КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
И МОДЕЛИРОВАНИЕ 2026 Т. 18 № 5 С. 1161–1187
DOI: 10.20537/2076-7633-2026-18-5-1161-1187

Ки&М

МОДЕЛИ В ФИЗИКЕ И ТЕХНОЛОГИИ

УДК: 36.75+544.3+577.3

Кинетика плотности распределения и энтропии изолированной системы частиц в фазовом пространстве

И. Г. Минкевич

Институт биохимии и физиологии микроорганизмов им. Г. К. Скрябина РАН,
ФИЦ «Пущинский научный центр биологических исследований РАН»,
Россия, 142290, Московская область, г. Пущино, пр. Науки, д. 5

E-mail: minkevich@pbcras.ru

Получено 02.06.2026, после доработки — 04.09.2026.
Принято к публикации 18.09.2026.

Данная работа лежит в области неравновесной статистической механики. Она посвящена изучению пространственно-временного поведения изолированных многочастичных систем. Сформулирована феноменологическая модель, сочетающая законы классической динамики с присутствием случайных переходов между различными микроскопическими состояниями системы. Все процессы, происходящие с такой системой, имеют место на замкнутой гиперповерхности в фазовом пространстве координат-импульсов. Эта поверхность соответствует фиксированному значению энергии системы; она обозначена как $\mathrm{Surf_E}$. Кинетическое уравнение для плотности вероятностей распределения системы в фазовом пространстве $f(\vec{x}, t)$ приведено к форме, удобной для нахождения решений этого уравнения ($\vec{x}$ — совокупность фазовых переменных). Дано доказательство того, что экстремум энтропии системы, который находится методом вариационного исчисления, является максимумом. Вблизи своего максимума энтропия пропорциональна интегралу от квадрата вариации $f(\vec{x}, t)$ по всему объему гиперповерхности $\mathrm{Surf_E}$. Найдена зависимость энтропии от вариации плотности распределения $f(\vec{x}, t)$, когда эта вариация имеет постоянные значения в двух подобластях гиперповерхности, причем эти значения могут быть весьма велики. Сформулировано кинетическое уравнение для $D(\vec{x}, t)$ — отклонения плотности распределения частиц $f(\vec{x}, t)$ от ее равновесного значения. Найдены аналитические решения этого уравнения для нескольких вариантов зависимости скорости случайных переходов от расстояния между начальным и конечным микроскопическими состояниями перехода. Если эта скорость не зависит от вышеназванного расстояния, то исходная форма $D(\vec{x}, t)$ сохраняется в течение всего процесса экспоненциального затухания величины $D(\vec{x}, t)$. Рассмотрен переходный процесс в более общем случае, когда случайные переходы возможны только в ограниченном диапазоне расстояний между микросостояниями. Тогда величина $D(\vec{x}, t)$ равна сумме пространственных мод, каждая из которых при стремлении плотности распределения к равновесному значению затухает со своей скоростью. Чем выше порядок моды, тем быстрее она затухает. Поэтому в данном случае переходный процесс приводит не только к общему уменьшению $D(\vec{x}, t)$, но и к сглаживанию первоначальной формы $D(\vec{x}, t)$. Найдена общая зависимость разности между равновесным и неравновесным значениями энтропии от величины $D(\vec{x}, t)$.

Ключевые слова: система точечных частиц, классическая динамика, микроскопическое состояние, случайные переходы, плотность распределения вероятностей, кинетическое уравнение, энтропия, термодинамическое равновесие, переходные процессы, неравновесное состояние, решения кинетического уравнения

© 2026 Игорь Георгиевич Минкевич
Статья доступна по лицензии Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Unported License.
Чтобы получить текст лицензии, посетите веб-сайт http://creativecommons.org/licenses/by-nd/3.0/
или отправьте письмо в Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

COMPUTER RESEARCH AND MODELING
2026 VOL. 18 NO. 5 P. 1161–1187
DOI: 10.20537/2076-7633-2026-18-5-1161-1187

Ки&М

MODELS IN PHYSICS AND TECHNOLOGY

UDC: 36.75+544.3+577.3

Kinetics of the distribution density and entropy of an isolated system of particles in phase space

I. G. Minkevich

G. K. Skryabin Institute of Biochemistry and Physiology of Microorganisms,
FRC Pushchino Centre for Biological Research, Russian Academy of Sciences,
5 pr. Nauki, Pushchino, Moscow Region, 142290, Russia

E-mail: minkevich@pbcras.ru

Received 02.06.2026, after completion — 04.09.2026.
Accepted for publication 18.09.2026.

This work lies in the field of nonequilibrium statistical mechanics. It investigates the spatiotemporal behavior of isolated many-particle systems. A phenomenological model has been formulated that combines the laws of classical dynamics and random transitions between various microscopic states of the system. All processes occurring with such a system take place on a closed hypersurface in a coordinate-momentum phase space. This surface corresponds to a fixed value of energy of the system; it is designated as Surf_E. The kinetic equation for the probability density distribution of a system in a phase space, $f(\vec{x}, t)$, is reduced to a form convenient for finding solutions to this equation ($\vec{x}$ is a set of phase variables). Proof is given that the extremum of the entropy of the system, which is found by the calculus of variations, is a maximum. Near its maximum, entropy is proportional to the integral of the squared variation of $f(\vec{x}, t)$ over the entire volume of the hypersurface Surf_E. The dependence of entropy on density variation distribution $f(\vec{x}, t)$ has been found, when this variation has constant values in two subregions of the hypersurface; these values can be rather large. A kinetic equation has been formulated for the $D(\vec{x}, t)$, deviation of particle distribution density $f(\vec{x}, t)$ from its equilibrium value. Analytical solutions of this equation have been found for several variants of the dependence of the rate of random transitions on the distance between the initial and final microscopic states of the transition. If this rate does not depend on the above-mentioned distance, the initial shape of $D(\vec{x}, t)$ is maintained throughout the entire process of the exponential decay of the quantity $D(\vec{x}, t)$. The transition process is considered in a more general case, when random transitions are possible only in a limited range of distances between microstates. Then the value $D(\vec{x}, t)$ is equal to the sum of spatial modes, each of which, as the distribution density tends to the equilibrium, decays at its own rate. The higher the order of the mode, the faster it decays. Therefore, in this case, the transition process leads not only to a general decrease of $D(\vec{x}, t)$, but also to a smoothing of the $D(\vec{x}, t)$ original shape. The general dependence of the difference between the equilibrium and nonequilibrium entropy values on $D(\vec{x}, t)$ has been found.

Keywords: system of point particles, classical dynamics, microscopic state, random transitions, probability distribution density, kinetic equation, entropy, thermodynamic equilibrium, transient processes, nonequilibrium state, solutions of the kinetic equation

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2026, vol. 18, no. 5, pp. 1161–1187 (Russian).

© 2026 Igor. G. Minkevich
This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Unported License.
To view a copy of this license, visit http://creativecommons.org/licenses/by-nd/3.0/
or send a letter to Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

Введение

Основы статистической механики систем, состоящих из многих частиц, подчиняющихся законам классической динамики, были разработаны Дж. К. Максвеллом, Дж. У. Гиббсом и Л. Больцманом. С тех пор был выполнен огромный массив исследований в этой области. Изложение их результатов и многочисленные ссылки можно найти в работах [Зубарев, 1971; Климонтович, 1995; Ландау, Лифшиц, 1995; Лифшиц, Питаевский, 1979; Balescu, 1975; Hoch, 2021; Huang, 2010; Kennett, 2021; Kittel, Kroemer, 1980; Kondepudi, Prigogine, 1998; Müller-Kirsten, 2022; Nolting, 2018; Reichl, 2016; Sadovskii, 2019; Sekerka, 2015; Sethna, 2006]. Большинство этих исследований относится к системам, находящимся в состоянии термодинамического равновесия. В то же время переходные процессы в неравновесных многочастичных системах изучены гораздо меньше. Взаимодействие микросостояний рассматривается на основе соударений атомов, где учитываются все физические детали этого процесса [Лифшиц, Питаевский, 1979; Климонтович, 1995; Reichl, 2016]. Выведенное на этой основе уравнение Больцмана весьма сложно для аналитического исследования. Существуют вычислительные методы нахождения решений уравнения Больцмана [Succi, 2001], которые имеют ограниченные возможности как инструмент исследования.

Аналитические методы имеют большие преимущества для выявления общих свойств изучаемых объектов, если решения уравнений, описывающих эти объекты, найдены. Нам неизвестны публикации, содержащие явные решения кинетических уравнений, описывающих временное поведение неравновесных многочастичных систем. Работы в области неравновесной статистической термодинамики в значительной степени сосредоточены на развитии исходных формулировок математического описания таких систем.

Данная работа посвящена нахождению решений кинетического уравнения, описывающих процесс установления равновесия в изолированной системе из многих классико-механических частиц. Для этого сформулировано понятие микроскопического состояния такой системы, разработана феноменологическая модель переходов между этими состояниями; сформулирован вариант кинетического уравнения, который позволил найти его аналитические решения. Исследованы свойства переходных процессов в неравновесных многочастичных системах. На этой основе выведены выражения для энтропии системы и для скорости изменения энтропии.

Кинетическое уравнение

В данной работе рассматриваются изолированные системы, у которых множество всех микросостояний является непрерывным. Это относится к системам точечных частиц, движение которых подчиняется законам классической механики. Тогда микросостояния характеризуются координатами и скоростями частиц, или, что эквивалентно сказанному, их координатами и импульсами. Здесь мы принимаем координатно-импульсное представление. Тогда каждая n-я частица описывается двумя векторами — обобщенными координатами $\vec{q}_n$ и обобщенными импульсами $\vec{p}_n$. В механике принято также совмещенное описание всего множества частиц [Ландау, Лифшиц, 1988; Nolting, 2018; Sadovskii, 2019], когда рассматриваются объединение координат всех частиц, q_i (компоненты всех векторов $\vec{q}_n$ расположены подряд и занумерованы общим индексом i) и аналогичное объединение импульсов всех частиц, p_i. Для приведенных ниже расчетов удобно использовать вектор-столбец $\vec{x} = \begin{pmatrix} \vec{q} \\ \vec{p} \end{pmatrix}$, где столбец всех импульсов p_i (обозначен как $\vec{p}$) является продолжением столбца всех координат q_i (обозначен как $\vec{q}$).

Любое **макро**скопическое состояние системы соответствует множеству **микро**скопических состояний и характеризуется распределением вероятностей пребывания системы в отдельных микросостояниях. Это распределение является полной характеристикой кинетики поведения

системы, в том числе эволюции ее состояния во времени. При рассмотрении эволюции большой системы особый интерес представляет повеление энтропии как интегральной характеристики разброса по микросостояниям.

Если допустить, что случайность имеет место только в начальный момент времени, то начальное распределение изолированной системы по микросостояниям и ее энтропия **не** изменяются с течением времени [Зубарев, 1971; Климонтович, 1995]. Поэтому целесообразно принять в качестве микросостояния не одну точку в фазовом пространстве $\vec{x} = \begin{pmatrix}\vec{q}\\ \vec{p}\end{pmatrix}$, а целую траекторию, представляющую собой детерминированное описание движения точки в этом пространстве. Отражение физической реальности требует введения в эту картину фактора случайности, а именно, случайного перехода между микросостояниями. Вышеописанное понятие микроскопического состояния определяет случайный переход между микросостояниями как перескок с одной траектории на другую.

