассмотрим причины введения модели Лоренца. Как оказывается, она представляет собой поучительную, но недостаточно реалистическую модель турбулентности в жидкости. Возможно, что она реализуется в лазерах и спиновых системах. Читатель, в большей степени интересующийся математической стороной дела, нежели физикой модели, может сразу переходить к чтению разд. 12.3.

Объяснение турбулентности жидкости — старая и все еще не решенная проблема. Уравнения Лоренца первоначально были сформулированы в качестве модели турбулентности. Вспомним в связи с этим некоторые результаты из разд. 8.12, относящиеся к неустойчивости Бенара. Там было показано, что в невозмущенном состоянии сначала одна мода, именно определенная вертикальная компонента поля скоростей, становится неустойчивой. (Мы пренебрегаем здесь вырождением мод по отношению к горизонтальному направлению.) Эта «мода» служит параметром порядка. Как можно подробно показать, она подчиняет себе, в частности, другие две моды, связанные с отклонениями температуры. Чтобы получить уравнения для амплитуд этих трех мод, разложим сначала компоненты поля скоростей в ряды Фурье

$$u_j(x, y, z) = \sum_{l, m, n=-\infty}^{\infty} u_j(l, m, n) \exp \{i(k_1 lx + k_2 my + n\pi z)\}. \quad (12.1)$$

Аналогичным образом разложим и поле температурных отклонений. Подставим затем эти выражения в уравнения Навье — Стокса (в приближении Буссинеска) и оставим только три члена

$$u_1(1, 0, 1) \equiv X, \quad \theta(1, 0, 1) \equiv Y, \quad \theta(0, 0, 2) \equiv Z. \quad (12.2)$$

После некоторых преобразований, используя соответствующим образом нормированные величины, получаем уравнения Лоренца

$$\dot{X} = \sigma Y - \sigma X, \quad (12.3)$$

$$\dot{Y} = -XZ + rX - Y, \quad (12.4)$$

$$\dot{Z} = X \cdot Y - bZ, \quad (12.5)$$

где $\sigma = \nu/\kappa'$ — число Прандтля (ν — кинематическая вязкость, κ' — температуропроводность), $r = R/R_c$ (где R — число Рэлея, R_c — критическое число Рэлея), $b = 4\pi^2/(\pi^2 + k_1^2)$. Если положить

$$X = \xi, \quad Y = \eta, \quad Z = r - \zeta,$$

то (12.3) — (12.6) принимают вид

$$\dot{\xi} = \sigma\eta - \sigma\xi, \quad \dot{\eta} = \xi\zeta - \eta, \quad \dot{\zeta} = b(r - \zeta) - \xi\eta. \quad (12.6)$$

Поразительно то, что уравнения, полностью эквивалентные уравнениям (12.3) — (12.5), получаются и в теории лазеров. Рассмотрим лазерные уравнения (8.94) — (8.96) для напряженности поля E , поляризации P и инверсии D (записанные в определенном образом выбранных единицах). Положив $(\partial/\partial x)E = 0$, ограничимся рассмотрением одномодового режима. Будем считать, что E и P — действительные величины, т. е. их фазы постоянны, что можно доказать вычислениями на ЭВМ. Тогда уравнения запишутся в виде

$$\dot{E} = \kappa P - \kappa E, \quad (12.7)$$

$$\dot{P} = \gamma ED - \gamma P, \quad (12.8)$$

$$\dot{D} = \gamma_{\parallel}(\Lambda + 1) - \gamma_{\parallel}D - \gamma_{\perp}\Lambda EP. \quad (12.9)$$

Эти уравнения идентичны уравнениям модели Лоренца в форме (12.6), что можно видеть из следующего сопоставления:

$$t \rightarrow t'\sigma/\kappa, \quad E \rightarrow \alpha\xi, \quad \text{где } \alpha = \{b(r-1)\}^{-1/2}, \quad r > 1, \\ P \rightarrow \alpha\eta, \quad D \rightarrow \zeta, \quad \gamma_{\parallel} = \kappa b/\sigma, \quad \gamma = \kappa/\sigma, \quad \Lambda = r - 1.$$

В частности, имеет место следующее соответствие:

<i>Проблема Бенара</i>	<i>Лазер</i>
σ : число Прандтля	$\sigma = \kappa/\gamma$
$r = \frac{R}{R_c}$ (R — число Рэлея)	$r = \Lambda + 1$
$b = \frac{4\pi^2}{\pi^2 + k_1^2}$, $k_1^2 = k_c^2 = \frac{\pi^2}{2}$	$b = \gamma_{\parallel}/\gamma$

Уравнения (12.6) описывают по крайней мере две неустойчивости, обнаруженные независимо в гидродинамике и в лазерах. При $\Lambda < 0$ ($r < 1$) лазерная генерация отсутствует (жидкость находится в покое), при $\Lambda \geq 0$ ($r \geq 1$) имеет место лазерная генерация (начинается конвективное движение), описываемая устойчивыми, стационарными решениями ξ , η , ζ .

Как будет показано в разд. 12.3, кроме этой хорошо известной неустойчивости, имеет место и другая, при условии

$$\text{Лазер: } \kappa > \gamma + \gamma_{\parallel} \quad \text{Жидкость: } \sigma > b + 1 \quad (12.10)$$

$$\begin{array}{ll} \text{и} & \text{и} \\ \Lambda > (\gamma + \gamma_{\parallel} + \kappa) \times & r > \sigma(\sigma + b + \\ \times (\gamma + \kappa)/\gamma(\kappa + \gamma - \gamma_{\parallel}) & + 3)/(\sigma - 1 - b). \end{array} \quad (12.11)$$

Эта неустойчивость приводит к возникновению нерегулярного движения, пример которого был показан на фиг. 12.1. Численные оценки по формулам (12.10) и (12.11) показывают, что число Прандтля должно быть столь большим, что для жидкостей эта ситуация оказывается нереальной. С другой стороны, в лазерах и мазерах, по-видимому, условия (12.10) и (12.11) могут быть выполнены. Далее, хорошо известно, что двухуровневые атомы, используемые в лазерах, математически эквивалентны спинам, следовательно, подобные явления можно также наблюдать в спиновых системах, взаимодействующих с электромагнитным полем.

12.3. Как возникает хаос

Поскольку переменные можно нормировать различным образом, уравнения Лоренца могут быть записаны в различных видах. В этом разделе мы используем следующую запись:

$$\dot{q}_1 = -\alpha q_1 + q_2, \quad (12.12)$$

$$\dot{q}_2 = -\beta q_2 + q_1 q'_3, \quad (12.13)$$

$$\dot{q}'_3 = \alpha_0 - q'_3 - q_1 q_2. \quad (12.14)$$

Эти уравнения получаются из уравнений (12.3)–(12.5), когда выбраны переменные

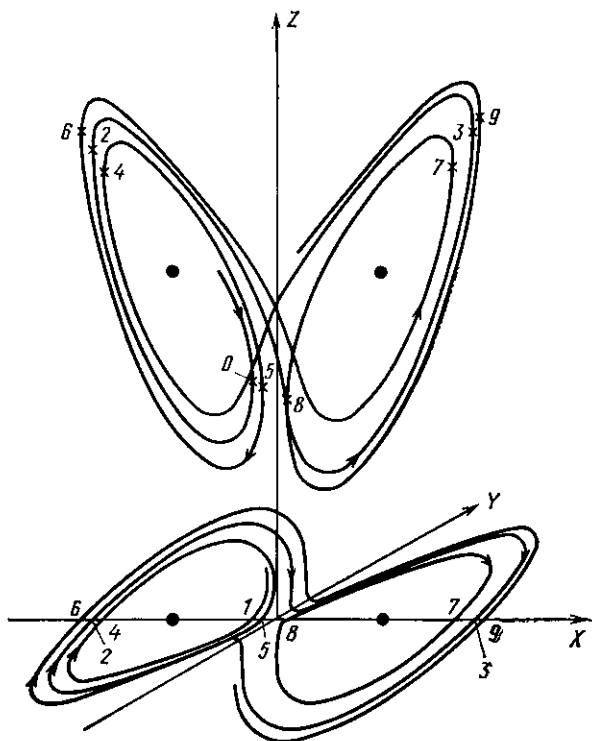
$$\begin{array}{l} X = b q_1; \quad Y = \frac{b^2}{\sigma} q_2; \quad Z = r - \frac{b^2}{\sigma} q'_3; \quad t = \frac{1}{b} t'; \\ \alpha = \frac{\sigma}{b}; \quad \alpha'_0 = r \frac{\sigma}{b^2}; \quad \beta = \frac{1}{b}. \end{array} \quad (12.15)$$

Стационарное решение (12.12) — (12.14) ($\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dot{q}_3 = 0$) имеет вид $q_1^0 = \pm \sqrt{\frac{1}{\alpha}(d'_0 - \alpha\beta)}$, $q_2^0 = \pm \sqrt{\alpha(d'_0 - \alpha\beta)}$, $q_3^0 = \alpha\beta$. (12.16)

Линейный анализ на устойчивость показывает, что стационарное решение становится неустойчивым при

$$d'_0 = \alpha^2\beta \frac{\alpha + 3\beta + 1}{\alpha - \beta - 1}. \quad (12.17)$$

В этой области решения (12.12) — (12.14) были найдены численными методами. Одномерный пример приведен на фиг. 12.1.



Фиг. 12.2. Вверху — проекция траекторий на $X-Z$ -плоскость. Внизу — проекция траекторий на $X-Y$ -плоскость. Точки соответствуют стационарным решениям (согласно М. Люкке).

Поскольку переменные X, Y, Z определяют трехмерное пространство, невозможно изобразить траекторию непосредственно. Однако фиг. 12.2 показывает проекции траектории на две плоскости. Очевидно, что изобразительная точка траектории (X, Y, Z или q_1, q_2, q_3) сначала совершает вращательное движение

в одной области пространства, а затем внезапно перескакивает в другую область, где снова возобновляет вращательное движение. Причину такого поведения, в основном ответственную за нерегулярное движение, можно объяснить следующим образом. Как известно из физики лазеров, члены в правых частях (12.12)—(12.14) имеют различную природу. Последние члены

$$q_2,$$

$$q_1 \cdot q_3',$$

$$- q_1 \cdot q_2$$

возникают благодаря когерентному взаимодействию между атомами и полем. Как известно, это когерентное взаимодействие подчиняется двум законам сохранения, именно закону сохранения энергии и закону сохранения полной длины так называемого вектора псевдоспина. Для нас в последующем будет интересно следующее. Законы сохранения дают две константы движения:

$$R^2 = q_1^2 + q_2^2 + q_3^2, \quad (12.18)$$

$$\rho^2 = q_2^2 + (q_3 - 1)^2, \quad (12.19)$$

где

$$q_3' + 1 = q_3, \quad d_0' + 1 = d_0. \quad (12.20)$$

С другой стороны, первые члены в (12.12)—(12.14)

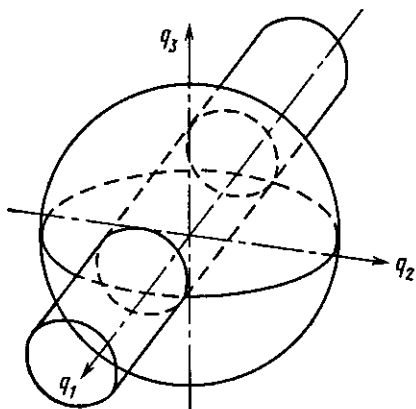
$$- \alpha q_1,$$

$$- \beta q_2,$$

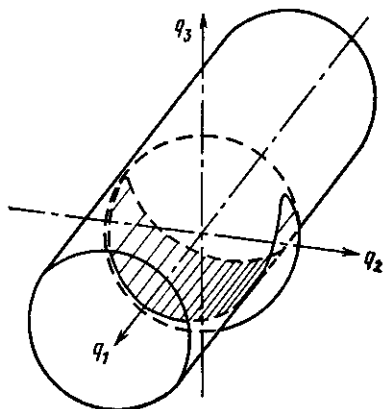
$$d_0 - q_3$$

обусловлены взаимодействием лазерной системы с резервуарами и описывают затухание и накачку, т. е. неконсервативные взаимодействия. Если сначала пренебречь этими членами в (12.12)—(12.14), то оказывается, что точка (q_1, q_2, q_3) должна двигаться таким образом, чтобы выполнялись законы сохранения (12.18) и (12.19). Поскольку (12.18) соответствует сфера в q_1, q_2, q_3 -пространстве, а (12.19)—цилиндру в q_1, q_2, q_3 -пространстве, изобразительная точка должна двигаться по пересечению цилиндра и сферы. В зависимости от относительной величины диаметров сферы и цилиндра существуют две возможности. На фиг. 12.3 имеются две четко разделенные траектории, в то время как на фиг. 12.4 изобразительная точка может передвигаться из одной области пространства в другую непрерывно. Если включить в рассмотрение члены с затуханием и накачкой, то законы сохранения (12.18) и (12.19) более не выполняются. Сферы и цилиндры начинают «дышать» (их ра-

диусы изменяются. При наличии такого движения, очевидно, становятся возможными обе ситуации фиг. 12.3 и 12.4. В ситуации, соответствующей фиг. 12.3, изобразительная точка описывает круги в одной области пространства, в то же время, когда становится реализуемой ситуация, соответствующая фиг. 12.4, она может перескочить в другую область. Скачок изобразительной точки очень чувствителен к тому, где она находилась в момент, когда условие скачка удовлетворилось. Это



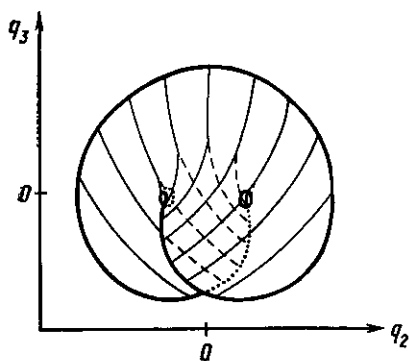
Фиг. 12.3. Пересечение сферы (12.18) и цилиндра (12.19) для случая $R > 1 + \rho$. Результат — две независимые траектории.



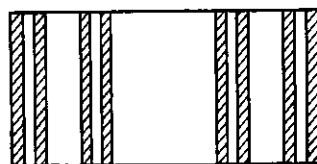
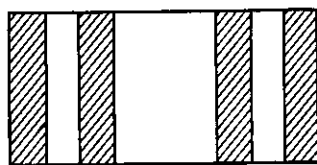
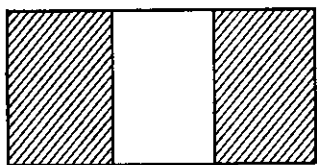
Фиг. 12.4. То же, что на фиг. 12.3, но в случае $R < 1 + \rho$. Результат — одна замкнутая траектория.

по крайней мере интуитивно объясняет возникновение кажущихся случайными скачков и, таким образом, возникновение случайного движения. Такая интерпретация полностью подтверждается кинофильмами, сделанными в нашем институте. Как будет показано ниже, радиусы цилиндра и сферы не могут расти неограниченно — существует определенная граница их значений. Это означает, что траектории должны лежать в конечной области пространства. Форма области была определена вычислениями на ЭВМ (она показана с пояснениями на фиг. 12.5).

Если начальные координаты изобразительной точки лежат вне этой области, то через некоторое время точка входит внутрь ее и никогда больше ее не покидает. Другими словами, изобразительная точка притягивается к этой области. Поэтому сама область называется аттрактором. В предыдущих главах мы уже встречались с другими примерами аттракторов. На фиг. 5.11, а показан устойчивый фокус, к которому сходятся все траектории. Точно так же мы уже видели, что траектории могут сходиться



Фиг. 12.5. Проекция поверхности Лоренца на q_2, q_3 -плоскость. Жирная сплошная линия и ее продолжения в виде пунктирных линий обозначают естественные границы. Изоплеты q_1 (т. е. линии постоянного значения q_1) как функции q_2 и q_3 показаны сплошными или штриховыми линиями (согласно Э. Н. Лоренцу).



Фиг. 12.6. Наглядное представление множества Кантора. Вся область сначала делится на три равные части. Левый и правый промежутки закрытые, а центральный промежуток открытый. Центральная часть удаляется, а два остающихся промежутка снова делятся каждый на три с последующим удалением середины. Процесс разделения остающихся закрытых промежутков на три части и удаления открытого промежутка в середине продолжается дальше. Если длина исходной области равна единице, то мера Лебега множества всех открытых промежутков равна $\sum_{n=1}^{\infty} 2^{n-1}/3^n = 1$.

Остающееся множество закрытых промежутков (т. е. $n = 1$ множество Кантора) имеет, следовательно, меру, равную нулю.

к предельному циклу. Лоренцев аттрактор обладает очень странным свойством. Когда мы выбираем траекторию и следуем за движущейся по ней изобразительной точкой, это похоже на то, как если бы мы втыкали иголку в моток пряжи: она не попадает на свою траекторию или асимптотически приближается к ней. Благодаря этому свойству лоренцев аттрактор называют странным аттрактором.

В математической литературе приводятся и другие примеры странных аттракторов. Любопытно отметить, что некоторые из странных аттракторов можно описывать так называемым множеством Кантора. Такое множество можно получить следующим образом (ср. фиг. 12.6). Возьмем полосу и вырежем из середины одну треть ее. Затем возьмем получающиеся полоски и вырежем в каждой из середины одну треть и будем продолжать этот процесс до бесконечности. К сожалению, мы не можем провести здесь более детального рассмотрения. Возвратимся к аналитической оценке величины лоренцева аттрактора. Основанные на законах сохранения (12.18) и (12.19) рассуждения, приведенные выше, наводят на мысль ввести новые переменные R , ρ и q_3 . Тогда исходные уравнения (12.12)–(12.14) преобразуются к виду

$$\frac{1}{2}(\dot{R}^2) = -\alpha + \beta - \alpha R^2 + (\alpha - \beta)\rho^2 + (2(\alpha - \beta) + \alpha_0) \times \\ \times q_3 - (1 - \beta)q_3^2, \quad (12.21)$$

$$\frac{1}{2}(\dot{\rho}^2) = -d_0 + \beta - \beta\rho^2 + (d_0 + 1 - 2\beta)q_3 - (1 - \beta)q_3^2, \quad (12.22)$$

$$\dot{q}_3 = d_0 - q_3 - (\pm)(R^2 - \rho^2 + 1 - 2q_3)^{1/2}((1 + \rho - q_3) \times \\ \times (q_3 - 1 + \rho))^{1/2}. \quad (12.23)$$

Уравнение для q_3 определяет области допустимых значений, поскольку подкоренные выражения должны быть положительны. Это дает

$$1 - \rho < q_3 < 1 + \rho; \quad R > 1 + \rho \quad (12.24)$$

(две отдельные траектории типа предельного цикла) и

$$1 - \rho < q_3 < \frac{1}{2}(R^2 - \rho^2 + 1); \quad R < 1 + \rho \quad (12.25)$$

(единственная замкнутая траектория). Более точные оценки R и ρ можно получить так. Найдем сначала формальное решение уравнения (12.21)

$$\rho^2(t) = \rho^2(0)e^{-2\beta t} - 2\frac{d_0 - \beta}{2\beta}(1 - e^{-2\beta t}) + 2\int_0^t e^{-2\beta(t-\tau)} g(q_3(\tau)) d\tau, \quad (12.26)$$

где

$$g(q_3(\tau)) = Aq_3 - Bq_3^2, \quad A = d_0 + 1 - 2\beta, \quad B = 1 - \beta. \quad (12.27)$$

Верхняя граница для правой части (12.26) находится заменой g его максимальным значением

$$g_{\max}(q_3) = \frac{A^2}{4B}, \quad (12.28)$$

что дает

$$\rho^2(t) \leq \rho_M^2(t) = \rho^2(0) e^{-2\beta t} + \frac{(d_0 - 1)^2}{4\beta(1 - \beta)} (1 - e^{-2\beta t}). \quad (12.29)$$

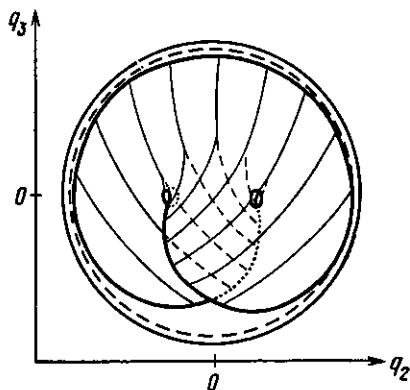
При $t \rightarrow \infty$ (12.29) сводится к

$$\rho_M^2(\infty) = \frac{d_0 - 1}{4\beta(1 - \beta)}. \quad (12.30)$$

Аналогичным образом можно рассмотреть и (12.20), что после некоторых преобразований приводит к оценке

$$R_M^2(\infty) = \frac{1}{4\alpha\beta(1 - \beta)} \{ \alpha d_0^2 + (\alpha - \beta) \times \\ \times [2(2\beta - 1)d_0 + 1 + 4\beta(\alpha - 1)] \}. \quad (12.31)$$

Эти оценки исключительно хороши, что подтверждается численными примерами. Например, было найдено (с использованием



Фиг. 12.7. Графическое представление оценок (12.30) и (12.31). Фигура в центре — лоренцев аттрактор (ср. фиг. 12.5); внешний круг, проведенный сплошной линией, — оценочный максимальный радиус цилиндра ρ_M (12.30); штриховая круговая линия — проекция цилиндра (12.29) с радиусом ρ_L , построенная из условия, что в определенный момент времени $q_1 = q_2 = 0$ и $q_3 = d_0$.

параметров, взятых из оригинальной работы Лоренца) следующее:

а) наша оценка

$$\rho_M(\infty) = 41,03.$$

$$R_M(\infty) = 41,89;$$

б) непосредственное интегрирование уравнений Лоренца для некоторых моментов времени

$$\begin{aligned}\rho &= 32,84, \\ R &= 33,63;\end{aligned}$$

в) оценка с использованием поверхности Лоренца (ср. фиг. 12.7)

$$\begin{aligned}\rho_L &= 39,73, \\ R_L &= 40,73.\end{aligned}$$

12.4. Хаос и нарушение принципа подчинения параметру порядка

Значительная часть анализа, проведенного в данной книге, основана на адиабатическом исключении быстро релаксирующих переменных. Эту технику мы назвали также принципом подчинения параметру порядка. Принцип подчинения позволил нам значительно сократить число степеней свободы. В этом смысле можно показать, что уравнения Лоренца следуют из этого принципа. Однако здесь возникает вопрос: можно ли применить этот принцип снова к самим уравнениям Лоренца? Действительно, как мы видели выше, при определенном пороговом значении (12.11) стационарное решение становится неустойчивым. В подобной точке неустойчивости можно провести различие между устойчивыми и неустойчивыми модами. Оказывается, что при этом две моды становятся неустойчивыми, в то время как одна мода остается устойчивой. Поскольку анализ такого поведения занимает много места, мы опишем лишь важные новые моменты. Уравнение для устойчивой моды имеет следующую структуру:

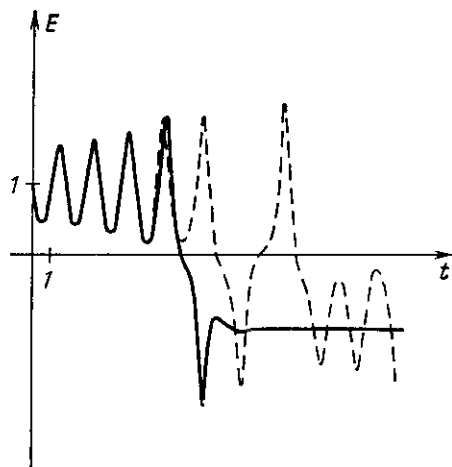
$$\dot{\xi}_s = (-|\lambda_s| + \xi_u)\xi_s + \text{Нелинейные члены}, \quad (12.32)$$

где ξ_u — амплитуда неустойчивой моды.

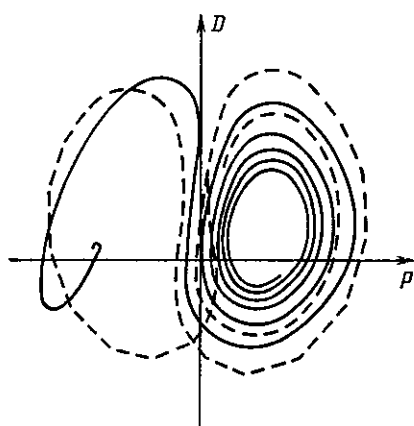
Как отмечалось на стр. 236, принцип адиабатического исключения остается справедливым лишь в том случае, когда параметр порядка остается достаточно малым, так что

$$|\xi_u| \ll |\lambda_s|. \quad (12.33)$$

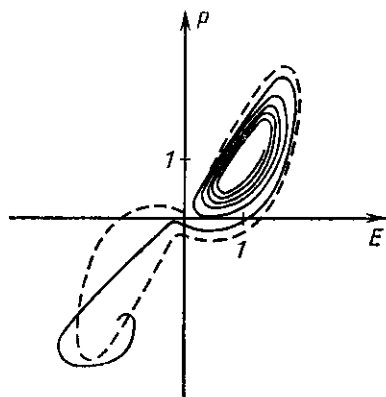
Сравним теперь численные результаты, полученные непосредственным решением уравнений Лоренца на ЭВМ (фиг. 12.8), с результатами, полученными с помощью принципа подчинения (фиг. 12.9). (См. также фиг. 12.10.) Мы видим, что в определенные интервалы времени существует довольно хорошее согласие, затем внезапно возникает расхождение результатов, которое сохраняется для всех более поздних моментов времени.