Обозначим через N общее число частиц в системе, $f(\vec{x}, t)$ — плотность вероятности нахождения системы в точке $\vec{x}$ пространства координат-импульсов точечных частиц в момент времени t. Нахождение в точке $\vec{x}$ означает нахождение на траектории, проходящей через эту точку, то есть пребывание системы в соответствующем микроскопическом состоянии. Рассмотрим сначала случай, когда движение частиц подчиняется исключительно законам классической механики и после начального момента времени не подвержено влиянию случайности. Тогда кинетика $f(\vec{x}, t)$ описывается уравнением [Зубарев, 1971; Müller-Kirsten, 2022]

$$\frac{\partial f(\vec{x}, t)}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{v}(\vec{x}) f(\vec{x}, t)) = 0, \tag{1}$$

где дивергенция

$$\operatorname{div}(\vec{v}(\vec{x}) f(\vec{x}, t)) = \sum_{k=1}^{6N} \frac{\partial}{\partial x_k} (v_k(\vec{x}) f(\vec{x}, t)). \tag{2}$$

Здесь $\vec{v}$ — вектор скоростей изменения во времени координат q_i и импульсов p_i (то есть компонент вектора состояния системы $\vec{x}$) согласно законам динамики частиц. Индекс k обозначает сплошную нумерацию компонент $\vec{x}$.

Движение точки $\vec{x}$, изображающей состояние изолированной системы, описывается уравнениями Гамильтона [Ландау, Лифшиц, 1988]:

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H(\vec{q}, \vec{p})}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H(\vec{q}, \vec{p})}{\partial q_i}, \tag{3}$$

где H — гамильтониан всей системы. Вследствие ее изолированности $H(\vec{q}, \vec{p}) = E = \text{const}$, где E — полная энергия системы. Величины $\frac{dq_i}{dt}$ и $\frac{dp_i}{dt}$ — это скорости v_k. Нумерация i связана с k следующим образом: $i = k$ при $k = 1 \div 3N$, $i = k - 3N$ при $k = (3N + 1) \div 6N$.

Соотношение $H(\vec{q}, \vec{p}) = E = \text{const}$ описывает гиперповерхность в пространстве $\vec{x} = \begin{pmatrix}\vec{q}\\ \vec{p}\end{pmatrix}$, на которой происходят все события, связанные с эволюцией рассматриваемой системы частиц. Обозначим эту поверхность как Surf_E. Плотность распределения вероятностей $f(\vec{x}, t)$ нормируется следующим образом [Климонтович, 1995]:

$$\int\limits_{\text{Surf}_\text{E}} f(\vec{x}, t)\, d\vec{x} = \int\limits_{\text{Surf}_\text{E}} f(\vec{q}, \vec{p}, t)\, d\vec{q}\, d\vec{p} = 1. \tag{4}$$

Величина $d\vec{x}$ является произведением дифференциалов всех компонент вектора $\vec{x}$. Интегрирование производится по всему объему области Surf_E, который обозначим как Ω. Условие нормировки должно соблюдаться для всех моментов времени t.

Для дальнейшего анализа удобной является другая форма уравнения (1). Согласно изложенному в приложении 1, в случае, когда компонентами $\vec{x}$ являются именно импульсы q_i, а не скорости частиц, выражение для дивергенции имеет вид

$$\operatorname{div}(\vec{v}(\vec{x})f(\vec{x},\,t)) = \sum_{k=1}^{6N} v_k(\vec{x})\frac{\partial f(\vec{x},\,t)}{\partial x_k}.$$

Тогда

$$\frac{\partial f(\vec{x},\,t)}{\partial t} + \sum_{k=1}^{6N} v_k(\vec{x})\frac{\partial f(\vec{x},\,t)}{\partial x_k} = 0. \tag{5}$$

Выражение, стоящее в левой части (5), известно в гидродинамике как конвективная производная [Седов, 1970]. Это полная производная по направлению траектории, описываемой уравнениями (3) и проходящей через точку $\vec{x}$:

$$\frac{\partial f(\vec{x},\,t)}{\partial t} + \sum_{k=1}^{6N} v_k(\vec{x})\frac{\partial f(\vec{x},\,t)}{\partial x_k} = \frac{df(\vec{x},\,t)}{dt}.$$

Подчеркнем, что, в отличие от $\frac{\partial f(\vec{x},\,t)}{\partial t}$, величина $\frac{df(\vec{x},\,t)}{dt}$ является полной производной от f по времени. Тогда уравнение (5) принимает вид

$$\frac{df(\vec{x},\,t)}{dt} = 0 \tag{6}$$

— в отсутствие случайных переходов между микросостояниями плотность вероятности распределения системы по микросостояниям не изменяется с течением времени.

Теперь введем в уравнения (5) и (6) влияние случайности. Обозначим через $\varphi(\vec{\xi},\,\vec{x})$ вероятность перескока системы из микросостояния $\vec{\xi}$ в микросостояние $\vec{x}$ за единицу времени. Причиной такого события может быть, например, столкновение частиц. В описываемой модели переход $\vec{\xi} \to \vec{x}$ считается мгновенным. Во всех выражениях, где участвует φ, первый аргумент описывает исходное состояние перед случайным переходом, а второй — конечное состояние. Тогда кинетическое уравнение, изначально имевшее форму (5), приобретает вид

$$\frac{\partial f(\vec{x},\,t)}{\partial t} = -\sum_{k=1}^{K}\frac{\partial}{\partial x_k}(v_k(\vec{x})f(\vec{x},\,t)) + \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \varphi(\vec{\xi},\,\vec{x})f(\vec{\xi},\,t)\,d\vec{\xi} - f(\vec{x},\,t)\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \varphi(\vec{x},\,\vec{\xi})\,d\vec{\xi}. \tag{7}$$

Здесь член с $\varphi(\vec{\xi},\,\vec{x})$ описывает случайный приход из различных состояний $\vec{\xi}$ в описываемое величиной f состояние $\vec{x}$, а член с $\varphi(\vec{x},\,\vec{\xi})$, напротив, — случайный уход из $\vec{x}$ в иные состояния $\vec{\xi}$. В обоих членах присутствует одна и та же функция φ, поскольку эти члены описывают один и тот же процесс, заданный на одном и том же множестве состояний системы. Состояния, описываемые векторами $\vec{\xi}$, являются микросостояниями, иными, чем описываемое вектором $\vec{x}$, но $\vec{x}$ и все $\vec{\xi}$ относятся к одному и тому же моменту времени.

Кинетическое уравнение (6) при наличии случайных переходов между микросостояниями принимает следующий вид, который удобен для исследования:

$$\frac{df(\vec{x},\,t)}{dt} = \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \varphi(\vec{\xi},\,\vec{x})f(\vec{\xi},\,t)\,d\vec{\xi} - f(\vec{x},\,t)\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \varphi(\vec{x},\,\vec{\xi})\,d\vec{\xi}. \tag{8}$$

Уравнение (8) получается непосредственно из (7) аналогично переходу от (5) к (6). Оно отражает изменение плотности распределения f вдоль траектории $\vec{x}(t)$, которая описывается динамикой системы частиц в случае, когда случайные переходы между траекториями отсутствуют.

Кинетическое уравнение в форме (8) наиболее удобно для нахождения его решений, описывающих переходные процессы в рассматриваемой системе.

Энтропия

Энтропия системы с непрерывным множеством микроскопических состояний имеет вид [Зубарев, 1971; Климонтович, 1995]

$$S = -\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} f(\vec{q},\,\vec{p})\ln f(\vec{q},\,\vec{p})\,d\vec{q}\,d\vec{p} = -\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} f(\vec{x})\ln f(\vec{x})\,d\vec{x}. \tag{9}$$

Это выражение для безразмерной энтропии. Размерная энтропия получается умножением S на константу Больцмана $k_{\mathrm{B}} = 1{,}38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К.

Энтропия не является случайной величиной. Случайными величинами являются переменные $\vec{q}$ и $\vec{p}$, а также их объединение $\vec{x}$. Энтропия (9) является интегралом от выражения, содержащего плотность распределения, и в этом отношении она сродни моментам случайной величины.

Рассмотрим свойства величины (9).

1°. Найдем вид распределения $f(\vec{x})$, обеспечивающий максимум S. Максимальность энтропии в случае, когда изолированная система приходит в состояние полного равновесия, часто постулируется или выводится не совсем строгим образом. Распределение вероятностей микроскопических состояний в этом случае носит название микроканонического. Вид равновесного распределения, его устойчивость и максимальность энтропии — это различные, хотя и тесно связанные, аспекты одной задачи.

Условием экстремума S является равенство нулю вариации этой величины. При этом вариации $\vec{x}$ (то есть $\vec{q}$ и $\vec{p}$) должны удовлетворять двум ограничениям: соблюдение условия нормировки (4) и принадлежность всех рассматриваемых точек $\vec{x}$ гиперповерхности $\mathrm{Surf_E}$ ($H(\vec{q},\,\vec{p}) = E$). Поэтому нужно найти вид распределения $f(\vec{q},\,\vec{p})$, обеспечивающий экстремум величины [Эльсгольц, 1965]:

$$S^* = -\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} [f(\vec{q},\,\vec{p})\ln f(\vec{q},\,\vec{p}) - \lambda_1 f(\vec{q},\,\vec{p}) - \lambda_2(H(\vec{q},\,\vec{p}) - E)]\,d\vec{q}\,d\vec{p}, \tag{10}$$

где λ_1 и λ_2 — неопределенные множители. В отличие от (10) аналогичные выражения, представленные в литературе, либо не включают условие $H(\vec{q},\,\vec{p}) = E$, либо относят его не к изолированной системе.