Фиг. 12.8. Хаотическая зависимость напряженности поля $E (\sim q_1)$ одной лазерной моды от времени. Сплошная линия — решение, использующее принцип «подчинения» штриховая — непосредственное интегрирование уровней Лоренца. Сначала сплошная кривая совпадает с штриховой, затем принцип «подчинения» перестает быть справедливым.



Фиг. 12.9. Та же физическая ситуация, что и на фиг. 12.2. Изображены проекции траекторий на плоскость P (поляризация) — D (инверсия). Сплошная линия: решение, основанное на принципе подчинения штриховая — непосредственное интегрирование уравнений Лоренца. Первоначально сплошная кривая совпадает с штриховой.



Фиг. 12.10. То же, что и на фиг. 12.8, но теперь траектории проектируются на плоскость $E - P$.

Детальный анализ показывает, что это расхождение возникает тогда, когда нарушается условие (12.33). Кроме того, оказывается, что в моменты времени изобразительная точка попросту перескакивает из одной области в другую в том смысле, который обсуждался в разд. 12.3. Таким образом, мы видим, что, когда принцип подчинения перестает выполняться, возникает хаотическое движение и первоначально устойчивая мода более не подчиняется параметру порядка и становится неустойчивой.

12.5. Корреляционная функция и частотное распределение

В предыдущих разделах было дано по крайней мере интуитивное представление о том, как выглядит хаотическое движение. Опшем теперь его свойства более точно. Для этого воспользуемся корреляционной функцией переменных $q(t)$, взятых в момент t и в более поздний момент $t + t'$. С корреляционными функциями мы уже встречались в разделах, посвященных теории вероятностей. Там мы обозначили их как

$$\langle q(t) q(t + t') \rangle. \quad (12.34)$$

В рассматриваемом случае случайного процесса нет, и поэтому процедура усреднения, обозначаемая скобками, кажется бессмысленной, но мы можем заменить (12.34) операцией усреднения по времени в виде

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T q(t) q(t + t') dt, \quad (12.35)$$

где сначала проводится интегрирование по t , а затем временной интервал $2T$ делается очень большим, точнее T устремляется к бесконечности. Взяв в качестве первого примера чисто периодическое движение, такое, как

$$q(t) = \sin \omega_1 t, \quad (12.36)$$

сразу же получим

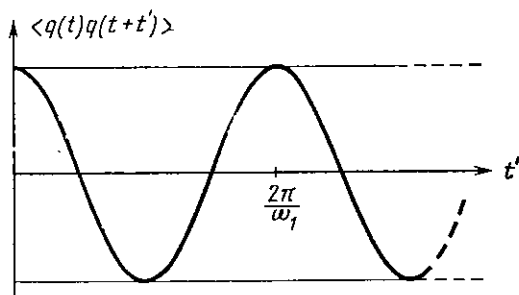
$$(12.35) = \frac{1}{2} \cos \omega_1 t'. \quad (12.37)$$

Мы снова получили периодическую функцию (фиг. 12.11). Легко можно убедиться в том, что и движение, описываемое функцией, содержащей несколько частот, такой, как

$$q(t) = \sin \omega_1 t \sin \omega_2 t, \quad (12.38)$$

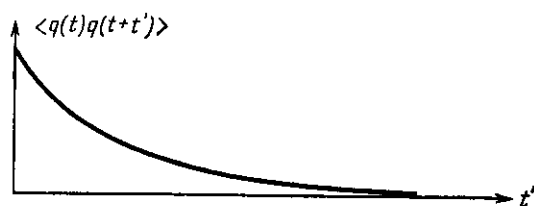
снова приводит к осциллирующей, незатухающей эволюции функции (12.34). С другой стороны, если рассматривать чисто

диффузионный процесс, в основе которого лежат случайные события (мы изучали его в главе, посвященной теории вероятности), то следует ожидать, что при $t' \rightarrow \infty$ (12.34) стремится к нулю (фиг. 12.12). Поскольку мы хотим описывать хаотиче-



Фиг. 12.11. Корреляционная функция периодической функции $q(t)$ [см. (2.36)] в зависимости от времени t' . Амплитуда не затухает даже при $t' \rightarrow \infty$.

ское движение как кажущееся случайным (хотя и вызываемое детерминированными силами), в качестве критерия хаотического движения можно принять зависимость, показанную на



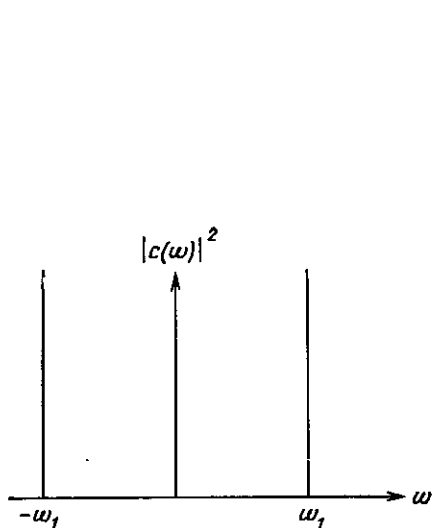
Фиг. 12.12. Корреляционная функция в зависимости от t' для случая хаотического движения. Отметим, что этот случай может включать осцилляторное поведение, но корреляционная функция должна стремиться к нулю при $t' \rightarrow \infty$.

фиг. 12.12. Другой критерий получается, если представить $q(t)$ в виде интеграла Фурье

$$q(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} c(\omega) e^{i\omega t} d\omega. \quad (12.39)$$

Подставляя это выражение в (12.36), получаем два бесконечно высоких пика в точках $\omega = \pm\omega_1$ (фиг. 12.13). Точно так же (12.38) привело бы к появлению пиков при $\omega = \pm\omega_1, \pm\omega_2$. С другой стороны, хаотическому движению должна соответ-

ствовать широкая непрерывная полоса частот. На фиг. 12.14 показан пример частотного распределения интенсивности в модели Лоренца. В настоящее время широко применяются оба критерия, использующие (12.34) и (12.39) так, как это описано выше, в особенности в тех случаях, когда анализ основан на



Фиг. 12.13. Спектр интенсивности $|c(\omega)|^2$ в случае чисто периодического изменения $q(t)$ [ср. (12.36)]. Он состоит лишь из двух пиков на частотах $-\omega_1$ и ω_1 . В многочастотном случае имеется целый набор пиков.



Фиг. 12.14. Спектр интенсивности $|c\omega|^2$ для лоренцева аттрактора (из работы [12.12]). Оригинальный график из этой работы состоит из набора очень близко расположенных точек. Здесь этот чертеж относится к переменной $q_2(t)$ модели Лоренца, рассматриваемой в тексте.

машинных решениях исходных уравнений движения. Для полноты следует упомянуть и о третьем методе, основанном на так называемом отображении Пуанкаре. Описание этого метода, однако, выходит за рамки данной книги.

12.6. Другие примеры хаотического движения

Хаотическое движение в указанном выше смысле встречается в различных дисциплинах. В прошлом веке Пуанкаре обнаружил нерегулярное движение, изучая проблему трех тел. Хаос также наблюдается в электронных приборах — факт, известный радиоинженерам. Он имеет место в осцилляторе Ганна, регулярный пиковый режим которого мы рассмотрели в разд. 8.14. Недавно были развиты многочисленные модели химических

реакций, в которых проявляется хаос. Он может возникать в моделях, построенных как с учетом диффузии, так и без нее. Хаотическое поведение возникает также и в химических реакциях при модуляции их извне, например с помощью фотохимических эффектов. Другой пример — уравнения, описывающие изменения магнитного поля Земли, которые также обнаруживают характер хаотического движения. В определенных моделях, описывающих динамику популяций, получаются совершенно нерегулярные изменения популяций. Похоже, что такие модели могут объяснить определенные флуктуации в популяциях насекомых. Некоторые из этих моделей в особенности просты. Наиболее известная модель описывается одной переменной q , которая выбирается не в виде непрерывной функции времени, а как величина, принимающая значения в дискретные моменты времени, нумеруемые индексом n . Уравнение для этой переменной имеет вид

$$q_{n+1} = a_n q_n (1 - q_n).$$

Можно ожидать, что модели хаотических изменений могут также найти применения в экономике и даже в социологии, хотя, как это ни странно, до сих пор ни одной теории подобного типа, кажется, не было опубликовано. Ввиду широкой распространенности явлений хаоса, что становится все более очевидным, можно задать вопрос: почему же биологические системы определенно способны избегать хаоса? Эта проблема, по мнению автора, все еще не решена.

Некоторые замечания исторического характера и перспективы

Читатель, следивший за ходом изложения материала книги, скорее всего был удивлен теми глубокими аналогиями, которые проявляются между совершенно различными системами при прохождении ими точки возникновения неустойчивости. Неустойчивость, вызываемая изменением внешних параметров, приводит в конце концов к образованию новой макроскопической пространственно-временной структуры системы. Детальный механизм этого во многих случаях можно описать следующим образом. Вблизи точки возникновения неустойчивости можно провести различие между устойчивым и неустойчивым коллективными движениями (модами). Устойчивые моды подстраиваются под неустойчивые и могут быть исключены. В общем случае это приводит к колоссальному уменьшению числа степеней свободы. Остающиеся неустойчивые моды служат в качестве параметров порядка, определяющих макроскопическое поведение системы. Получающиеся в результате такой процедуры уравнения для параметров порядка можно сгруппировать в несколько универсальных классов, описывающих динамику параметров порядка. Некоторые из этих уравнений сильно напоминают уравнения, описывающие фазовые переходы первого и второго рода в равновесных физических системах. Однако возникают и новые классы, например описывающие пульсации или колебания. Совместное действие стохастических и детерминированных «сил» («случайность» и «необходимость») переводит системы из исходных состояний в новые, определяя при этом, какие именно новые конфигурации реализуются (см. стр. 380).

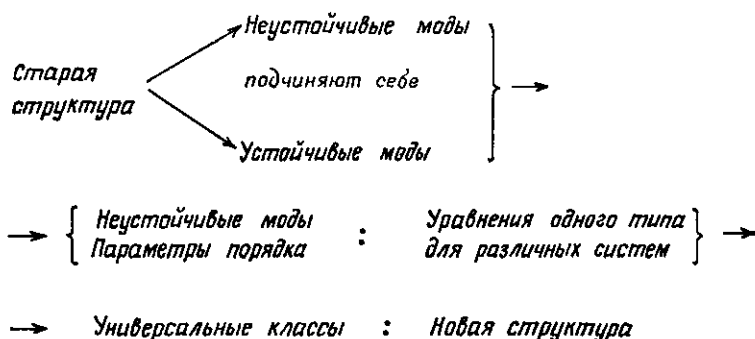
Первое, детальное рассмотрение в явном виде аналогии фазовых переходов в сильно неравновесных системах (лазер) и в равновесных системах (сверхпроводники, ферромагнетики) было проведено независимо в работах Грэхэма и Хакена (1968, 1970 г.) и Де Джорджио и Скулли (1970 г.)¹⁾. Сейчас, когда

¹⁾ Подробный список литературы к этому разделу см. на стр. 399.

мы, зная об этих аналогиях, просматриваем литературу, мы вспоминаем слова Кохеле: «Нет ничего нового под солнцем». Действительно, теперь становится ясно, что подобные аналогии присущи, в более или менее явном виде, многим явлениям (и теоретическим рассмотрением).

Общая схема

Старая структура → *Неустойчивость* → *Новая структура*
Изменение внешних параметров



Основатель общей теории систем (в приложении к биологии) фон Берталанфи отмечал определенные аналогии между замкнутыми и открытыми системами. В частности, он ввел понятие «текущего равновесия». В других исследованиях, например в области вычислительной техники, подобные аналогии использовались при описании работы различных приборов. Соответствующие математические результаты были получены Ландауэром в работах по туннельным диодам (1961, 1962 г.) и в работах по теории лазера — автором этой книги (1964 г.). Если в первом случае рассматривался определенный тип переключений, аналогичных, например, движению блоховских стенок в ферромагнетиках, результаты последней работы послужили основанием для сравнения порога лазерной генерации с фазовым переходом второго рода.