Зависимость $f(\vec{q},\,\vec{p})$ находится из условия равенства нулю вариации S^*. Согласно сказанному в приложении 2, это имеет место при $f(\vec{q},\,\vec{p}) = \mathrm{const}$. Обозначим плотность распределения, обеспечивающую **экстремум** энтропии и удовлетворяющую условию нормировки (4), как f_{ext}. Она имеет вид

$$f_{\mathrm{ext}}(\vec{q},\,\vec{p}) = \frac{1}{\Omega}. \tag{11}$$

Энтропия, соответствующая этому распределению вероятностей, равна

$$S_{\mathrm{ext}} = -\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \frac{1}{\Omega}\ln\frac{1}{\Omega}\,d\vec{q}\,d\vec{p} = \ln\Omega. \tag{12}$$

2°. При поиске максимума энтропии, как правило, ограничиваются вариационным алгоритмом, который на самом деле дает лишь условия экстремума. Необходимо доказать, что этот экстремум является максимумом. Для этого рассмотрим изменение энтропии в окрестности f_{ext}. Пусть в результате варьирования всех q_i и p_i плотность вероятности приобретает отклонения

от f_{ext}: $f(\vec{q},\,\vec{p}) = \frac{1}{\Omega} + \delta f(\vec{q},\,\vec{p})$. При этом каждая вариация δf не может быть совершенно произвольной, так как $f(\vec{q},\,\vec{p})$ должна удовлетворять условию нормировки. Отсюда

$$\int\limits_{\text{Surf}_\text{E}} \delta f(\vec{q},\,\vec{p})\,d\vec{q}\,d\vec{p} = 0. \tag{13}$$

Энтропия в окрестности ее экстремума:

$$S_{\text{ext}} + \delta S = -\int\limits_{\text{Surf}_\text{E}} \left(\frac{1}{\Omega} + \delta f\right) \ln\left(\frac{1}{\Omega} + \delta f\right) d\vec{q}\,d\vec{p}.$$

Воспользуемся разложением функции $y = x\ln x$ в окрестности некоторой точки x_0 до квадратичного члена включительно:

$$x\ln x = x_0\ln x_0 + (\ln x_0 + 1)(x - x_0) + \frac{1}{2x_0}(x - x_0)^2 + \ldots \tag{14}$$

Полагая здесь $x_0 = \frac{1}{\Omega}$, $x - x_0 = \delta f$, находим

$$S_{\text{ext}} + \delta S = -\int\limits_{\text{Surf}_\text{E}} \frac{1}{\Omega}\ln\frac{1}{\Omega}d\vec{x} - \left(\ln\frac{1}{\Omega} + 1\right)\int\limits_{\text{Surf}_\text{E}} (\delta f)\,d\vec{q}\,d\vec{p} - \frac{\Omega}{2}\int\limits_{\text{Surf}_\text{E}} (\delta f)^2\,d\vec{q}\,d\vec{p} + \ldots$$

Поскольку первый член в правой части равен S_{ext}, а второй равен нулю в силу (13), то

$$\delta S = -\frac{\Omega}{2}\int\limits_{\text{Surf}_\text{E}} (\delta f)^2\,d\vec{q}\,d\vec{p}. \tag{15}$$

Отсюда видно, что $\delta S < 0$, и поэтому значение энтропии, даваемой выражением (12), является максимумом.

3°. Рассмотрим поведение энтропии в достаточно большом диапазоне отклонения $f(\vec{q},\,\vec{p})$ от $\frac{1}{\Omega}$, воспользовавшись подходом, примененным нами в случае дискретного множества микросостояний [Minkevich, 2023]. Разделим поверхность Surf_E на две произвольные части: Surf_E^1 и Surf_E^2, имеющие площади Ω_1 и Ω_2 соответственно, причем $\Omega_1 + \Omega_2 = \Omega$. Пусть плотность распределения $f(\vec{q},\,\vec{p})$ на каждой из этих частей имеет постоянные значения, отличающиеся от $\frac{1}{\Omega}$. Обозначая величины, относящиеся к Surf_E^1 и Surf_E^2, индексами 1 и 2, имеем $f_1 = \frac{1}{\Omega} + \delta f_1$, $f_2 = \frac{1}{\Omega} + \delta f_2$ соответственно. Условие нормировки плотности распределения вероятностей в этом случае имеет вид

$$\int\limits_{\text{Surf}_\text{E}^1} f_1\,d\vec{q}\,d\vec{p} + \int\limits_{\text{Surf}_\text{E}^2} f_2\,d\vec{q}\,d\vec{p} = 1,$$

откуда $\Omega_1\,\delta f_1 + \Omega_2\,\delta f_2 = 0$. Последнее соотношение накладывает связь на величины δf_1 и δf_2: $\delta f_2 = -\frac{\Omega_1}{\Omega_2}\,\delta f_1$.

Введем параметры κ_1 и ρ_1 согласно соотношениям $\delta f_1 = \frac{1}{\Omega}\kappa_1$, $\Omega_1 = \rho_1\Omega$. Тогда $\Omega_2 = (1 - \rho_1)\Omega$, $\delta f_2 = -\frac{\rho_1}{1-\rho_1}\frac{1}{\Omega}\kappa_1$.

Энтропия системы в этом случае равна

$$S = \ln\Omega + \delta S = -\int\limits_{\text{Surf}_\text{E}^1} \left(\frac{1}{\Omega} + \delta f_1\right)\ln\left(\frac{1}{\Omega} + \delta f_1\right) d\vec{q}\,d\vec{p} - \int\limits_{\text{Surf}_\text{E}^2} \left(\frac{1}{\Omega} + \delta f_2\right)\ln\left(\frac{1}{\Omega} + \delta f_2\right) d\vec{q}\,d\vec{p}. \tag{16}$$

Преобразования, описанные в приложении 3, дают

$$\delta S = -\rho_1(1+\kappa_1)\ln(1+\kappa_1) - (1-\rho_1)\left(1+\frac{\rho_1}{1-\rho_1}\kappa_1\right)\ln\left(1+\frac{\rho_1}{1-\rho_1}\kappa_1\right). \tag{17}$$

Это выражение получено для систем, у которых множество микроскопических состояний является непрерывным. Оно идентично выражению, полученному ранее в нашей работе [Minkevich, 2023] для систем с дискретным множеством микросостояний. Соответственно, анализ этого выражения, проведенный в упомянутой работе, справедлив и для рассматриваемых здесь систем.

Кинетика плотности распределения частиц в фазовом пространстве

1°. Проверим, соблюдается ли с течением времени условие нормировки (4) для решений уравнения (8). Для этого проинтегрируем (8) по всем компонентам вектора $\vec{x} = \begin{pmatrix}\vec{q}\\ \vec{p}\end{pmatrix}$ по поверхности $\mathrm{Surf_E}$:

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} f(\vec{x},\,t)\,d\vec{x} = \int\limits_{\mathrm{Surf_E}}\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \varphi(\vec{\xi},\,\vec{x})f(\vec{\xi},\,t)\,d\vec{\xi}\,d\vec{x} - \int\limits_{\mathrm{Surf_E}}\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} f(\vec{x},\,t)\varphi(\vec{x},\,\vec{\xi})\,d\vec{\xi}\,d\vec{x}. \tag{18}$$

Оба слагаемых в правой части этого выражения при двойном интегрировании включают в себя все возможные переходы между микроскопическими состояниями. Переименовывая во втором интеграле переменные ($\vec{x} \to \vec{\xi}$ и $\vec{\xi} \to \vec{x}$), мы получаем, что в (18) второй двойной интеграл равен первому — скорости переходов в любое микросостояние и из него в общем балансе компенсируют друг друга. Следовательно,

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} f(\vec{x},\,t)\,d\vec{x} = 0 \tag{19}$$

и

$$\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} f(\vec{x},\,t)\,d\vec{x} = \mathrm{const}$$

для всех значений времени. Поскольку при $t = 0$ const = 1, условие (4) соблюдается всегда. В частности, это подтверждает корректность кинетического уравнения в форме (7) и (8).

2°. Стационарное решение для плотности распределения частиц равно $f(\vec{x}) = f_0 = \mathrm{const}$. Это удовлетворяет уравнениям (18)–(19). Подставляя $f(\vec{x}) = f_0$ в (8), получаем баланс скоростей:

$$\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} [\varphi(\vec{\xi},\,\vec{x}) - \varphi(\vec{x},\,\vec{\xi})]\,d\vec{\xi} = 0. \tag{20}$$

Далее, подставляя f_0 в условие нормировки (4), получаем $f_0 = \frac{1}{\Omega}$, где $\Omega = \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} d\vec{x}$ — площадь многомерной поверхности $\mathrm{Surf_E}$, на которой происходят все события, связанные с рассматриваемой системой. Таким образом, стационарное распределение является равномерным.

3°. Для изучения переходных процессов введем величину $D(\vec{x},\,t)$ — отклонение $f(\vec{x},\,t)$ от стационарного решения $\frac{1}{\Omega}$:

$$f(\vec{x},\,t) = \frac{1}{\Omega} + D(\vec{x},\,t). \tag{21}$$

Условие нормировки для $D(\vec{x},\, t)$, которое следует из (4) и (21), имеет вид

$$\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} D(\vec{x},\, t)\, d\vec{x} = 0. \tag{22}$$

Подставляя (21) в (7) и (8), получаем две формы уравнения для $D(\vec{x},\, t)$:

$$\frac{\partial D(\vec{x},\, t)}{\partial t} = -\sum_{k=1}^{K} \frac{\partial}{\partial x_k}(v_k(\vec{x})D(\vec{x},\, t)) + \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \varphi(\vec{\xi},\, \vec{x})D(\vec{\xi},\, t)\, d\vec{\xi} - D(\vec{x},\, t) \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \varphi(\vec{x},\, \vec{\xi})\, d\vec{\xi}, \tag{23}$$

$$\frac{dD(\vec{x}(t),\, t)}{dt} = \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \varphi(\vec{\xi},\, \vec{x})D(\vec{\xi},\, t)\, d\vec{\xi} - D(\vec{x},\, t) \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \varphi(\vec{x},\, \vec{\xi})\, d\vec{\xi}. \tag{24}$$

При рассмотрении переходных процессов удобно представить $\varphi(\vec{x},\, \vec{\xi})$ в следующем виде:

$$\varphi(\vec{x},\, \vec{\xi}) = \varphi_0 \Omega g(\vec{x},\, \vec{\xi}),$$

где

$$\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{x},\, \vec{\xi})\, d\vec{\xi} = 1$$

для всех $\vec{x}$. Тогда

$$\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \varphi(\vec{x},\, \vec{\xi})\, d\vec{\xi} = \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \varphi_0 \Omega g(\vec{x},\, \vec{\xi})\, d\vec{\xi} = \varphi_0 \Omega.$$

Коэффициент φ_0 ответственен за интенсивность случайных переходов между микросостояниями. Тогда уравнения (23) и (24) принимают вид

$$\frac{\partial D(\vec{x},\, t)}{\partial t} = -\sum_{k=1}^{K} \frac{\partial}{\partial x_k}(v_k(\vec{x})D(\vec{x},\, t)) + \varphi_0 \Omega \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{\xi},\, \vec{x})D(\vec{\xi},\, t)\, d\vec{\xi} - \varphi_0 \Omega D(\vec{x},\, t), \tag{25}$$

$$\frac{dD(\vec{x},\, t)}{dt} = \varphi_0 \Omega \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{\xi},\, \vec{x})D(\vec{\xi},\, t)\, d\vec{\xi} - \varphi_0 \Omega D(\vec{x},\, t). \tag{26}$$

4°. Рассмотрим крайний случай, когда $g(\vec{x},\, \vec{\xi}) = \mathrm{const} = \frac{1}{\Omega}$, откуда $\varphi = \varphi_0 = \mathrm{const}$. С физической точки зрения сложно представить себе объект, у которого частицы с одинаковой вероятностью взаимодействуют при самом различном удалении друг от друга. Однако с математической точки зрения этот пример полезен для исследования поведения плотности распределения вероятностей нахождения частиц в фазовом пространстве. Тогда получаем, что в данном случае первый член в правой части (26), согласно (22), равен нулю, и уравнение кинетики $D(\vec{x},\, t)$ имеет вид

$$\frac{dD(\vec{x},\, t)}{dt} = -\varphi_0 \Omega D(\vec{x},\, t). \tag{27}$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$D(\vec{x},\, t) = D(\vec{x},\, 0)e^{-\varphi_0 \Omega t}. \tag{28}$$