Зная об аналогии лазерной генерации с фазовым переходом, ряд авторов установили сходные аналогии в других областях, в частности для неравновесных химических реакций (Шлегль, Николис, Нитцан, Ортолева, Росс, Гардинер, Уоллс и др.).

Изучение моделей химических реакций, приводящих к образованию пространственных или временных структур, было инициировано фундаментальной работой Тюринга (1952 г.) и продолжено Пригожиным и его сотрудниками. В этих последних работах центральную роль сыграла концепция производства избыточной энтропии, которая дает возможность обнаружения неустойчивости. Изложенный нами синергетический подход в нескольких отношениях выходит за рамки этих концепций. В частности, в нем исследуются явления, происходящие в точке неустойчивости, и определяется та новая структура, которая возникает за порогом неустойчивости. Некоторые из этих проблем можно рассмотреть с помощью математической теории бифуркации или, в более общем случае, с помощью теории динамических систем. Однако во многих случаях, рассмотренных в нашей книге, мы сталкивались с еще более сложными проблемами. Например, мы должны были учесть флуктуации, медленные изменения и др. Таким образом, синергетика установила связь между теорией динамических систем и статистической физикой. Без сомнения, уже началось слияние этих двух дисциплин.

После осмысления того факта, что кооперация многих подсистем какой-либо системы подчиняется одним и тем же принципам независимо от природы подсистем, я пришел к выводу, что пришло время искать и исследовать эти аналогии на стыках различных наук — в той области исследований, которую я назвал синергетикой. Начав с физики, я перешел затем к рассмотрению проблем химии и биологии. Совсем недавно мои коллеги, занимающиеся другими вопросами, обратили мое внимание на то, что в таких дисциплинах, как социология и экономика, уже давно использовали понятие синергетики, например когда изучали совместную работу различных частей коллектива с точки зрения повышения производительности труда. Уже сейчас ясно, что, образно выражаясь, мы пробиваем туннель с двух сторон большой горы, которая до сих пор разделяла различные области исследования, в особенности «точные» и «неточные» науки.

Можно надеяться, что синергетика внесет свой вклад в дело взаимопонимания и дальнейшего развития кажущихся совершенно различными наук. Дальнейшие возможные направления развития синергетики можно проиллюстрировать примером, взятым из филологии. Используя терминологию синергетики, можно сказать, что языки — это параметры порядка, подчиняющие себе подсистемы, которыми являются люди. В течение жизни индивидуума язык изменяется лишь незначительно. После рождения индивидуум изучает язык, т. е. подчиняется ему, и в течение жизни вносит свой вклад в сохранение языка. Целый

ряд фактов, относящихся к языкам, таких, как конкуренция, флуктуации (изменение значения слов и т. д.), теперь можно исследовать в рамках синергетики.

Синергетика — очень молодая наука, и в ней нас ожидают еще много удивительных результатов. Я надеюсь, что данная книга, как введение в эту область, будет стимулировать дальнейшие исследования и поможет читателю сделать свои собственные открытия в области изучения свойств самоорганизующихся систем.

Основная и дополнительная литература и комментарии

Поскольку в синергетике область исследований связана с многими дисциплинами, попытка дать здесь более или менее полный список литературы кажется безнадежной. Такой список занял бы целый том. Поэтому мы ограничились ссылками только на те работы, которые были использованы при написании данной книги. В дополнение цитируется ряд работ, статей или книг, которые могут оказаться полезными для дальнейшего изучения предмета. Основная и дополнительная литература приводятся по главам.

1. Цель

- 1.1. *Haken H., Graham R., Synergetik-Die Lehre vom Zusammenwirken, Umschau, 6, 191 (1971).*
- 1.2. Cooperative effects, Progress in Synergetics, ed. H. Haken, North Holland, Amsterdam, 1974.
- 1.3. Cooperative effects in systems far from thermal equilibrium and in non-physical systems, ed. H. Haken, Rev. Mod. Phys., 47, 67 (1975).
- 1.4. Synergetics, A Workshop, Proc. of a workshop on Synergetics, Elmau, 1977, ed. H. Haken, Springer, Berlin — Heidelberg — New York, 1977.

Пригожиным и его школой развит совершенно отличный от нашего подход к описанию образования структур в физических, химических и биохимических системах. Он изложен в книге

- 1.5. *Glansdorff P., Prigogine I., Thermodynamic Theory of Structure, Stability and fluctuations, Wiley, New York, 1971. (Имеется перевод: Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структур, устойчивости и флуктуаций. — М.: Мир, 1972.)*

Пригожиным введен термин «диссипативные структуры». Гленсдорф и Пригожин основывают свою работу на принципах производства энтропии и используют принцип избыточного производства энтропии как средство для нахождения возникающей неустойчивости. Применимость такого критерия была критически исследована в работе

- 1.5. *Landauer R., Phys. Rev., A12, 636 (1975).*

Подход Гленсдорфа — Пригожина не дает ответа на вопрос о том, что происходит в точке неустойчивости и как определять или классифицировать возникающие новые структуры. Важное направление исследований брюссельской школы — модели химических реакций — по своему духу близко к синергетике (ср. гл. 9).

1.1. Порядок и беспорядок. Несколько типичных примеров

Литература по термодинамике приводится в списке к разд. 3.4, литература по фазовым переходам — в списке к разд. 6.7. Детальные ссылки по лазерам, динамике жидкости, химии и биологии см. в списках литературы к соответствующим главам этой книги. Поскольку пример со слизевиком здесь более не рассматривается, мы приводим несколько ссылок, относящихся к этому вопросу:

- 1.6. *Bonner J. T., Barkley D. S., Hall E. M., Konijn T. M., Manson J. W., O'Keefe G., Wolf P. B.*, *Develop. Biol.*, **20**, 72 (1969).
- 1.7. *Konijn T. M.*, *Advanc. Cycl. Nucl. Res.*, **1**, 17 (1972).
- 1.8. *Robertson A., Drage D. J., Cohen M. N.*, *Science*, **175**, 333 (1972).
- 1.9. *Gerisch G., Hess B.*, *Proc. nat. Acad. Sci. (Wash)*, **71**, 2118 (1974).
- 1.10. *Gerisch G.*, *Naturwissenschaften*, **58**, 430 (1971).

В данном разделе использованы иллюстрации из следующих книг и статей:

- 1.11. *Kittel C.*, *Introduction to Solid State Physics*, Wiley Inc., New York, 1956. (Имеется перевод: *Киттель Ч.* Введение в физику твердого тела. — М.: Физматгиз, 1957.)
- 1.12. *Feynman R. P., Leighton R. B., Sands M.*, *The Feynman Lectures on Physics*, Vol. 2, Addison-Wesley, 1956. (Имеется перевод: *Фейнман Р., Лейтон Р. и др.* Фейнмановские лекции по физике. Вып. 7. Физика сплошных сред. — М.: Мир, 1966.)
- 1.13. *Chandrasekhar S.*, *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*, Clarendon Press, Oxford, 1961.
- 1.14. *Busse F. H., Whitehead J. A.*, *Journ. Fluid. Mech.*, **47**, 305 (1971).
- 1.15. *Scorer R.*, *Clouds of the World*, Lothia Publ. Co., Melbourne, 1972.
- 1.16. *McLulich D. A.*, *Fluctuations in the Numbers of Varying Hare*, Univ. of Toronto Press, Toronto, 1937.

2. Вероятность

По теории вероятностей имеется много учебников. Приведем несколько из них:

- 2.1. *Kai Lai Chung*, *Elementary Probability Theory with Stochastic Processes*, Springer, Berlin — Heidelberg — New York, 1974.
- 2.2. *Feller W.*, *An Introduction to Probability Theory and Its Applications*, Wiley, New York, Vol. 1, 1968; Vol 2, 1971. (Имеется перевод 1-го издания: *Феллер В.* Введение в теорию вероятностей и ее приложения. В 2-х томах. — М.: Мир, 1964, 1966.)
- 2.3. *Dubés R. C.*, *The Theory of Applied Probability*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1968
- 2.4. *Прохоров Ю. В., Розанов Ю. А.* Теория вероятностей. — М.: Наука, 1967.
- 2.5. *Doob J. L.*, *Stochastic Processes*, Wiley, New York — London, 1953. (Имеется перевод: *Дуб Дж.* Вероятностные процессы. — М.: ИЛ, 1956.)
- 2.6. *Loève M.*, *Probability Theory*, D van Nostrand, Princeton, N. J. — Toronto — New York — London, 1963.
- 2.7. *Mises R., von*, *Mathematical Theory of Probability and Statistics*, Academic Press, New York — London, 1964.

3. Информация

3.1. Некоторые основные идеи

Этим вопросам посвящены следующие монографии:

- 3.1. *Brillouin L.*, Science and Information Theory, Academic Press, New York — London, 1962. (Имеется перевод: Бриллюэн Л. Наука и теория информации. — М.: Физматгиз, 1960.)
 - 3.2. *Brillouin L.*, Scientific Uncertainty and Information, Academic Press, New York — London, 1964. (Имеется перевод: Бриллюэн Л. Научная неопределенность и информация. — М.: Мир, 1966.)
- Теория информации основана в работах:
- 3.3. *Shannon C. E.*, A Mathematical Theory of Communication, Bell System Techn. Journ., 27, 370—423, 623—656 (1958).
 - 3.4. *Shannon C. E.*, Bell System Techn. Journ., 30, 50 (1951).
 - 3.5. *Shannon C. E.*, *Weaver W.*, The Mathematical Theory of Communication, Univ. of Illin. Press, Urbana, 1949.

Некоторые концепции, связанные с информацией и приростом информации (*H*-теорема!), были введены в работе:

- 3.6. *Boltzman L.*, Vorlesungen über Gastheorie, Vol. 1, 2, Leipzig, 1896, 1898.

3.2.* Прирост информации: иллюстрация

Определения и детальное рассмотрение см. в работах:

- 3.7. *Kullback S.*, Ann. Math. Stat., 22, 79 (1951).
- 3.8. *Kullback S.*, Information Theory and Statistics, Wiley, New York (1951).

Здесь мы следуем конспекту наших лекций.

3.3. Информационная энтропия и ограничения

Изложение этой главы следует работам:

- 3.9. *Jaynes E. T.*, Phys. Rev., 106, 4, 620 (1957); Phys. Rev., 108, 171 (1957).
- 3.10. *Janes E. T.* В сб.: Delaware Seminar in the Foundations of Physics, Springer, Berlin — Heidelberg — New York, 1967.

Ранее рассмотрение этих вопросов см. в работе:

- 3.11. *Elsasser W.*, Phys. Rev., 52, 987 (1937); Zs. Phys., 171, 66 (1968).

3.4. Пример из физики: термодинамика

Подход, использованный в этой главе, идейно основан на работах Джейнса, цитированных в списке литературы к разд. 3.3. Другие подходы изложены в учебниках:

- 3.12. *Ландау Л. Д.*, *Лифшиц Е. М.* Статистическая физика. Часть 1. — М.: Наука, 1976.
- 3.13. *Becker R.*, Theory of Heat, Springer, Berlin — Heidelberg — New York, 1967.
- 3.14. *Münster A.*, Statistical Thermodynamics, Vol. 1, Springer, Berlin — Heidelberg — New York, 1969.
- 3.15. *Callen H. B.*, Thermodynamics, Wiley, New York, 1960.
- 3.16. *Landsberg P. T.*, Thermodynamics, Wiley, New York, 1961.
- 3.17. *Kubo R.*, Thermodynamics, North Holland, Amsterdam, 1968. (Имеется перевод: Кубо Р. Термодинамика. — М.: Мир, 1970.)
- 3.18. *Brenig W.*, Statistische Theorie der Wärme, Springer, Berlin — Heidelberg — New York, 1975.

- 3.19. *Weidlich W.*, Thermodynamic und statistische Mechanik. Akademische Verlagsgesellschaft, Wiesbaden, 1976.

3.5.* *Элементы термодинамики необратимых процессов*

В следующей работе установлена интересная и полезная связь между термодинамикой необратимых процессов и теорией цепей:

- 3.20. *Katchalsky A., Curran P. F.*, Nonequilibrium Thermodynamics in Biophysics, Harvard University Press, Cambridge, Mass., 1967.

Современное изложение, включающее полученные недавно результаты, см. в книге:

- 3.21. *Schnakenberg J.*, Thermodynamic Network Analysis of Biological Systems, Universitext, Springer, Berlin — Heidelberg — New York, 1977.

Термодинамика необратимых процессов подробно изложена в книгах:

- 3.22. *Prigogine I.*, Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes, Thomas, New York, 1955. (Имеется перевод: *Пригожин И.* Введение в термодинамику необратимых процессов. — М.: ИЛ, 1960.)