Полная величина плотности распределения частиц в фазовом пространстве в этом случае имеет вид

$$f(\vec{x},\, t) = \frac{1}{\Omega} + \left[f(\vec{x},\, 0) - \frac{1}{\Omega} \right] e^{-\varphi_0 \Omega t}. \tag{29}$$

Отсюда следует, что при $\varphi = \varphi_0$ стационарное решение $f = \frac{1}{\Omega}$ является устойчивым, так как все траектории $\vec{x}(t)$ сходятся к нему, и при этом форма $D(\vec{x}, t)$ — отклонения от $f = \frac{1}{\Omega}$ — сохраняется, а величина этих отклонений уменьшается с одним и тем же коэффициентом:

$$\frac{D(\vec{x}(t), t)}{D(\vec{x}(0), 0)} = e^{-\varphi_0 \Omega t}.$$

Противоположный крайний случай имеет место, когда переходов между соседними микросостояниями вообще нет. Тогда $g(\vec{x}, \vec{\xi}) = \delta(\vec{\xi} - \vec{x})$ (дельта-функция), и уравнение (8) имеет вид

$$\frac{df(\vec{x}(t), t)}{dt} = \varphi_0 \Omega f(\vec{x}, t) - \varphi_0 \Omega f(\vec{x}, t) = 0$$

— гидродинамическая ситуация.

5°. Рассмотрим более реалистичную с физической точки зрения ситуацию, когда случайные переходы между микроскопическими состояниями возможны с различной вероятностью, зависящей от расстояния между ними. Примем следующую модель:

$$g(\vec{\xi}, \vec{x}) = \prod_{k=1}^{6N} g_k(\xi_k, x_k),$$

где каждая функция $g_k(\xi_k, x_k) = g_k(\xi_k - x_k) = g_k(x_k - \xi_k)$ симметрична относительно x_k. Все g_k удовлетворяют условию

$$\oint g_k(\xi_k, x_k)\, d\xi_k = 1,$$

что обеспечивает справедливость условия

$$\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{x}, \vec{\xi})\, d\vec{\xi} = 1.$$

Здесь и далее каждый интеграл $\oint \ldots d\xi_i$ означает интегрирование вдоль одной переменной ξ_k при прочих постоянных фазовых переменных. Поскольку путь интегрирования проходит по замкнутой поверхности $\mathrm{Surf_E}$, то область интегрирования представляет собой замкнутый контур.

Будем рассматривать отклонение от стационарного решения в виде

$$D(\vec{x}, t) = \sum_{k=1}^{6N} D_k(x_k, t).$$

Подставляя это выражение в уравнение (26), получаем для каждого слагаемого D_k свое кинетическое уравнение, аналогичное (26):

$$\frac{dD_k(x_k, t)}{dt} = \varphi_0 \Omega \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{\xi}, \vec{x}) D_k(\xi_k, t)\, d\vec{\xi} - \varphi_0 \Omega D_k(x_k, t).$$

Подстановка сюда выражения для $g(\vec{\xi}, \vec{x})$ как произведения одномерных зависимостей позволяет преобразовать интеграл в первом члене правой части этих уравнений. Используем то, что кратный интеграл от произведения функций, каждая из которых зависит только от одной переменной,

равен произведению интегралов от сомножителей по отдельным переменным. Тогда

$$\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{\xi},\,\vec{x})D_k(\xi_k,\,t)\,d\vec{\xi} = \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \prod_{l=1}^{6N} g_l(\xi_l,\,x_l)D_k(\xi_k,\,t)\,d\vec{\xi} = \prod_{l=1}^{6N} \oint g_l(\xi_l,\,x_l)D_k(\xi_k,\,t)\,d\xi_k =$$

$$= \oint D_k(\xi_k,\,t)g_k(\xi_k,\,x_k)\,d\xi_k \cdot \prod_{l\neq k} \oint g_l(\xi_l,\,x_l)\,d\xi_l.$$

Поскольку все $\oint g_l(\xi_l,\,x_l)\,d\xi_l = 1$, мы получаем

$$\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{\xi},\,\vec{x})D_k(\xi_k,\,t)\,d\vec{\xi} = \oint g_k(\xi_k,\,x_k)D_k(\xi_k,\,t)\,d\xi_k.$$

Поверхность $\mathrm{Surf_E}$ является замкнутой, вследствие чего изменение любой переменной x_k происходит в ограниченном интервале. Обозначим величину каждого такого интервала как L_k. В дальнейшем мы будем вычислять интеграл по замкнутому контуру $\oint \ldots\, d\xi_k$ в симметричных пределах от $\xi_k = x_k - \frac{L_k}{2}$ до $\xi_k = x_k + \frac{L_k}{2}$. Тогда кинетические уравнения для $D_k(x_k)$ в данной модели имеют вид

$$\frac{dD_k(x_k,\,t)}{dt} = \varphi_0\Omega \int\limits_{x_k-L_k/2}^{x_k+L_k/2} g_k(\xi_k,\,x_k)D_k(\xi_k)\,d\xi_k - \varphi_0\Omega D_k(x_k,\,t). \tag{30}$$

Напомним, что k — номер переменной из фазового пространства.

Решение для каждой из функций $D_k(x_k,\,t)$ будем искать в виде ряда:

$$D_k(x_k,\,t) = \sum_{m=1}^{\infty} D_{km}(x_k)U_{km}(t). \tag{31}$$

Вид функций $D_{km}(x_k)$ и $U_{km}(t)$ определим ниже. Из (31) следует

$$\frac{dD_k(x_k,\,t)}{dt} = \sum_{m=1}^{\infty} D_{km}(x_k)\frac{dU_{km}(t)}{dt}. \tag{32}$$

Подставляя (31) и (32) в (30), получаем совокупность уравнений для каждого m-го слагаемого формулы (31):

$$D_{km}(x_k)\frac{dU_{km}(t)}{dt} = \varphi_0\Omega \int\limits_{x_k-L_k/2}^{x_k+L_k/2} g_k(\xi_k,\,x_k)D_{km}(x_k)U_{km}(t)\,d\xi_k - \varphi_0\Omega D_{km}(x_k)U_{km}(t).$$

Деление этих уравнений на $D_{km}(x_k)U_{km}(t)$ приводит к разделению переменных:

$$\frac{1}{U_{km}(t)}\frac{dU_{km}(t)}{dt} = \frac{1}{D_{km}(x_k)}\left[\varphi_0\Omega \int\limits_{x_k-L_k/2}^{x_k+L_k/2} g_k(\xi_k,\,x_k)D_{km}(x_k)\,d\xi_k - \varphi_0\Omega D_{km}(x_k)\right] = -\lambda_{km}. \tag{33}$$

Минус при неизвестной пока величине λ_{km} поставлен для удобства ее дальнейшего использования.

Тогда уравнение для каждой величины $U_{km}(t)$ имеет простой вид:

$$\frac{dU_{km}(t)}{dt} = -\lambda_{km} U_{km}(t). \tag{34}$$

Его решение:

$$U_{km}(t) = U_{km}(0) e^{-\lambda_{km} t}. \tag{35}$$

Значение λ_{km} будет найдено ниже.

Пространственно зависимая часть выражения (33) дает следующее уравнение:

$$\varphi_0 \Omega \int\limits_{x_k - L_k/2}^{x_k + L_k/2} g_k(\xi_k, x_k) D_{km}(x_k)\, d\xi_k + (\lambda_{km} - \varphi_0 \Omega) D_{km}(x_k) = 0. \tag{36}$$

Будем искать совокупность величин $D_{km}(x_k)$ в виде тригонометрического ряда. Каждую функцию $D_{km}(x_k)$ мы представим в виде

$$D_{km}(x_k) = A_{km} \cos\left(2\pi m \frac{x_k}{L_k}\right) + B_{km} \sin\left(2\pi m \frac{x_k}{L_k}\right). \tag{37}$$

В нашем случае эта формула для всех m работает в интервале $0 \leqslant x_k \leqslant L_k$. Выражения (37) задают форму *пространственных мод*, образующих решение уравнения (30). Ввиду условия (22) величины D_{km} не могут иметь постоянной составляющей (не зависящей от x_k). Поэтому номера мод m лежат в диапазоне $1 \leqslant m < \infty$.

Учитывая, что любая функция g_k должна быть симметричной и, соответственно, иметь форму $g_k(\xi_k, x_k) = g_k(\xi_k - x_k) = g_k(x_k - \xi_k)$ (см. выше), интеграл в (36) равен

$$\int\limits_{x_k - L_k/2}^{x_k + L_k/2} g_k(\xi_k - x_k) D_{km}(x_k)\, d\xi_k =$$

$$= A_{km} \int\limits_{x_k - L_k/2}^{x_k + L_k/2} g_k(\xi_k - x_k) \cos\left(2\pi m \frac{x_k}{L_k}\right) d\xi_k + B_{km} \int\limits_{x_k - L_k/2}^{x_k + L_k/2} g_k(\xi_k - x_k) \sin\left(2\pi m \frac{x_k}{L_k}\right) d\xi_k. \tag{38}$$

Преобразование этого равенства описано в приложении 4. Подставляя его результат, (55), в (36), получаем

$$\left[\varphi_0 \Omega \int\limits_{x_k - L_k/2}^{x_k + L_k/2} g_k(\xi_k - x_k) \cos\left(2\pi m \frac{\xi_k - x_k}{L_k}\right) d\xi_k + (\lambda_{km} - \varphi_0 \Omega)\right] D_{km}(x_k) = 0.$$

Поскольку мы ищем решение $D_{km}(x_k) \neq 0$, то равно нулю выражение в квадратных скобках. Отсюда следует общее выражение для λ_{km}, действующее для любой симметричной (и, разумеется, неотрицательной) функции $g_k(\xi_k - x_k)$:

$$\lambda_{km} = \varphi_0 \Omega (1 - I_{km}), \tag{39}$$

где

$$I_{km} = \int\limits_{x_k - L/2}^{x_k + L/2} g_k(\xi_k - x_k) \cos\left(2\pi m \frac{\xi_k - x_k}{L_k}\right) d\xi_k. \tag{40}$$

Поскольку подынтегральная функция в (40) симметрична относительно аргумента $\xi_k - x_k$ и интеграл берется в симметричных пределах, то для I_{km} справедливо следующее выражение, которое удобно для численного исследования:

$$I_{km} = 2\int\limits_{x_k}^{x_k+L/2} g_k(\xi_k - x_k)\cos\left(2\pi m\frac{\xi_k - x_k}{L_k}\right)d\xi_k. \tag{41}$$

Напомним, что D_k — отклонение плотности распределения от ее стационарного значения в направлении k-й фазовой координаты. λ_{km} характеризует скорость затухания m-й моды величины D_k.

6°. Представляет интерес вопрос о том, насколько коэффициент затухания каждой m-й моды λ_{km} зависит от формы функции $g_k(\xi_k - x_k)$. Поскольку эта функция характеризует вероятность перехода между микроскопическими состояниями, то важной характеристикой ее формы является дисперсия случайной величины $\xi_k - x_k$, которую обозначим как $\sigma^2_{\xi_k}$. Чем больше $\sigma^2_{\xi_k}$, тем более удалены друг от друга микросостояния (динамические траектории), между которыми возможен случайный переход. Зависимость λ_{km} от $\sigma^2_{\xi_k}$ удобна для сравнения различных видов $g_k(\xi_k - x_k)$ с точки зрения влияния формы этих функции на скорости затухания мод.

Рассмотрим сначала поведение $\lambda_{km}\left(\sigma^2_{\xi_k}\right)$ вблизи $\sigma^2_{\xi_k} = 0$. Представим косинус в окрестности точки $\xi_k = x_k$ в виде двух первых членов разложения в ряд Тейлора:

$$\cos\left(2\pi m\frac{\xi_k - x_k}{L_k}\right) = 1 - \frac{1}{2}\left(2\pi m\frac{\xi_k - x_k}{L_k}\right)^2.$$

Отсюда видно, что в окрестности точки $\xi_k = x_k$ косинус близок к параболе, ветви которой обращены вниз и идут тем круче, чем больше номер моды m. Далее, функции $g_k(\xi_k - x_k)$ при отдалении ξ_k от x_k уменьшаются и при достаточно большом расстоянии ξ_k от x_k стремятся к нулю. Выберем диапазон значений $|\xi_k - x_k| \leqslant \varsigma_k$, исключающий «хвосты» функции $g_k(\xi_k - x_k)$ так, что интеграл $\int\limits_{x_k-\varsigma_k}^{x_k+\varsigma_k} g_k(\xi_k - x_k)\,d\xi_k$ близок к единице. Это соответствует условию нормировки g_k. Рассмотрим те значения m, при которых $\cos\left(2\pi m\frac{\xi_k - x_k}{L_k}\right)$ в диапазоне $|\xi_k - x_k| \leqslant \varsigma_k$ может быть представлен как вышеупомянутая парабола. Тогда

$$I_{km} = \int\limits_{x_k-L/2}^{x_k+L/2} g_k(\xi_k - x_k)\,d\xi_k - \frac{1}{2}\left(\frac{2\pi m}{L_k}\right)^2\int\limits_{x_k-L/2}^{x_k+L/2}(\xi_k - x_k)^2 g_k(\xi_k - x_k)\,d\xi_k = 1 - 2(\pi m)^2\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{(L_k)^2}.$$

Отсюда

$$\lambda_{km} = 2\pi^2\varphi_0\Omega m^2\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{(L_k)^2}. \tag{42}$$

Этот результат не зависит от конкретного вида функции $g_k(\xi_k - x_k)$. Он показывает, что если случайные переходы возможны только между близлежащими микросостояниями, то скорости затухания мод пропорциональны $\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{(L_k)^2}$ — относительной дисперсии расстояния таких переходов. Эти скорости резко возрастают с увеличением номера моды (пропорционально m^2).

На рис. 1 представлен ряд зависимостей величины $1 - I_{km}$ от $\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{(L_k)^2}$ для различных значений m. Форма зависимости $1-I_{km}\left(\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{(L_k)^2}\right)$ определяет форму зависимости $\lambda_{km}\left(\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{(L_k)^2}\right)$. Кривые рис. 1 получены численным интегрированием согласно алгоритму, описанному ниже. В качестве конкретной зависимости $g_k(\xi_k - x_k)$ взято нормальное распределение случайной величины $(\xi_k - x_k)$. Из рисунка видно, что начальные части кривых, прилегающие к $\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{(L_k)^2} = 0$, прямолинейны, что соответствует общей закономерности (42). Чем больше значение m, тем меньше те значения $\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{(L_k)^2}$, при которых становятся заметны отклонения этих кривых от прямолинейности.

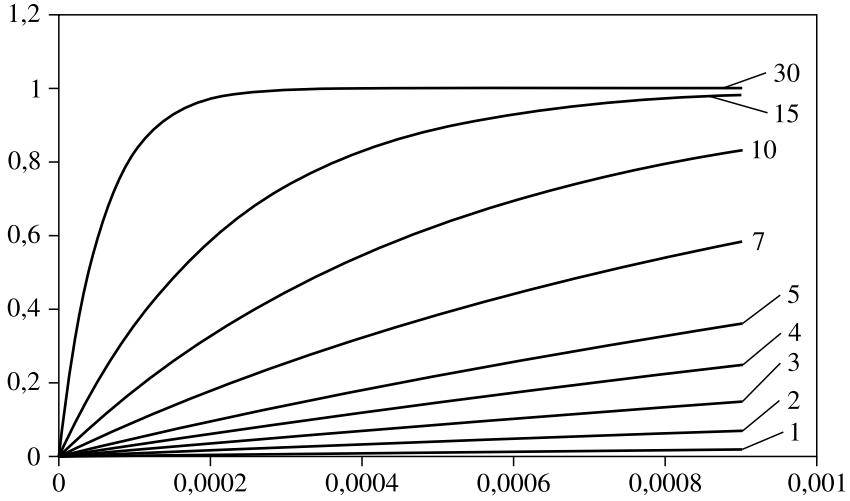


Рис. 1. Зависимости величины $1-I_{km}$ от относительной дисперсии расстояния случайных переходов между микросостояниями, $\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{(L_k)^2}$, при различных значениях порядка моды m

Исследование зависимости $\lambda_{km}\left(\sigma^2_{\xi_k}\right)$ в более широком диапазоне величины $\xi_k - x_k$, когда косинус в (40) и (41) не может быть представлен в виде квадратичной параболы, в общем случае требует численных методов, хотя для некоторых функций $g_k(\xi_k - x_k)$ интеграл I_{km} может быть найден в квадратурах.

Будем рассматривать зависимость $\lambda_{km}\left(\sigma^2_{\xi_k}\right)$ в полном диапазоне изменения переменной ξ_k: $x_k - \frac{L_k}{2} \leqslant \xi_k \leqslant x_k + \frac{L_k}{2}$. Это означает, что «хвосты» многих распределений вероятностей, определенных на бесконечном интервале $(-\infty, +\infty)$, оказываются обрезанными. Это влияет на нормировочный множитель функции $g_k(\xi_k - x_k)$, на выражение для дисперсии и некоторые другие величины. Разумеется, в случае, когда $g_k(\xi_k - x_k)$ расположена главным образом вблизи $\xi_k = x_k$, такая «обрезка» практически не имеет влияния на вышеупомянутые величины. Но если дисперсия $\xi_k - x_k$ не мала в сравнении с L_k, отбрасывание «хвостов» $g_k(\xi_k - x_k)$ имеет значение.

Для численного исследования будем использовать представление I_{km} в виде (41). Рассматриваемые ниже функции g_k зависят от аргумента $\frac{\xi_k - x_k}{a_k}$, где a_k — масштабный параметр, от которого зависит дисперсия случайной величины $(\xi_k - x_k)$. Поэтому представим g_k в виде

$$g_k(\xi_k,\, x_k) = C_k h_k\left(\frac{\xi_k - x_k}{a_k}\right),$$

где $h_k\left(\frac{\xi_k - x_k}{a_k}\right)$ задает вид зависимости g_k от своего аргумента, а C_k — нормировочный множитель. Тогда условие нормировки

$$\oint g_k(\xi_k,\, x_k)\, d\xi_k = \int\limits_{x_k - L_k/2}^{x_k + L_k/2} g_k(\xi_k,\, x_k)\, d\xi_k = 1$$

принимает вид

$$C_k \int\limits_{x_k}^{x_k + L_k/2} h_k\left(\frac{\xi_k - x_k}{a_k}\right) d\xi_k = \frac{1}{2}.$$

Отсюда

$$C_k = \left[2 \int\limits_{x_k}^{x_k + L_k/2} h_k\left(\frac{\xi_k - x_k}{a_k}\right) d\xi_k \right]^{-1}. \tag{43}$$

Дисперсия:

$$\sigma^2_{\xi_k} = \int\limits_{x_k - L_k/2}^{x_k + L_k/2} (\xi_k - x_k)^2 g_k(\xi_k - x_k)\, d\xi_k = 2C_k \int\limits_{x_k}^{x_k + L_k/2} (\xi_k - x_k)^2 h_k\left(\frac{\xi_k - x_k}{a_k}\right) d\xi_k. \tag{44}$$

Интеграл I_{km}:

$$I_{km} = 2C_k \int\limits_{x_k}^{x_k + L_k/2} h_k\left(\frac{\xi_k - x_k}{a_k}\right) \cos\left(2\pi m \frac{\xi_k - x_k}{L_k}\right) d\xi_k. \tag{45}$$

Введем безразмерную переменную $y_k = \frac{\xi_k - x_k}{L_k}$. Это удобно как для численных расчетов вообще, так и для большей общности представленного здесь анализа, поскольку величины L_k для разных систем в общем случае имеют разные значения. Тогда

$$g_k(\xi_k,\, x_k)\, d\xi_k = C_k L_k h_k\left(\frac{y_k}{\frac{a_k}{L_k}}\right) dy_k,$$

область интегрирования $x_k \leqslant \xi_k \leqslant x_k + \frac{L_k}{2}$ превращается в $0 \leqslant y_k \leqslant \frac{1}{2}$, параметр a_k становится безразмерным параметром $\frac{a_k}{L_k}$. Соответственно, (43)–(45) принимают следующий вид.

Условие нормировки:

$$C_k L_k = \left[2 \int\limits_0^{1/2} h_k\left(\frac{y_k}{\frac{a_k}{L_k}}\right) dy_k \right]^{-1}. \tag{46}$$

Относительная дисперсия дистанции случайных переходов между микросостояниями:

$$\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{L_k^2} = 2C_k L_k \int\limits_0^{1/2} y_k^2 h_k\left(\frac{y_k}{\frac{a_k}{L_k}}\right) dy_k. \tag{47}$$

Интеграл I_{km}:

$$I_{km} = 2C_k L_k \int_0^{1/2} h_k\left(\frac{y_k}{\frac{a_k}{L_k}}\right)\cos(2\pi m y_k)\,dy_k. \tag{48}$$

При задании $h_k\left(\frac{\xi_k - x_k}{a_k}\right)$ выражения (46)–(48) определяют алгоритм численного нахождения величины $1 - I_{km}\left(\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{L_k^2}\right)$, задающей вид зависимости $\lambda_{km}\left(\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{L_k^2}\right)$.