- 3.23. *Prigogine I.*, Non-equilibrium Statistical Mechanics, Interscience, New York, 1962. (Имеется перевод: *Пригожин И.* Неравновесная статистическая механика. — М.: Мир, 1964.)

- 3.24. *De Groot S. R., Mazur P.*, Non-equilibrium Thermodynamics, North Holland, Amsterdam, 1962. (Имеется перевод: *Де Гроот С., Мазур П.* Неравновесная термодинамика. — М.: Мир, 1964.)

- 3.25. *Haase R.*, Thermodynamics of Irreversible Processes, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1969.

- 3.26. *Зубарев Д. Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. — М.: Наука, 1971.

Рассмотрение, проведенное в настоящей книге автором, публикуется впервые.

3.6. *Энтропия — проклятие статистической механики?*

Субъективистские и объективистские аспекты проблемы обсуждаются, например, в работе:

- 3.27. *Jaynes E. T.*, Information Theory, в сб.: Statistical Physics, Brandeis Lectures, Vol. 3, W. A. Benjamin, New York, 1962.

Крупнозернистое усреднение обсуждается в книге:

- 3.28. *Münster A.*, в кн.: Encyclopedia of Physics, ed. S. Flügge, Vol. III/2: Principles of Thermodynamics and Statistics, Springer, Berlin — Göttingen — Heidelberg, 1959.

Концепция энтропии обсуждается во всех учебниках по термодинамике; см. литературу к разд. 3.4.

4. Случайность

4.1. Модель броуновского движения

Детальное рассмотрение броуновского движения проведено, например, в работах:

- 4.1. Selected Papers on Noise and Statistical Processes, ed. N. Wax, Dover Publ. Inc., New York, 1954.

Этот сборник содержит статьи С. Чандрасекара, Г. Уленбека и Л. Орнштейна, Ван Мин Чена и Г. Уленбека и М. Каца.

- 4.2. *Soong T. T.*, Random Differential Equations in Science and Engineering, Academic Press, New York, 1973.
- 4.2. *Модель случайного блуждания и соответствующее кинетическое уравнение*
См., например:
- 4.3. *Кас М.*, Am. Math. Month., **54**, 295 (1946).
- 4.4. *Bartlett M. S.*, Stochastic Processes, Univ. Press, Cambridge, 1960.
- 4.3.* *Совместная вероятность и траектории. Марковские процессы. Уравнение Чепмена — Колмогорова. Интегралы по траекториям*
См. литературу по стохастическим процессам, гл. 2, и кроме этого:
- 4.5. *Стратонович П. Л.* Избранные вопросы в теории флуктуаций в радиотехнике. — М.: Сов. радио, 1961.
- 4.6. *Lax M.*, Rev. Mod. Phys., **32**, 25 (1960); **38**, 358 (1965); **38**, 541 (1966).
Интегралы по траекториям рассматриваются в нашей книге (разд. 6.6). Соответствующие ссылки можно найти в литературе к этому разделу.
- 4.4.* *Как использовать совместные распределения вероятностей. Моменты. Характеристическая функция. Гауссовы процессы*
Та же литература, что и к разд. 4.3.
- 4.5. *Кинетическое уравнение*
Кинетическое уравнение играет важную роль не только в описании классических стохастических процессов, но также и в квантовой статистике. Ниже приводится ряд книг по квантовой статистике:
- 4.7. *Pauli H.*, Probleme der Modernen Physik. Festschrift zum 60. Geburtstage Sommerfelds A., ed. by Debye P. (Hirzel, Leipzig, 1928).
- 4.8. *Van Hove L.*, Physica, **23**, 441 (1957).
- 4.9. *Nakajima S.*, Progr. Theor. Phys., **20**, 948 (1958).
- 4.10. *Zwanzig R.*, Journ. Chem. Phys., **33**, 1338 (1960).
- 4.11. *Montroll E. W.*, в сб.: Fundamental Problems in Statistical Mechanics, compiled by Cohen E. D. G., North Holland, Amsterdam, 1962.
- 4.12. *Argyres P. N., Kelley P. L.*, Phys. Rev., **134**, A98 (1964).
Недавно опубликован обзор:
- 4.13. *Haake F.*, в серии: Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 66, Springer, Berlin — Heidelberg — New York, 1973, p. 98.
- 4.6. *Точное стационарное решение кинетического уравнения для систем в детальным равновесием*
Случай многих переменных см. в работе:
- 4.14. *Haken H.*, Phys. Lett., **46A**, 443 (1974); Rev. Mod. Phys., **47**, 67 (1975), где проводится дальнейшее рассмотрение этого вопроса, случай одной переменной — в работе:
- 4.14а. *Landauer R. J.*, Journ. Appl. Phys., **33**, 2209 (1962).
- 4.8.* *Метод Кирхгофа решения кинетического уравнения*
- 4.15. *Kirchhoff G.*, Ann. Phys. Chem., Bd. LXXII, 1847, Bd. 12, S. 32.
- 4.16. *Kirchhoff G.*, Poggendorffs Ann. Phys., **72**, 495 (1844).
- 4.17. *Bott R., Mayberry J. P.*, Matrices and Trees, Economic Activity Analysis, Wiley, New York, 1954.

- 4.18. King E. L., Altmann C., *Jorn. Phys. Chem.*, **60**, 1375, 1956.
 4.19. Hill T. L., *Journ. Theor. Biol.*, **10**, 442 (1966).

Очень элегантный вывод решения Кирхгофа недавно был выполнен В. Вейдlichem (W. Weidlich, Stuttgart).

- 4.20. Schnakenberg I., *Rev. Mod. Phys.*, **48**, 571 (1976).
 4.21. Keizer J., *On the Solutions and the Steady States of a Master Equation*, Plenum Press, New York, 1972.

4.10. *Смысл случайных процессов. Стационарное состояние, флуктуации, время возвращения*

Урновая модель Эренфестов рассмотрена в работе:

- 4.22. Ehrenfest P., Ehrenfest T., *Phys. Zs.*, **8**, 311 (1907),

а также в работе:

- 4.23. Münster A., в кн.: *Encyclopedia of Physics*, ed. by Flügge, Vol. III/2; *Principles of Thermodynamics and Statistics*, Springer, Berlin—Göttingen—Heidelberg, 1959.

5. Необходимость

Динамические системы и связанные с ними вопросы рассмотрены в монографиях:

- 5.1. Боголюбов Н. Н., Митропольский Ю. А. *Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний*. 2-е изд., испр. и доп. — М.: Физматгиз, 1958.
 5.2. Minorski N., *Nonlinear Oscillations*, Van Nostrand, Toronto, 1962.
 5.3. Андронов А. А., Витт А. А., Хайкин С. Э. *Теория колебаний*. 2-е изд., испр. и доп. — М.: Физматгиз, 1959.
 5.4. Sattinger D. H., в серии: *Lecture Notes in Mathematics*, Vol. 309, *Topics in Stability and Bifurcation Theory*, eds. A. Dold., B. Eckman., Springer, Berlin—Heidelberg—New York, 1973.
 5.5. Hirsch M. W., Smale S., *Differential Equations, Dynamical Systems, and Linear Algebra*, Academic Press, New York—London, 1974.
 5.6. Немыцкий В. В., Степанов В. В. *Качественная теория дифференциальных уравнений*. 2-е изд., испр. и доп. — М.: Физматгиз, 1949.

Многие основные идеи развиты в работах:

- 5.7. Poincaré H., *Oeuvres*, Vol. 1, Gauthier—Villars, Paris, 1928.
 5.8. Poincaré H., *Sur l'équilibre d'une masse fluide animée d'un mouvement de rotation*, *Acta Math.*, **7** (1885).
 5.9. Poincaré H., *Figures d'équilibre d'une masse fluide* (Paris, 1903).
 5.10. Poincaré H., *Sur le problème de trois corps et les équations de la dynamique*, *Acta Math.*, **13** (1890).
 5.11. Poincaré H., *Les méthodes nouvelles de la mécanique céleste*, Gauthier-Villars, Paris, 1892—1899.

5.3.* Устойчивость

- 5.12. La Salle J., Lefshetz S., *Stability by Ljapunov's Direct Method with Applications*, Academic Press, New York—London, 1961. (Имеется перевод: Ла-Салль Ж., Лефшец С., *Исследование устойчивости прямым методом Ляпунова*. — М.: Мир, 1964.)
 5.13. Hahn W., *Stability of Motion*. В серии: *Die Grundlehren der mathematischen Wissenschaften in Einzeldarstellungen*, Bd. 138, Springer, Berlin—Heidelberg—New York, 1967.

Упражнения к данному разделу см.:

5.14. *Schlögl F.*, Zs. Phys., 243, 303 (1973).

5.4. *Примеры и упражнения на бифуркацию и устойчивость*

5.15. *Lotka A.*, Proc. Nat. Acad. Sci. (Wash.), 6, 410 (1920).

5.16. *Volterra V.*, Leçons sur la théorie mathématiques de la lutte pour la vie, Paris, 1931.

5.17. *Goel N. S., Maitra S. C., Montroll E. W.*, Rev. Mod. Phys., 43, 231 (1971).

5.18. *Van der Pol B.*, Phil. Mag., 43, 6, 700 (1922); 2, 7, 978 (1926); 3, 7, 65 (1927).

5.19. *Davis H. T.*, Introduction to Nonlinear Differential and Integral Equations, Dover Publ. Inc. New York, 1962.

5.5.* *Классификация статических неустойчивостей, или элементарный подход к теории катастроф Тома*

5.20. *Thom R.*, Structural Stability and Morphogenesis, Benjamin W. A., Reading, Mass., 1975.

Чтение книги Тома требует хорошей математической подготовки. Наше изложение для «пешехода» дает возможность просто подойти к классификации катастроф, проведенной Томом. Однако наша интерпретация этих результатов в приложении к естественным наукам, например к биологии, совершенно отлична от томовской.

6. Случайность и необходимость

6.1. *Уравнение Ланжевена: пример*

Общие вопросы рассмотрены в работах:

6.1. *Стратонович Р. Л.* Избранные вопросы теории флуктуаций в радиотехнике. — М.: Сов. радио, 1961.

6.2. *Lax M.*, Rev. Mod. Phys., 32, 25 (1960); 38, 358, 541 (1966); Phys. Rev., 145, 110 (1966).

6.3. *Haken H.*, Rev. Mod. Phys., 47, 67 (1975).

где приведены дополнительные ссылки.

6.2.* *Резервуары и случайные силы*

Здесь мы рассматриваем простой пример. Общие вопросы см. в работах:

6.4. *Zwanzig R.*, Journ. Stat. Phys., 9, 3, 215 (1973).

6.5. *Haken H.*, Rev. Mod. Phys., 47, 67 (1975).

6.3. *Уравнение Фоккера — Планка*

Та же литература, что и к разд. 6.1.

6.4. *Некоторые свойства и стационарное решение уравнения Фоккера — Планка*

«Потенциальный случай» рассмотрен в работе:

6.6. *Стратонович Р. Л.* Избранные вопросы теории флуктуаций в радиотехнике. — М.: Сов. радио, 1961.

6.7. *Graham R., Haken H.*, Zs. Phys., 248, 289 (1971).