Рассмотрим зависимости $1 - I_{km}\left(\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{L_k^2}\right)$ для некоторых вариантов функции $g_k\left(\frac{\xi_k - x_k}{a_k}\right)$. Все они удовлетворяют условию нормировки

$$\int_{x_k - L_k/2}^{x_k + L_k/2} g_k\left(\frac{\xi_k - x_k}{a_k}\right) d\xi_k = 1$$

и требованию симметричности

$$g_k\left(\frac{\xi_k - x_k}{a_k}\right) = g_k\left(\frac{x_k - \xi_k}{a_k}\right).$$

Наиболее физически реальным является нормальное распределение вероятности случайных переходов между микросостояниями. Тогда

$$h_k = \exp\left\{-\frac{(\xi_k - x_k)^2}{2a_k^2}\right\} = \exp\left\{-\frac{y_k^2}{2\left(\frac{a_k}{L_k}\right)^2}\right\}.$$

Если нормальное распределение рассматривается на бесконечном интервале $(-\infty, +\infty)$, то a_k^2 равно дисперсии величины $\xi_k - x_k$. При определении этой величины на интервале $\left(-\frac{L_k}{2}, \frac{L_k}{2}\right)$ дисперсия находится по формуле (47). Для вычисления зависимости $1 - I_{km}\left(\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{L_k^2}\right)$ необходимо получить ряд значений $\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{L_k^2}$ и I_{km}, что делается путем прогонки величины $\frac{a_k}{L_k}$ и использованием соотношений (46)–(48).

Для изучения влияния вида функции $g_k(\xi_k - x_k)$ на зависимость $1 - I_{km}\left(\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{L_k^2}\right)$ нами рассмотрены еще два вида h_k: 1) распределение Лапласа (или двойное экспоненциальное)

$$h_k = \exp\left\{-\frac{|\xi_k - x_k|}{a_k}\right\} = \exp\left\{-\frac{|y_k|}{\frac{a_k}{L_k}}\right\}$$

и 2) равномерное распределение $h_k(\xi_k - x_k) = 1$ при $x_k - \frac{a_k}{2} \leqslant \xi_k \leqslant x_k + \frac{a_k}{2}$ и $h_k(\xi_k - x_k) = 0$ вне этих пределов. Первое из них имеет «хвосты», которые снижаются медленнее «хвостов» нормального распределения, второе же вовсе не имеет «хвостов». Все три распределения показаны на рис. 2. Все они построены для одного и того же значения дисперсии, равного единице. Из графика видно, что распределения *B* и *C* значительно отличаются от нормального. Это можно видеть также из того факта, что известные значения коэффициента эксцесса равны нулю у нормального распределения, 3 — у распределения Лапласа и $-\frac{6}{5}$ — у равномерного распределения.

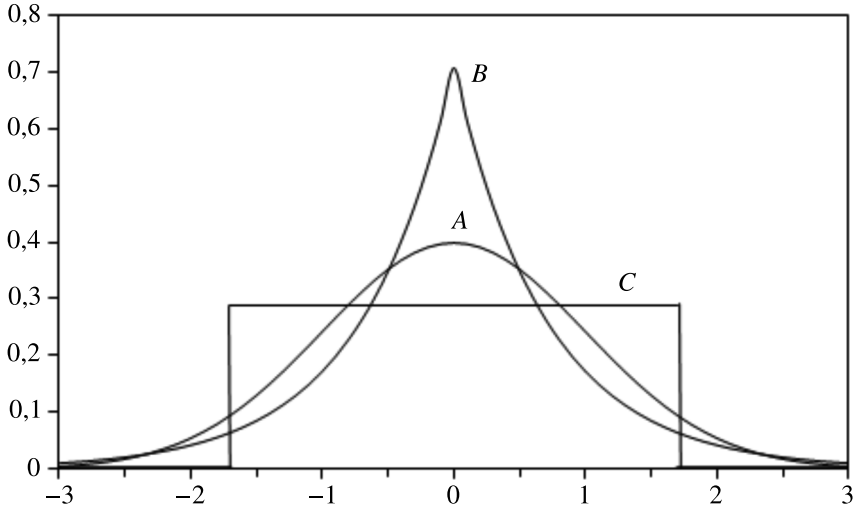


Рис. 2. Форма функций распределения, использованных в данной работе: *A* — нормальное распределение, *B* — распределение Лапласа, *C* — равномерное распределение

Разница в знаках указывает на то, что отличия формы распределений *B* и *C* от нормального носят противоположный характер. Поэтому сравнение вида зависимостей $\lambda_{km}\left(\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{(L_k)^2}\right)$ для трех вышеупомянутых форм распределения $h_k\left(\frac{\xi_k - x_k}{a_k}\right)$ в широком диапазоне аргумента $\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{(L_k)^2}$ является информативным в аспекте влияния вида вероятности случайных переходов между микросостояниями на скорость затухания мод.

На рис. 3 изображены зависимости величины $1 - I_{km}$ от $\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{L_k^2}$ — относительной дисперсии значения дистанции случайного перехода между микросостояниями, $(\xi_k - x_k)$. Для переходов по законам нормального и лапласовского распределений кривые вычислены, как описано выше. Для равномерного распределения вычисление легко проводится аналитически:

$$I_{km} = \frac{1}{a_k}\int\limits_{x_k - a_k/2}^{x_k + a_k/2} \cos\left(2\pi m \frac{\xi_k - x_k}{L_k}\right) d\xi_k = \frac{1}{a_k}\frac{L_k}{2\pi m}\sin\left(2\pi m \frac{\xi_k - x_k}{L_k}\right)\Bigg|_{\xi_k = x_k - a_k/2}^{\xi_k = x_k + a_k/2} = \frac{L_k}{a_k \pi m}\sin\left(\pi m \frac{a_k}{L_k}\right),$$

$$\lambda_{km} = \varphi_0 \Omega\left[1 - \frac{1}{a_k}\frac{L_k}{\pi m}\sin\left(\pi m \frac{a_k}{L_k}\right)\right].$$

Поскольку равномерное распределение не имеет «хвостов», его дисперсия, как и в случае определения случайной величины на интервале $(-\infty, +\infty)$, равна $\sigma^2_{\xi_k} = \frac{(a_k)^2}{12}$. Величина a_k может варьировать в пределах $0 < a_k \leqslant L_k$. При $\frac{a_k}{L_k} = 1$ скорость переходов между микросостояниями не зависит от расстояния между ними; этот случай рассмотрен в пункте 4° данного раздела. Соответственно, максимальное значение относительной дисперсии для равномерного распределения равно 0,083. Чтобы облегчить сравнение зависимостей $1 - I_{km}\left(\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{L_k^2}\right)$ для вышеупомянутых вариантов $h_k\left(\frac{\xi_k - x_k}{a_k}\right)$, все три графика на рис. 3 даны в одном и том же диапазоне аргумента $0 \leqslant \frac{\sigma^2_{\xi_k}}{L_k^2} \leqslant 0{,}08$.

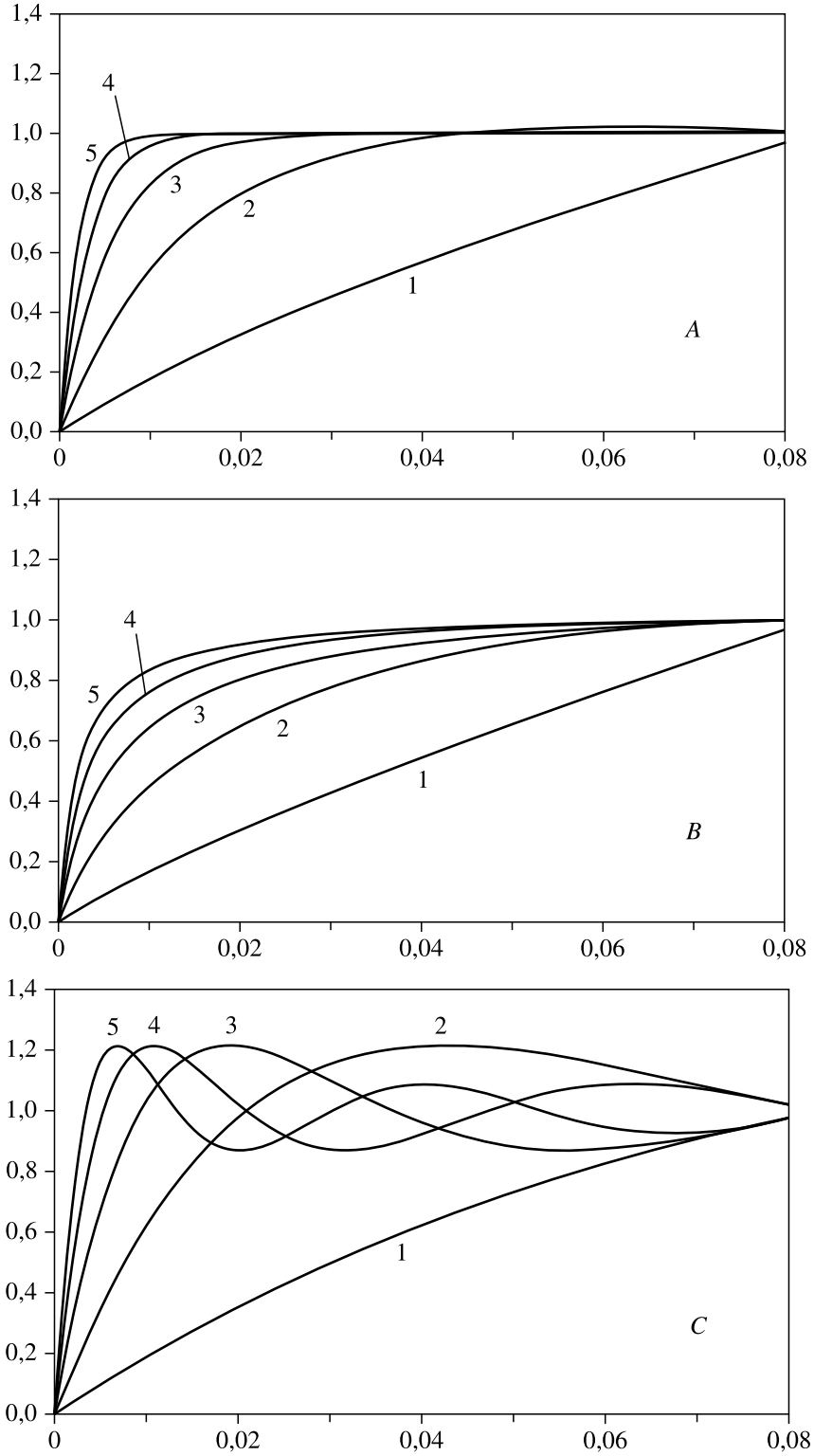


Рис. 3. Зависимость множителя $1-I_{km}$ от относительной дисперсии $\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{(L_k)^2}$ для различных функций $g_k(\xi_k - x_k)$, описывающих распределение вероятностей случайного перехода между микросостояниями: *A* — нормальное распределение, *B* — распределение Лапласа, *C* — равномерное распределение. Значения параметра m (порядок мод) указаны возле соответствующих кривых

Из рис. 3 видно, что некоторые различия между рассмотренными вариантами $h_k\left(\frac{\xi_k - x_k}{a_k}\right)$ присутствуют, но в своих главных свойствах полученные закономерности имеют больше сходства, чем различия. При малых значениях разброса дистанции случайного перехода между микросостояниями $\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{L_k^2}$ прямолинейные зависимости $\lambda_{km}\left(\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{(L_k)^2}\right)$ для скорости затухания каждой моды (каждого определенного значения m) совпадают друг с другом для всех h_k. При более высоких значениях $\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{L_k^2}$ кривые выходят на плато, величина которого примерно одинакова у рассматриваемых вариантов и близка к 1. Заметно отличается только равномерное распределение, которое при $m > 1$ показывает колебания $1 - I_{km}$ при возрастании дисперсии. Причиной является взаимодействие резких краев равномерного распределения с косинусом под интегралом I_{km}. Поскольку равномерное (П-образное) распределение для данного вида систем является скорее теоретической абстракцией, то эти особенности вряд ли могут встретиться в реальности. Для $m = 1$ графики рис. 3 практически совпадают. Для более высоких m можно видеть некоторые различия в трендах стремления к плато или (в случае равномерного распределения) к первому максимуму. Однако можно сделать вывод, что вид $h_k\left(\frac{\xi_k - x_k}{a_k}\right)$ в целом незначительно влияет не скорости затухания мод, а при малом размере переходов между микросостояниями не влияет совсем.

Выражения для энтропии и скорости ее изменения

1°. Рассмотрим выражение для энтропии (9), подставив в него плотность распределения частиц в фазовом пространстве в форме (21):

$$S(t) = -\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \left(\frac{1}{\Omega} + D(\vec{x},\, t)\right) \ln\left(\frac{1}{\Omega} + D(\vec{x},\, t)\right) d\vec{x}. \tag{49}$$

Используя соотношения $\frac{1}{\Omega} + D(\vec{x},\, t) = \frac{1}{\Omega}(1 + \Omega D(\vec{x},\, t))$, $\ln\left(\frac{1}{\Omega} + D(\vec{x},\, t)\right) = -\ln\Omega + \ln(1 + \Omega D(\vec{x},\, t))$, $\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} d\vec{x} = \Omega$ и $\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} D(\vec{x},\, t)\, d\vec{x} = 0$, преобразуем (49) к виду

$$S(t) = \ln\Omega - \frac{1}{\Omega}\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} (1 + \Omega D(\vec{x},\, t))[\ln(1 + \Omega D(\vec{x},\, t))]\, d\vec{x}. \tag{50}$$

Вычитаемое в правой части (50) показывает, насколько энтропия в неравновесной ситуации меньше ее максимального значения, которое имеет место в случае термодинамического равновесия.

При малых отклонениях $f(\vec{x},\, t)$ от $\frac{1}{\Omega}$ имеем $\Omega D(\vec{x},\, t) \ll 1$. Используя разложение подынтегрального выражения в (50) на основе (14), получаем, что энтропия вблизи стационарного состояния системы имеет вид

$$S(t) = \ln\Omega - \frac{\Omega}{2}\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} [D(\vec{x},\, t)]^2\, d\vec{x}.$$

Второй член в этом выражении совпадает с (15). Отклонение от равновесного значения плотности распределения $D(\vec{x},\, t)$ играет роль вариации δf в (15).

Вдали от равновесного состояния ($\Omega D(\vec{x},\, t) \gg 1$), напротив, $\ln(1 + \Omega D(\vec{x},\, t)) \approx \ln[\Omega D(\vec{x},\, t)]$, и тогда энтропия имеет вид

$$S(t) = \ln\Omega - \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} D(\vec{x},\, t) \ln D(\vec{x},\, t)\, d\vec{x}.$$

При этом на $D(\vec{x}, t)$ имеет место ограничение:

$$\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} D(\vec{x}, t) \ln D(\vec{x}, t)\, d\vec{x} \leqslant \ln \Omega$$

(энтропия не может быть отрицательной).

2°. Дифференцируя (50) по времени, находим

$$\frac{dS}{dt} = -\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \frac{dD(\vec{x}, t)}{dt} \ln(1 + \Omega D(\vec{x}, t))\, d\vec{x} - \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \frac{dD(\vec{x}, t)}{dt} d\vec{x}.$$

Подставляя $f(\vec{x}, t) = \frac{1}{\Omega} + D(\vec{x}, t)$ в (19), находим, что второй интеграл в этом уравнении равен нулю. Тогда

$$\frac{dS}{dt} = -\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \frac{dD(\vec{x}, t)}{dt} \ln(1 + \Omega D(\vec{x}, t))\, d\vec{x}.$$

Подставляя сюда $\frac{dD(\vec{x},t)}{dt}$ из (24) и используя $\varphi(\vec{x}, \vec{\xi}) = \varphi_0 \Omega g(\vec{x}, \vec{\xi})$, получаем

$$\frac{dS}{dt} = \varphi_0 \Omega \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} D(\vec{x}, t) \ln(1 + \Omega D(\vec{x}, t))\, d\vec{x} - \varphi_0 \Omega \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \left[\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{\xi}, \vec{x}) D(\vec{\xi}, t)\, d\vec{\xi} \right] \ln(1 + \Omega D(\vec{x}, t))\, d\vec{x}. \quad (51)$$

В приложении 5 изложено преобразование выражения (51). В результате мы получаем следующее выражение для скорости изменения энтропии:

$$\frac{dS}{dt} = \varphi_0 \Omega [\ln \Omega - S(t) - S_g(t)], \quad (52)$$

где

$$S_g(t) = \frac{1}{\Omega} \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{\xi}, \vec{x})(1 + \Omega D(\vec{\xi}, t)) \ln(1 + \Omega D(\vec{x}, t))\, d\vec{\xi} d\vec{x}. \quad (53)$$

Когда система частиц приходит к стационарному (равновесному) состоянию, $D(\vec{x}, t) = 0$, логарифм под интегралом равен нулю, $S_g = 0$, $\frac{dS}{dt} = 0$ и $S = \ln \Omega$, что подтверждает корректность уравнений (52) и (53).

Найдем величину S_g в случаях, когда $g(\vec{\xi}, \vec{x})$ принимает крайние формы зависимости от своих аргументов. Если $g(\vec{\xi}, \vec{x}) = \delta(\vec{\xi} - \vec{x})$, то

$$\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{\xi}, \vec{x})(1 + \Omega D(\vec{\xi}, t))\, d\vec{\xi} = 1 + \Omega D(\vec{x}, t).$$

Тогда, сопоставляя (53) и (50), находим, что в этом случае $S_g(t) = \frac{1}{\Omega}\Omega(\ln \Omega - S(t)) = \ln \Omega - S(t)$, и, согласно (52), $\frac{dS}{dt} = 0$, энтропия системы не меняется со временем, что совпадает с предыдущими результатами.

Другой крайний случай имеет место, когда, когда $g(\vec{x}, \vec{\xi}) = \mathrm{const} = \frac{1}{\Omega}$ (см. выше). Тогда, используя $\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} d\vec{x} = \Omega$ и $\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} D(\vec{x}, t)\, d\vec{x} = 0$, находим

$$\frac{dS}{dt} = \varphi_0 \Omega [\ln \Omega - S(t) - S_g(t)] = \varphi_0 \Omega \left[\ln \Omega - S(t) - \frac{1}{\Omega} \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \ln(1 + \Omega D(\vec{x}))\, d\vec{x} \right]. \quad (54)$$

Результаты и обсуждение

Изложенные выше результаты получены на основе модели многочастичного объекта, поведение которого во времени сочетает в себе детерминированную динамику механической системы и влияние фактора случайности. Важным свойством модели является представление о микроскопическом состоянии не как о точке в классическом фазовом пространстве, а как о многомерной динамической траектории в этом пространстве. Другой важный момент заключается в использовании феноменологической зависимости скорости случайного перехода между микросостояниями, $\varphi(\vec{\xi}, \vec{x})$, от взаимного расположения этих состояний. Эта скорость выражена в виде произведения коэффициента, зависящего от фазового объема системы Ω, и функции от координат $g(\vec{x}, \vec{\xi})$, нормированной на единицу. В данной работе принято, что $g(\vec{x}, \vec{\xi})$ является произведением функций $g_k(\xi_k - x_k)$ (k — номер фазовой переменной), где каждая g_k зависит только от одной переменной и симметрична относительно своего аргумента: $g_k(\xi_k - x_k) = g_k(x_k - \xi_k)$. Это, в частности, означает, что случайные переходы вдоль отдельных фазовых координат не коррелированы между собой. Случай, когда такая коррелированность имеет место, является предметом отдельного исследования. Рассмотрено влияние вида функций $g_k(\xi_k - x_k)$ на особенности переходных процессов в неравновесных системах, о чем сказано ниже.

Еще одна особенность данной задачи состоит в том, что все состояния рассматриваемой системы описываются точками, лежащими на замкнутой гиперповерхности в полном фазовом пространстве. Это следствие постоянства полной энергии системы из-за ее физической замкнутости. Все события, происходящие с такой системой, имеют место на этой гиперповерхности. Ее замкнутость приводит, в частности, к тому, что каждая фазовая переменная изменяется в ограниченных пределах. Полная длина диапазона ее изменения, L_k, служит параметром математического описания кинетики системы.

Существенной деталью изложенного здесь анализа является использование функции $D(\vec{x}, t)$ — отклонения плотности вероятности распределения частиц в фазовом пространстве, $f(\vec{x}, t)$, от ее стационарного, то есть равновесного, значения. Последнее равно $\frac{1}{\Omega}$, где Ω — полный фазовый объем вышеупомянутой гиперповерхности. Равновесное распределение вероятности нахождения системы в различных микросостояниях является равномерным. Согласно условию нормировки плотности распределения, интеграл от $D(\vec{x}, t)$ равен нулю. Это означает, что отклонения $f(\vec{x}, t)$ от равновесного значения для изолированной системы должны быть в разные стороны.

Нами показано, что $D(\vec{x}, t)$ является суммой отклонений вдоль отдельных фазовых координат:

$$D(\vec{x}, t) = \sum_{k=1}^{6N} D_k(x_k, t).$$

Кинетика каждой из $D_k(x_k, t)$ рассматривается вдоль фазовых траекторий, что существенно облегчает ее анализ. Найдено, что поведение $D_k(x_k, t)$ представляет собой экспоненциальное затухание суммы пространственных мод, причем каждая m-я мода имеет свой коэффициент затухания λ_{km}.

Выражение для λ_{km} включает в себя интеграл, подынтегральная функция которого содержит множитель $g_k(\xi_k - x_k)$. Представляет интерес вопрос о том, насколько значение λ_{km} зависит от вида функции $g_k(\xi_k - x_k)$. Нами найдено, что главным фактором, влияющим на величину λ_{km}, является $\sigma^2_{\xi_k}$ — дисперсия случайной величины $(\xi_k - x_k)$. В ряде полученных здесь соотношений дисперсия участвует как относительная величина $\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{(L_k)^2}$. Значением дисперсии определяется диапазон величин $(\xi_k - x_k)$, в пределах которого существует реальная возможность случайного перехода в микросостояние $\vec{x}$ из других микросостояний с координатами $\vec{\xi}$. Найдено, что при

небольших значениях $\sigma^2_{\xi_k}$ (когда случайные переходы в точку x_k возможны только из достаточно близких к ней точек ξ_k) вид функции g_k вообще не влияет на λ_{km}. Величина λ_{km} в этом случае для любых g_k пропорциональна $\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{(L_k)^2}$.