- 6.8. *Risken H.*, *Zs. Phys.*, **251** (1972);
см. также
- 6.9. *Haken H.*, *Rev. Mod. Phys.*, **47**, 67 (1975).
- 6.5. *Зависящие от времени решения уравнения Фоккера — Планка*
Решение n -мерного уравнения Фоккера — Планка с линейной «силой трения» и постоянным коэффициентом диффузии дано в работе:
- 6.10. *Wang M. C.*, *Uhlenbeck G. E.*, *Rev. Mod. Phys.*, **17**, 2, 3 (1945).
Краткое изложение результатов приводится в статье:
- 6.11. *Haken H.*, *Rev. Mod. Phys.*, **47**, 67 (1975).
- 6.6.* *Решение уравнения Фоккера — Планка с помощью интегралов по траекториям*
- 6.12. *Onsager L.*, *Machlup S.*, *Phys. Rev.*, **91**, 1505, 1512 (1953).
- 6.13. *Гельфанд И. М.*, *Яглом А. М.*, *Journ. Math. Phys.*, **1**, 48 (1960).
- 6.14. *Feynman R. P.*, *Hibbs A. R.*, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965. (Имеется перевод: *Фейнман Р.*, *Хибс А.* *Квантовая механика и интегралы по траекториям.* — М.: Мир, 1968.)
- 6.15. *Wiegel F. W.*, *Path Integral Methods in Statistical Mechanics*, Physics Reports, **16C**, No. 2, North Holland, Amsterdam, 1975.
- 6.16. *Graham R.*, в серии: *Springer Tracts in Modern Physics*, Vol. 66, Springer, Berlin — Heidelberg — New York, 1973, p. 1.
Критическое обсуждение этой работы проведено в
- 6.17. *Horsthemke W.*, *Bech A.*, *Zs. Phys.*, **B22**, 189 (1975).
Мы следуем, в основном, работе
- 6.18. *Haken H.*, *Zs. Phys.*, **B24**, 321 (1976),
где также обсуждаются классы решений уравнений Фоккера — Планка.
- 6.7. *Аналогия с фазовыми переходами*
Теория фазовых переходов в равновесных системах представлена, например, в следующих книгах и статьях:
- 6.19. *Ландау Л. Д.*, *Лифшиц Е. М.* *Статистическая физика. Часть 1.* — М.: Наука, 1976.
- 6.20. *Brout R.*, *Phase transitions*, Benjamin, New York, 1965. (Имеется перевод: *Браут Р.* *Фазовые переходы.* — М.: Мир, 1967.)
- 6.21. *Kadanoff L. P.*, *Götze W.*, *Hamblen D.*, *Hecht R.*, *Lewis E. A. S.*, *Palcanskas V. V.*, *Rayl M.*, *Swift J.*, *Aspnes D.*, *Kane J.*, *Rev. Mod. Phys.*, **39**, 395 (1967).
- 6.22. *Fischer M. E.*, *Repts. Progr. Phys.*, **30**, 731 (1967).
- 6.23. *Stanley H. E.*, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Internat. Series of Monographs in Physics, Oxford University, New York, 1971. (Имеется перевод: *Стенли Г.* *Фазовые переходы и критические явления.* — М.: Мир, 1973.)
- 6.24. *Münster A.*, *Statistical Thermodynamics*, Vol. 2, Springer, Berlin — Heidelberg — New York and Academic Press, New York — London, 1974.
- 6.25. *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vols. 1—5, eds. C. Domb, M. S. Green, Academic Press, London, 1972—1976.

Современная мощная техника ренормализационной группы Вильсона рассмотрена в работе:

- 6.26. *Wilson K. G., Kogut J.*, Phys. Rep., **12C**, 75 (1974). (Имеется перевод: Вильсон К., Когут Дж. Ренормализационная группа и ϵ -разложение. — М.: Мир, 1975.)

Глубокие и детальные аналогии между фазовым переходом второго рода в равновесной системе (например, в сверхпроводнике) и переходами в неравновесной системе впервые были рассмотрены независимо в работах:

- 6.27. *Graham R., Haken H.*, Zs. Phys., **213**, 420 (1968)

и, в частности,

- 6.28. *Graham R., Haken H.*, Zs. Phys., **237**, 31 (1970),

где рассмотрен случай лазера с непрерывным распределением мод, и в работе:

- 6.29. *DeGiorgio V., Scully M. O.*, Phys. Rev., **A2**, 1170 (1970),

где рассмотрен случай одномодового лазера.

Дополнительную литературу, освещающую историю вопроса, см. в гл. 13.

- 6.8. *Аналогия с фазовыми переходами в непрерывной среде: параметр порядка, зависящий от пространственных координат*

а) *Литература по равновесным системам*

Теория Гинзбурга — Ландау изложена, например, в книге:

- 6.30. *Werthamer N. R.*, в сб.: Superconductivity, Vol. 1, ed. R. D. Parks, Marcel Dekker Inc., New York 1969, p. 321,

где приводятся дополнительные ссылки.

Точное вычисление корреляционных функций проведено в статье:

- 6.31. *Scalapino D. J., Sears M., Ferrell R. A.*, Phys. Rev., **B6**, 3409 (1972).

Этой же задаче посвящены следующие работы:

- 6.32. *Gruenberg L. W., Gunther L.*, Phys. Lett., **38A**, 463 (1972).

- 6.33. *Nauenberg M., Kuttner F., Fusman M.*, Phys. Rev., **A13**, 1185 (1976).

б) *Литература по неравновесным (и нефизическим) системам*

- 6.34. *Graham R., Haken H.*, Zs. Phys., **237**, 31 (1970),

а также литература к гл. 8 и 9.

7. Самоорганизация

7.1. Организация

- 7.1. *Haken H.*, не опубликовано.

7.2. Самоорганизация

Другой подход к проблеме самоорганизации был развит в работе

- 7.2. *Neuman J. v.*, в сб.: Theory of Self-reproducing Automata, ed. and completed by Arthur W. Burks, University of Illinois Press, 1966.

7.3. *Роль флуктуаций: надежность или адаптивность? Переключение*

Детальное рассмотрение вопросов надежности, а также переключения, в особенности в ЭВМ было проведено в работах:

7.3. *Landauer R.*, IBM Journ., 183 (July, 1961).

7.4. *Landauer R.*, Journ. Appl. Phys., 33, 2209 (1962).

7.5. *Landauer R.*, *Woo J. W. F.*, в сб.: Synergetics, ed. H. Haken, Teubner, Stuttgart, 1973.

7.4. *Адиабатическое исключение быстро релаксирующих переменных из уравнения Фоккера — Планка*

7.6. *Haken H.*, Zs. Phys., B20, 413 (1975).

7.5. *Адиабатическое исключение быстро релаксирующих переменных из кинетического уравнения*

7.7. *Haken H.*, не опубликовано.

7.7. *Обобщенные уравнения Гинзбурга — Ландау для неравновесных фазовых переходов*

7.8. *Haken H.*, Zs. Phys., B21, 105 (1975).

7.8. *Вклады высших порядков в обобщенные уравнения Гинзбурга — Ландау*

7.9. *Haken H.*, Zs. Phys., B22, 69 (1975); B23, 388 (1975).

7.9. *Скейлинговая теория непрерывно распределенных неравновесных систем*

Наше изложение следует в основном работе:

7.10. *Wunderlin A.*, *Haken H.*, Zs. Phys. B21, 393 (1975).

Из других работ на ту же тему см.:

7.11. *Hopf E.*, Berichte der Math.-Phys. Klasse der Sächsischen Academie der Wissenschaften, Leipzig, XCIV, 1 (1942).

7.12. *Schlüter A.*, *Lortz D.*, *Busse F.*, Journ. Fluid. Mech., 23, 129 (1965).

7.13. *Newel A. C.*, *Whitehead J. A.*, Journ. Fluid. Mech., 38, 279 (1969).

7.14. *Diprima R. C.*, *Eckhaus W.*, *Segel L. A.*, Journ. Fluid. Mech., 49, 705 (1971).

8. **Физические системы**

По этой теме см. работу:

8.1. *Haken H.*, Rev. Mod. Phys., 47, 67 (1975).

а также статьи различных авторов в сборниках

8.2. Synergetics, ed. H. Haken, Teubner, Stuttgart, 1973.

8.3. Cooperative Phenomena, eds. H. Haken, M. Wagner, Springer, Berlin — Heidelberg — New York, 1973.

8.4. Cooperative Effects, ed. H. Haken, North Holland, Amsterdam, 1974.

8.1. *Кооперативные эффекты в лазере: самоорганизация и фазовый переход*

Коренное изменение статистических свойств лазерного излучения на пороге генерации было впервые предсказано и исследовано в работе:

8.5. *Haken H.*, Zs. Phys., 181, 96 (1964).

8.2. Уравнения лазера в модовом представлении

Детальный обзор теории лазера см.:

- 8.6. *Haken H.*, в сб.: *Encyclopedia of Physics, Vol. XXV/2c: Laser Theory*, Springer, Berlin — Heidelberg — New York, 1970.

8.3. Понятие параметра порядка

См. в особенности работу:

- 8.7. *Haken H.*, *Rev. Mod. Phys.*, **47**, 67 (1975)

8.4. Одномодовый лазер

Некоторые ссылки приведены в разд. 8.1.—8.3.

Функция распределения для лазера была получена в работах:

- 8.8. *Risken H.*, *Zs. Phys.*, **186**, 85 (1965).

- 8.9. *Hempstead R. D., Lax M.*, *Phys. Rev.*, **161**, 350 (1967).

Полная квантовомеханическая функция распределения получена в работах:

- 8.10. *Weidlich W., Risken H., Haken H.*, *Zs. Phys.*, **201**, 396 (1967).

- 8.11. *Scully M., Lamb W. E.*, *Phys. Rev.*, **159**, 208 (1967); **166**, 246 (1968).

8.5. Многомодовый лазер

- 8.12. *Haken H.*, *Zs. Phys.*, **219**, 246 (1969).

8.6. Многомодовый лазер с непрерывным распределением мод. Аналогия со сверхпроводимостью

Несколько отличное описание дается в работе:

- 8.13. *Graham R., Haken H.*, *Zs. Phys.*, **237**, 31 (1970).

8.7. Фазовый переход первого рода в одномодовом лазере

- 8.14. *Scott J. F., Sargent M., III, Cantrell C. D.*, *Opt. Comm.*, **15**, 13 (1975).

- 8.15. *Chow W. W., Scully M. O., van Stryland E. W.*, *Opt. Comm.*, **15**, 6 (1975).

8.8. Иерархия неустойчивостей в лазере и ультракороткие лазерные импульсы

Мы следуем в основном работе:

- 8.16. *Haken H., Ohno H.*, *Opt. Comm.*, **16**, 205 (1976).

- 8.17. *Ohno H., Haken H.*, *Phys. Lett.*, **59A**, 261 (1976).

- 8.18. *Haken H., Ohno H.*, не опубликовано.

Машинные расчеты проведены в работе:

- 8.19. *Risken H., Nummedal K.*, *Phys. Lett.*, **26A**, 275 (1968); *Journ Appl. Phys.*, **39**, 4662 (1968).

Рассмотрение лазерной неустойчивости см. также в работе:

- 8.20. *Graham R., Haken H.*, *Zs. Phys.*, **213**, 420 (1968).

Временные колебания в одномодовом лазере рассмотрены в работе:

- 8.21. *Tomita K., Todani T., Kidachi H.*, *Phys. Lett.*, **51A**, 483 (1975).

8.11. *Затухающие и нейтральные решения ($R \leq R_c$)*

Из монографий по гидродинамике можно назвать следующие:

- 8.22. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Механика сплошных сред. — М.: Гос-техиздат, 1953.
 8.23. *Chia-Shun-Yih*, Fluid Mechanics, McGraw-Hill, New York, 1969.
 8.24. *Batchelor G. K.*, An Introduction to Fluid Dynamics, University Press, Cambridge, 1970. (Имеется перевод: *Бэтчелор Дж.* Введение в динамику жидкости. — М.: Мир, 1973.)
 8.25. *Chandrasekhar S.*, Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability, Clarendon Press, Oxford, 1961.

Задачи устойчивости рассмотрены в частности Чандрасекаром в цитированной выше книге и в книге:

- 8.26. *Lin C. C.*, Hydrodynamic Stability, University Press, Cambridge, 1967.

8.13. *Уравнение Фоккера — Планка и его стационарное решение*

Мы следуем в основном работам:

- 8.27. *Haken H.*, Phys. Lett., **46A**, 193 (1973)

и в особенности

- 8.28. *Haken H.*, Rev. Mod. Phys., **47**, 67 (1976).

Аналогичные вопросы см.:

- 8.29. *Graham R.*, Phys. Rev. Lett., **31**, 1479 (1973); Phys. Rev., **10**, 1762 (1974).
 8.30. *Wunderlin A.*, Thesis, Stuttgart University, 1975.

Анализ конфигурации мод без учета флуктуаций проведен в работах:

- 8.31. *Schlüter A., Lortz D., Busse F.*, Journ. Fluid. Mech., **23**, 129 (1965).
 8.32. *Busse F. H.*, Journ. Fluid. Mech., **30**, 625 (1967).
 8.33. *Newel A. C., Whitehead J. A.*, Journ. Fluid. Mech., **38**, 279 (1969).
 8.34. *Diprima R. C., Eckhaus H., Segel L. A.*, Journ. Fluid. Mech., **49**, 705 (1971).

Неустойчивости более высокого порядка см.:

- 8.35. *Busse F. H.*, Journ. Fluid. Mech., **52**, 1, 97 (1972).
 8.36. *Ruelle D., Takens F.*, Comm. Math. Phys., **20**, 167 (1971).
 8.37. *McLaughlin J. B., Martin P. C.*, Phys. Rev., **A12**, 186 (1975),

где можно найти дополнительные ссылки.

Обзор современного состояния теории эксперимента и теории дан в сб.:

- 8.38. Fluctuations, Instabilities and Phase Transitions, ed. T. Riste, Plenum Press, New York, 1975.

8.14. *Модель статистической динамики неустойчивости Ганна вблизи порога*

- 8.39. *Gunn J. B.*, Solid State Comm., **1**, 88 (1963).
 8.40. *Gunn J. B.*, IBM Journ. Res. Develop., **8**, 141 (1964).

Теоретическое рассмотрение этого эффекта и связанных с ним эффектов проведено, например, в работе:

- 8.41. *Thomas H.*, в сб.: Synergetics, ed. H. Haken, Teubner, Stuttgart, 1973.

Здесь мы следуем в основном работе:

- 8.42. *Nakamura K.*, Journ. Phys. Jap., **38**, 46 (1975).

8.15. Устойчивость упругих конструкций: некоторые основные идеи

Введение в эту область дают книги:

- 8.43. *Thompson J. M. T., Hunt G. W.*, A General Theory of Elastic Stability, Wiley, London, 1973.
8.44. *Huseyin K.*, Nonlinear Theory of Elastic Stability, Nordhoff, Leyden, 1975.

9. Химические и биохимические системы

В этой главе мы в частности рассматриваем возникновение пространственных и временных структур в химических реакциях. Колебания концентрации рассмотрены впервые в работе:

- 9.1. *Bray C. H.*, Journ. Chem. Soc., 43, 1262 (1921).
9.2. *Белоусов Б. П.* Сборник рефератов по радиационной медицине за 1958 г., Медгиз, 1959.

Эта работа была развита Жаботинским с сотр. в серии работ:

- 9.3. *Вавилин В. А., Жаботинский А. М., Ягужинский Л. С.* В сб.: Колебательные процессы в биологических и химических системах. — М.: Наука, 1967, стр. 181.
9.4. *Заикин А. Н., Жаботинский А. М.*, Nature, 225, 535 (1970).
9.5. *Жаботинский А. М., Заикин А. Н.*, Journ. Theor. Biol., 40, 45 (1973).

Теоретическая модель, объясняющая возникновение пространственных структур, была впервые дана в работе:

- 9.6. *Turing A. M.*, Phil. Trans. Roy. Soc., B237, 37 (1952).

Модели химических реакций, в которых происходит образование пространственных и временных структур, рассмотрены в многочисленных работах Пригожина с сотр. См. цитированную здесь книгу П. Глендорфа и И. Пригожина, а также

- 9.7. *Nicolis G., Prigogine I.*, Self-organisation in Non-equilibrium Systems, Wiley, New York, 1977. (Имеется перевод: *Николис Г., Пригожин И.* Самоорганизация в неравновесных системах. — М.: Мир, 1979.)

Обзор статистических аспектов химических реакций можно найти в работе:

- 9.8. *McQuarary D.*, Supplementary Review Series in Appl. Probability, Methuen, London, 1967.

Детальный обзор всей этой области исследований см. в

- 9.9. Faraday Symposium 9: Phys. Chemistry of Oscillatory Phenomena, London, 1974.

Колебания в химических реакциях рассмотрены в статье:

- 9.10. *Nicolis G., Portnow J.*, Chem. Rev., 73, 365 (1973).

9.3. Реакция и уравнения диффузии

Мы в основном следуем работе:

- 9.11. *Schlögl F.*, Zs. Phys., 253, 147 (1972).

где приводится стационарное решение. Нестационарное решение получено

- 9.12. *Ошно Н.*, Stuttgart, не опубликовано.

9.4. *Модель реакции с диффузией в случае двух или трех переменных: брюсселятор и орегонатор*

Здесь мы приводим наше собственное нелинейное рассмотрение (А. Wunderlin, H. Haken, не опубликовано) уравнений реакции с диффузией брюсселяторной модели, предложенной Пригожиным с сотр., цитированной выше. Аналогичные вопросы рассмотрены в работах:

- 9.13. *Auchmughty J. F. G., Nicolis G.*, Bull. Math. Biol., **37**, 1 (1974).
 9.14. *Kuramoto Y., Tsusuki T.*, Progr. Theor. Phys., **52**, 1399 (1974)
 9.15. *Herschkovitz-Kaufmann M.*, Bull. Math. Biol., **37**, 589 (1975).

Реакция Белоусова — Жаботинского описана в уже цитированных статьях Белоусова и Жаботинского.

«Орегонаторная» модель была предложена и рассмотрена в статьях:

- 9.16. *Field R. J., Korös E., Noyes R. M.*, Journ. Am. Chem. Soc., **49**, 8649 (1972).
 9.17. *Field R. J., Noyes R. M.*, Nature **237**, 390 (1972).
 9.18. *Field R. J., Noyes R. M.*, Journ. Chem. Phys., **60**, 1877 (1974).
 9.19. *Field R. J., Noyes R. M.*, Journ. Am. Chem. Soc., **96**, 2001 (1974).

9.5. *Стохастическая модель химической реакции без диффузии. Процессы рождения и гибели. Случай одной переменной*

Первое рассмотрение этой модели проведено в работе:

- 9.20. *McNeil V. J., Walls D. F.*, Journ. Stat. Phys., **10**, 439 (1974).

9.6. *Стохастическая модель химической реакции с диффузией. Случай одной переменной*

Кинетическое уравнение с учетом диффузии выведено в работе:

- 9.21. *Haken H.*, Zs. Phys., **B20**, 413 (1975).

Мы в основном следуем работе:

- 9.22. *Gardiner C. H., McNeil K. J., Walls D. F., Matheson I. S.*, Journ. Stat. Phys., **14**, 4, 307 (1976).

Аналогичные вопросы рассмотрены в статьях:

- 9.23. *Nicolis G., Aden P., van Nypelseer A.*, Progr. Theor. Phys., **52**, 1481 (1974).
 9.24. *Malek-Mansour M., Nicolis G.*, preprint, Febr. 1975.

9.7.* *Стохастическое рассмотрение брюсселятора вблизи неустойчивости типа мягкой моды*

Мы в основном следуем работе:

- 9.25. *Haken H.*, Zs. Phys., **B20**, 413 (1975).

9.8. *Химические цепи*

К этому разд. относятся следующие статьи:

- 9.26. *Oster G. F., Perelson A. S.*, Chem. Reaction Dynamics, Arch. Rat. Mech. Anal., **55**, 230 (1974).
 9.27. *Perelson A. S., Oster G. F.*, Chem. Reaction Dynamics, Part. II, Reaction Networks, Arch. Rat. Mech. Anal., **57**, 31 (1974/75),

где даны дополнительные ссылки.

- 9.28. *Oster G. F., Perelson A. S., Katchalsky A.*, Quart. Rev. Biophys., **6**, 1 (1973).

- 9.29. *Rössler O. E.*, в серии: *Lecture Notes in Biomathematics*, Vol. 4, Springer, Berlin — Heidelberg — New York, 1974, p. 419.
 9.30. *Rössler O. E.*, *Zs. Naturforsch.*, 31a, 255 (1976).

10. Приложения к биологии

10.2. Стохастическая модель системы хищник — жертва

Общие вопросы рассмотрены в монографиях:

- 10.1. *Goel N. S., Richter-Dyn N.*, *Stochastic Models in Biology*, Academic Press, New York, 1974.
 10.2. *Ludwig D.*, в серии: *Lecture Notes in Biomathematics*, Vol 3, Stochastic Population Theories, ed. S. Levin, Springer, Berlin — Heidelberg — New York, 1974.

Другой подход к проблеме, рассмотренной в этом разделе, см. в статье:

- 10.3 *Reddy V. T. N.*, *Journ. Stat. Phys.*, 13, 1 (1975).

10.3. Простая математическая модель процессов эволюции

Рассмотренные здесь уравнения впервые, по-видимому, были использованы в лазерной физике для объяснения селекции мод в лазерах в статье:

- 10.4. *Haken H., Sauermann H.*, *Zs. Phys.*, 173, 261 (1963).

Уравнения лазерного типа были использованы для описания биологических процессов в работе:

- 10.5. *Haken H.*, Talk at the Int. Conf. From Theoretical Physics to Biology, ed. M. Marois, Versailles, 1969,

см. также

- 10.6. *Haken H.*, в сб.: *From Theoretical Physics to Biology*, ed. M. Marois, Karger, Basel, 1973.

Всеобъемлющая и детальная теория эволюционных процессов была развита Эйгеном:

- 10.7. *Eigen M.*, *Naturwissensch.*, 58, 465 (1971).

В связи с аналогиями, рассмотренными в нашей книге, интересно отметить, что эйгеновская «Bewertungsfunktion» идентична функции (8.35), описывающей насыщенный коэффициент усиления в многомодовых лазерах.

Подход, в котором и эволюционные и другие процессы рассматриваются как игры, развит в работе:

- 10.8. *Eigen M., Winkler-Oswatitsch R.*, *Das Spiel*, Piper, München, 1975.

Важная новая концепция гиперциклов и связанная с ней концепция «квазивидов» введена в работе:

- 10.9. *Eigen M., Schuster P.*, *Naturwissensch.*, 64, 541 (1977).

10.4. Модель морфогенеза

Мы рассматриваем здесь модель, предложенную А. Гирером и М. Мейнхардтом.

- 10.10. *Gierer A., Meinhardt M.*, *Biological pattern formation involving lateral inhibition. Lectures on Mathematics in the Life Sciences*, 7, 163 (1974).
 10.11. *Meinhardt H.*, *The Formation of Morphogenetic Gradients and Fields*, *Ber. Deutsch. Bot. Res.*, 87, 101 (1974).

- 10.12. *Meinhardt H., Gierer A.*, Applications of a theory of biological pattern formation based on lateral inhibition. *Journ. Cell. Sci.*, **15**, 321 (1974).
 10.13. *Meinhardt H.*, preprint 1976.

10.5. *Параметры порядка и морфогенез*

Здесь представлены неопубликованные результаты, полученные Г. Хакеном, Г. Олбрихом.

11. **Социология: стохастическая модель формирования общественного мнения**

Здесь рассмотрена модель В. Вейдлица:

- 11.1. *Weidlich W.*, *Collective Phenomena*, **1**, 51 (1972).
 11.2. *Weidlich W.*, *Brit. Journ. Math. Stat. Psychol.*, **24**, 251 (1971).
 11.3. *Weidlich W.*, в сб.: *Synergetics*, ed. H. Haken, Teubner, Stuttgart, 1973.

В следующих монографиях рассмотрены математические методы, используемые в социологии:

- 11.4. *Coleman J. S.*, *Introduction to Mathematical Sociology*, The Free Press, New York, 1964.
 11.5. *Bartholomew D. J.*, *Stochastic Models for Social Processes*, Wiley, London, 1967.

12. **Хаос**

12.1. *Что такое хаос?*

Математически точное рассмотрение примеров хаоса с помощью отображений и других топологических методов см. в работах:

- 12.1. *Smale S.*, *Bull. A. M. S.*, **73**, 747 (1967).
 12.2. *Li T. Y., Yorke J. A.*, *Am. Math. Monthly*, **82**, 985 (1975).
 12.3. *Ruelle D., Takens F.*, *Commun. Math. Phys.*, **20**, 167 (1971).

12.2. *Модель Лоренца*

- 12.4. *Lorenz E. N.*, *Journ. Atmospheric Sci.*, **20**, 130 (1963).
 12.5. *Lorenz E. N.*, *Journ. Atmospheric Sci.*, **20**, 448 (1963).

Это исторически первые работы, в которых появляется «странный аттрактор». Дальнейшее развитие модели см.:

- 12.6. *McLaughlin J. B., Martin P. C.*, *Phys. Rev. A***12**, 186 (1975).
 12.7. *Lücke M.*, *Journ. Phys.*, **15**, 455 (1976).

Аналогия физики лазера и гидродинамики, рассмотренная в данном разделе, исследована также в работе:

- 12.8. *Haken H.*, *Phys. Lett.*, **53A**, 77 (1975).

12.3. *Как возникает хаос*

- 12.9. *Haken H., Wunderlin A.*, *Phys. Lett.*, **62A**, 133 (1977).

12.4. *Хаос и нарушение принципа подчинения параметру порядка*

- 12.10. *Haken H., Zorell J.*, не опубликовано.

12.5. *Корреляционная функция и частотное распределение*

- 12.11. *Lücke M.*, *Journ. Stat. Phys.*, **15**, 455 (1976).
 12.12. *Aizawa Y., Shimada I.*, Preprint 1977.

12.6. Другие примеры хаотического движения

Проблема трех тел:

- 12.13. Poincaré H., *Les méthodes nouvelles de la mécanique céleste*, Gauthier-Villars, Paris, 1892/99; Reprint: Dover Publ., New York, 1960.

Теория электронных приборов, в особенности «универсального контура» Хайкина см. в книге:

- 12.14. Андронов А. А., Витт А. А., Хайкин С. Э. *Теория колебаний*. 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Физматгиз, 1959.

Осциллятор Ганна:

- 12.15. Nakamura K., *Progr. Theor. Phys.*, **57**, 1874 (1977).

Многочисленные модели химических реакций (без учета диффузии) были рассмотрены О. Ресслером. Итог этих работ и ссылки см. в работе:

- 12.16. Roessler O. E., в сб.: *Synergetics, A Workshop*, ed. H. Haken, Springer, Berlin — Heidelberg — New York, 1977.

Модели химических реакций с учетом диффузии см.:

- 12.17. Kuramoto Y., Yamada T., *Progr. Theor. Phys.*, **56**, 679 (1976).

- 12.18. Yamada T., Kuramoto Y., *Progr. Theor. Phys.*, **56**, 681 (1976).

Модулированные химические реакции исследованы в работе:

- 12.19. Tomita K., Kai T., Hikami F., *Progr. Theor. Phys.*, **57**, 1159 (1977).

Экспериментальные свидетельства наличия хаоса в химических реакциях получены в работах:

- 12.20. Schmitz R. A., Graziani K. R., Hudson J. L., *Journ. Chem. Phys.*, **67**, 3040 (1977).

- 12.21. Roessler O. E., будет опубликовано.

Магнитное поле земли:

- 12.22. Jacobs J. A., *Phys. Reports*, **26**, 183 (1976).

Динамика популяций:

- 12.23. May R. M., *Nature*, **261**, 459 (1976).

13. Некоторые замечания исторического характера и перспективы

- 13.1. Aichmüchty J. F. G., Nicolis G., *Bull. Math. Biol.*, **37**, 323 (1975).

- 13.2. Von Bertalanffy L., *Blätter für Deutsche Philosophie*, **18**, Nr. 3, 4 (1945); *Science*, **111**, 23 (1950); *Brit. Journ. Phil. Sci.*, **1**, 134 (1950); *Biophysik des Fließgleichgewichts*, Vieweg, Braunschweig, 1953.

- 13.3. Czajkowski G., *Zs. Phys.*, **270**, 25 (1974).

- 13.4. DeGiorgio V., Scully M. O., *Phys. Rev.*, **A2**, 117a (1970).

- 13.5. Glansdorff P., Prigogine I., *Thermodynamic Theory of Structure, Stability and Fluctuations*, Wiley, New York, 1971. (Имеется перевод: Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структур, устойчивости и флуктуаций. — М.: Мир, 1973.)

- 13.6. Graham R., Haken H., *Zs. Phys.*, **213**, 420 (1968); **237**, 31 (1970).

- 13.7. Haken H., *Zs. Phys.*, **181**, 96 (1964).

- 13.8. Herschkowitz-Kaufman M., *Bull. Math. Biol.*, **37**, 589 (1975).

- 13.9. Janssen K. H., *Zs. Phys.*, **270**, 67 (1974).

- 13.10. *Klir G. J.*, The Approach to General Systems Theory, Van Nostrand Reinhold Comp., New York, 1969.
- 13.11. Trends in General Systems Theory, ed. *G. J. Klir*, Wiley, New York, 1972.
- 13.12. *Landauer R.*, IBM Journ. Res. Dev., 5, 3 (1961), Journ. Appl. Phys., 33, 2209 (1962); Ferroelectrics, 2, 47 (1971).
- 13.13. The Relevance of General Systems Theory, ed. *E. Laszlo*, George Brasiller, New York, 1972.
- 13.14. *Matheson I.*, *Walls D. F.*, *Gardiner C. W.*, Journ. Stat. Phys., 12, 21 (1975).
- 13.15. *Nitzan A.*, *Ortoleva P.*, *Deutsch J.*, *Ross J.*, Journ. Chem. Phys., 61, 1056 (1974).
- 13.16. *Prigogine I.*, *Nicolis G.*, Journ. Chem. Phys., 46, 3542 (1967).
- 13.17. *Prigogine I.*, *Lefever R.*, Journ. Phys., 48, 1695 (1968).
- 13.18. *Turing A. M.*, Phil. Trans. Roy., B234, 37 (1952).

Оглавление

Предисловие редакторов перевода	5
Предисловие автора к русскому изданию	12
Предисловие к 2-му изданию	13
Предисловие	14
Глава 1. Цель	17
<i>Почему следует прочесть эту книгу</i>	
1.1. Порядок и беспорядок. Несколько типичных примеров . . .	17
1.2. Некоторые типичные задачи и трудности	30
1.3. План изложения материала	34
Глава 2. Вероятность	37
<i>Чему мы можем научиться из азартных игр</i>	
2.1. Объект нашего исследования: выборочное пространство . .	37
2.2. Случайные величины	40
2.3. Вероятность	41
2.4. Распределение	43
2.5. Случайные величины и плотность вероятности	45
2.6. Совместная вероятность	48
2.7. Математическое ожидание $E(X)$ и моменты	50
2.8. Условные вероятности	51
2.9. Независимые и зависимые случайные величины	52
2.10*. Производящие функции и характеристические функции . . .	54
2.11. Специальный случай распределения вероятностей: биномиальное распределение	55
2.12. Распределение Пуассона	59
2.13. Нормальное (гауссово) распределение	60
2.14. Формула Стирлинга	62
2.15*. Центральная предельная теорема	63
Глава 3. Информация	65
<i>Как далеко может забрести пьяный</i>	
3.1. Некоторые основные идеи	65
3.2*. Прирост информации: иллюстрация	70
3.3. Информационная энтропия и ограничения	73

3.4.	Пример из физики: термодинамика	78
3.5.	Элементы термодинамики необратимых процессов	82
3.6.	Энтропия — проклятие статистической механики?	91
Глава 4.	Случайность	94
	<i>Как далеко может забрести пьяный</i>	
4.1.	Модель броуновского движения	94
4.2.	Модель случайного блуждания и соответствующее кинетическое уравнение	100
4.3*.	Совместная вероятность и траектории. Марковские процессы. Уравнение Чепмена — Колмогорова. Интегралы по траекториям	105
4.4*.	Как использовать совместные распределения вероятностей. Моменты. Характеристическая функция. Гауссовы процессы	111
4.5.	Кинетическое уравнение	114
4.6.	Точное стационарное решение кинетического уравнения для систем с детальным равновесием	116
4.7*.	Кинетическое уравнение для системы с детальным равновесием. Симметризация. Собственные значения и собственные состояния	119
4.8*.	Метод Кирхгофа решения кинетического уравнения	122
4.9*.	Теоремы о решениях кинетического уравнения	126
4.10.	Смысл случайных процессов. Стационарное состояние, флуктуации, время возвращения	127
4.11*.	Кинетическое уравнение и ограниченность термодинамики необратимых процессов	131
Глава 5.	Необходимость	133
	<i>Старые структуры уступают место новым</i>	
5.1.	Динамические процессы	133
5.2*.	Критические точки и траектории на фазовой плоскости. Еще раз о предельных циклах	141
5.3*.	Устойчивость	149
5.4.	Примеры и упражнения на бифуркацию и устойчивость	156
5.5*.	Классификация статических неустойчивостей или элементарный подход к теории катастроф Тома	163
Глава 6.	Случайность и необходимость	178
	<i>Реальный мир нуждается и в том и в другом</i>	
6.1.	Уравнения Ланжевена: пример	178
6.2*.	Резервуары и случайные силы	184
6.3.	Уравнение Фоккера — Планка	191
6.4.	Некоторые свойства и стационарные решения уравнения Фоккера — Планка	198
6.5.	Зависящие от времени решения уравнения Фоккера — Планка	205
6.6*.	Решение уравнения Фоккера — Планка с помощью интегралов по траекториям	209
6.7.	Аналогия с фазовыми переходами	212
6.8.	Аналогия с фазовыми переходами в непрерывной среде: параметр порядка, зависящий от пространственных координат	221

Глава 7. Самоорганизация	226
<i>Долгоживущие системы подчиняют себе короткоживущие системы</i>	
7.1. Организация	226
7.2. Самоорганизация	230
7.3. Роль флуктуаций: надежность или адаптивность? Переключение	237
7.4*. Адиабатическое исключение быстро релаксирующих переменных из уравнения Фоккера — Планка	240
7.5*. Адиабатическое исключение быстро релаксирующих переменных из кинетического уравнения	242
7.6. Самоорганизация в непрерывно распределенных средах. Основные черты математического описания	243
7.7*. Обобщенные уравнения Гинзбурга — Ландау для неравновесных фазовых переходов	245
7.8*. Вклады высших порядков в обобщенные уравнения Гинзбурга — Ландау	252
7.9*. Скейлинговая теория непрерывно распределенных неравновесных систем	255
7.10*. Неустойчивость типа мягкой моды	258
7.11*. Неустойчивость типа жесткой моды	262
Глава 8. Физические системы	264
8.1. Кооперативные эффекты в лазере: самоорганизация и фазовый переход	264
8.2. Уравнения лазера в модовом представлении	265
8.3. Понятие параметра порядка	267
8.4. Одномодовый лазер	268
8.5. Многомодовый лазер	271
8.6. Многомодовый лазер с непрерывным распределением мод. Аналогия со сверхпроводимостью	273
8.7. Фазовый переход первого рода в одномодовом лазере	276
8.8. Иерархия неустойчивостей в лазере и ультракороткие лазерные импульсы	280
8.9. Неустойчивости в гидродинамике: проблемы Бенара и Тейлора	286
8.10. Основные уравнения	287
8.11. Затухающие и нейтральные решения ($R \leq R_c$)	289
8.12. Решение вблизи $R = R_c$ (область нелинейности). Эффективные уравнения Ланжевена	290
8.13. Уравнения Фоккера — Планка и его стационарное решение	291
8.14. Модель статистической динамики неустойчивости Ганна вблизи порога	295
8.15. Устойчивость упругих конструкций: некоторые основные идеи	299
Глава 9. Химические и биохимические системы	304
9.1. Химические и биохимические реакции	304
9.2. Детерминированные процессы без диффузии. Случай одной переменной	304
9.3. Реакция и уравнения диффузии	309

9.4.	Модель реакции с диффузией в случае двух или трех переменных: брюсселятор и орегонатор	312
9.5.	Стохастическая модель химической реакции без диффузии. Процессы рождения и гибели. Случай одной переменной . . .	319
9.6.	Стохастическая модель химической реакции с диффузией. Случай одной переменной	324
9.7*.	Стохастическое рассмотрение брюсселятора вблизи неустойчивости типа мягкой моды	329
9.8.	Химические цепи	332
Глава 10.	Приложение к биологии	335
10.1.	Экология. Динамика популяций	335
10.2.	Стохастическая модель системы хищник — жертва	340
10.3.	Простая математическая модель процессов эволюции	341
10.4.	Модель морфогенеза	342
10.5.	Параметры порядка и морфогенез	346
10.6.	Некоторые замечания относительно моделей морфогенеза . . .	356
Глава 11.	Социология: стохастическая модель формирования общественного мнения	359
Глава 12.	Хаос	363
12.1.	Что такое хаос?	363
12.2.	Модель Лоренца	364
12.3.	Как возникает хаос	366
12.4.	Хаос и нарушение принципа подчинения параметру порядка 373	
12.5.	Корреляционная функция и частотное распределение	375
12.6.	Другие примеры хаотического движения	277
Глава 13.	Некоторые замечания исторического характера и перспективы	379
	Основная и дополнительная литература и комментарии . . .	383

Г. Хакеп

СИНЕРГЕТИКА

Научн. редактор Л. И. Третьякова
Мл. научн. редактор Л. Н. Малейнова
Художник Е. Н. Урусов
Художественный редактор Л. Е. Везрученков
Технический редактор Н. Б. Панфилова
Корректор С. А. Денисова

ИБ № 1859

Сдано в набор 07.08.79. Подписано к печати 28.04.80. Формат 60×90^{1/16}.
Бумага типографская № 2. Гарнитура литературная. Печать высокая.
Объем: 12,75 бум. л. Усл. печ. л. 25,50. Уч.-изд. л. 21,73. Изд. № 2/0148.
Тираж 6600 экз. Зак. 306. Цена 2 р. 70 к.

Издательство «Мир»

129820, Москва, И-110 ГСП, 1-й Рижский пер., 2

Ордена Трудового Красного Знамени Ленинградская типография № 2
имени Евгении Соколовой «Союзполиграфпрома» при Государствен-
ном комитете СССР по делам издательств, полиграфии и книжной
торговли, 198052, Ленинград, Л-52, Измайловский проспект, 29