Для изучения влияния вида g_k на коэффициент затухания мод, λ_{km}, при больших значениях дисперсии нами взято три варианта $g_k(\xi_k - x_k)$: 1) нормальное распределение как наиболее физически реальный вид плотности вероятности непрерывной случайной величины; 2) распределение Лапласа (двойное экспоненциальное распределение); 3) равномерное распределение. Все эти три варианта сильно отличаются друг от друга по форме, что показано на рис. 2, где эти распределения изображены для одного и того же значения дисперсии. Найдено, что в целом зависимость $\lambda_{km}\left(\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{(L_k)^2}\right)$ имеет следующий вид: это функция, линейно возрастающая при увеличении дисперсии от нуля, а затем плавно переходящая в плато. Отличается от этого хода только случай равномерного распределения $g_k(\xi_k - x_k)$ вследствие резких краев этой функции. Тогда вместо плавного перехода к плато имеют место затухающие колебания при увеличении дисперсии в области ее больших значений. Тем не менее все исследованные зависимости вероятности случайных переходов между микросостояниями от дисперсии величины перехода обнаруживают качественное и в достаточной степени количественное сходство, в том числе стремление к единице при больших значениях дисперсии.

Таким образом, вид функций $g_k(\xi_k - x_k)$ не имеет существенного влияния на скорости затухания пространственных мод. Наибольшее влияние на эту скорость имеют дисперсия величины $(\xi_k - x_k)$ и порядок моды m.

Нами обнаружено, что при затухании величины $D(\vec{x}, t)$ $\left(\text{то есть при приближении } f(\vec{x}, t)\right.$ к равновесному значению $\left.\frac{1}{\Omega}\right)$ первоначальная форма $D(\vec{x}, t)$ сохраняется только в случае, когда случайные переходы между всеми микросостояниями происходят с одной и той же вероятностью. Это имеет место, когда значение дисперсии $\frac{\sigma^2_{\xi_k}}{(L_k)^2}$ становится близким к 0,08 (см. рис. 2). Например, в случае равномерного распределения $g_k(\xi_k - x_k)$ это означает, что ширина «прямоугольника» функции распределения вероятности случайных переходов равна L_k.

В противном случае, когда такие переходы возможны в более узком диапазоне расстояний между микросостояниями, переходный процесс имеет более сложный характер. Чем выше порядок моды m, то есть чем более неравномерный по пространству, «извилистый» характер имеет начальная величина $D(\vec{x}, 0)$, тем быстрее она затухает. Поэтому отклонение $D(\vec{x}, t)$ от равновесного значения $f(\vec{x}, t)$ не только уменьшается со временем, но и становится все более сглаженным. В конце концов заметным остается только остаток первой моды.

Полученное нами выражение для энтропии (50) состоит из двух членов, из которых второй показывает, насколько энтропия неравновесной системы меньше своего равновесного значения, когда величина $D(\vec{x}, t)$ отлична от нуля. Поскольку этот член является интегралом, сглаженность или, напротив, извилистость $D(\vec{x}, t)$ имеют не самое большое влияние на значение энтропии в неравновесной ситуации. Учтем, что с физической точки зрения наиболее реальна ситуация, когда случайные переходы возможны только между не очень отдаленными друг от друга микроскопическими состояниями. Из вышесказанного можно сделать заключение, что в выражении для энтропии главную роль играет первая мода профиля $D(\vec{x}, t)$.

Отдельный интерес представляет скорость изменения энтропии. В случае изолированной системы эта величина, в сущности, является так называемой скоростью продукции энтропии $\frac{d_i S}{dt}$. Как видно из вышеизложенного материала, эта скорость задается величиной $D(\vec{x}, t)$ и скоростью случайных переходов между микросостояниями $\varphi(\vec{x}, \vec{\xi})$. С помощью преобразований нами получено уравнение (52), где один из входящих в него членов описывается выражением (53). Этот

результат согласуется с известной формулой [Kondepudi, Prigogine, 1998]

$$\frac{d_i S}{dt} = \sum_k X_k J_k,$$

где J_k — потоки, а X_k — вызывающие их обобщенные силы. В нашем случае имеются один поток и одна обобщенная сила. Последняя равна разности между равновесным значением энтропии и двумя вычитаемыми, одно из которых — имеющееся в настоящий момент значение энтропии $S(t)$, а второе — выражение $S_g(t)$, похожее на выражение для энтропии, но содержащее в себе и величину, описывающую скорость случайных переходов между микросостояниями. Поток же пропорционален коэффициенту φ_0, присутствующему в выражении для скорости случайных переходов.

Возрастание энтропии в случае, когда система первоначально находится в неравновесном состоянии, и ее максимальность в равновесном состоянии являются естественным следствием существования случайных переходов между элементами множества микроскопических состояний. Внутри этого множества нет изолированных подмножеств, между которыми были бы невозможны такие переходы. Поэтому являются неизбежными «расползание» системы по всему множеству микросостояний и, как следствие, стремление энтропии к максимуму.

Приложение 1. Преобразование дивергенции в кинетическом уравнении

Член с дивергенцией в уравнении (1) может быть преобразован следующим образом:

$$\operatorname{div}(\vec{v}(\vec{x})f(\vec{x},\,t)) = \sum_{k=1}^{6N} \frac{\partial}{\partial x_k}(v_k(\vec{x})f(\vec{x},\,t)) = f(\vec{x},\,t)\sum_{k=1}^{6N}\frac{\partial v_k(\vec{x})}{\partial x_k} + \sum_{k=1}^{6N} v_k(\vec{x})\frac{\partial f(\vec{x},\,t)}{\partial x_k}.$$

Далее используем уравнения Гамильтона (3). В нумерации k ($i = k$ при $k = 1 \div 3N$, $i = k - 3N$ при $k = (3N + 1) \div 6N$) эти уравнения имеют вид

$$v_k(\vec{x}) = \frac{\partial H(\vec{x})}{\partial x_{k+3N}}\ (k = 1 \div 3N), \quad v_k(\vec{x}) = -\frac{\partial H(\vec{x})}{\partial x_{k-3N}}\ (k = (3N + 1) \div 6N).$$

Отсюда

$$\frac{\partial v_k(\vec{x})}{\partial x_k} = \frac{\partial^2 H(\vec{x})}{\partial x_k\,\partial x_{k+3N}}\ (k = 1 \div 3N), \quad \frac{\partial v_k(\vec{x})}{\partial x_k} = -\frac{\partial^2 H(\vec{x})}{\partial x_k\,\partial x_{k-3N}}\ (k = (3N + 1) \div 6N).$$

Далее,

$$\sum_{k=1}^{6N}\frac{\partial v_k(\vec{x})}{\partial x_k} = \sum_{k=1}^{3N}\frac{\partial^2 H(\vec{x})}{\partial x_k\,\partial x_{k+3N}} - \sum_{k=3N+1}^{6N}\frac{\partial^2 H(\vec{x})}{\partial x_k\,\partial x_{k-3N}}.$$

Заменяя во втором члене k на $m = k - 3N$, находим

$$\sum_{k=1}^{6N}\frac{\partial v_k(\vec{x})}{\partial x_k} = \sum_{k=1}^{3N}\frac{\partial^2 H(\vec{x})}{\partial x_k\,\partial x_{k+3N}} - \sum_{m=1}^{3N}\frac{\partial^2 H(\vec{x})}{\partial x_{m+3N}\,\partial x_m} = 0.$$

Отсюда получаем, что в случае, когда $\vec{x} = \begin{pmatrix}\vec{q}\\ \vec{p}\end{pmatrix}$,

$$\operatorname{div}(\vec{v}(\vec{x})f(\vec{x},\,t)) = \sum_{k=1}^{6N} v_k(\vec{x})\frac{\partial f(\vec{x},\,t)}{\partial x_k}.$$

Приложение 2. Поиск экстремума энтропии

Используя обычные методы вариационного исчисления, мы получаем, что условием экстремума является

$$\delta S^* = -\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \delta\{f(\vec{q},\,\vec{p})[\ln f(\vec{q},\,\vec{p}) - \lambda_1] - \lambda_2(H(\vec{q},\,\vec{p}) - E)\}\,d\vec{q}\,d\vec{p} = 0.$$

Вариация подынтегрального выражения должна быть равна нулю, что дает следующее выражение:

$$\sum_{i=1}^{3N}\left\{\frac{\partial f(\vec{q},\,\vec{p})}{\partial q_i}[\ln f(\vec{q},\,\vec{p}) - \lambda_1 + 1]\right\}\delta q_i + \sum_{i=1}^{3N}\left\{\frac{\partial f(\vec{q},\,\vec{p})}{\partial p_i}[\ln f(\vec{q},\,\vec{p}) - \lambda_1 + 1]\right\}\delta p_i - \\ - \lambda_2\left[\sum_{i=1}^{3N}\frac{\partial H(\vec{q},\,\vec{p})}{\partial q_i}\delta q_i + \sum_{i=1}^{3N}\frac{\partial H(\vec{q},\,\vec{p})}{\partial p_i}\delta p_i\right] = 0.$$

Поскольку все δq_i и δp_i должны лежать на поверхности $H(\vec{q},\,\vec{p}) = E$, то, согласно сказанному в приложении 1, выражение в квадратных скобках при множителе λ_2 равно нулю. Отсюда следует, что должны быть равны нулю все коэффициенты при вариациях всех δq_i и δp_i. Имеют место два варианта: 1) все $\frac{\partial f(\vec{q},\,\vec{p})}{\partial q_i} = 0$ и все $\frac{\partial f(\vec{q},\,\vec{p})}{\partial p_i} = 0$; 2) $\ln f(\vec{q},\,\vec{p}) - \lambda_1 + 1 = 0$. Первый вариант имеет решение $f(\vec{q},\,\vec{p}) = \mathrm{const}$. Ввиду того что λ_1 — постоянная величина, второй вариант дает то же решение: $f(\vec{q},\,\vec{p}) = \mathrm{const}$.

Приложение 3. Значение энтропии при отклонениях плотности вероятности в двух произвольных подобластях множества микросостояний системы

Преобразуем выражение (16):

$$S = \ln\Omega + \delta S = -\int\limits_{\mathrm{Surf_E^1}}\left(\frac{1}{\Omega} + \delta f_1\right)\ln\left(\frac{1}{\Omega} + \delta f_1\right)d\vec{q}\,d\vec{p} - \int\limits_{\mathrm{Surf_E^2}}\left(\frac{1}{\Omega} + \delta f_2\right)\ln\left(\frac{1}{\Omega} + \delta f_2\right)d\vec{q}\,d\vec{p} = \\ = -\left(\frac{1}{\Omega} + \delta f_1\right)\ln\left(\frac{1}{\Omega} + \delta f_1\right)\int\limits_{\mathrm{Surf_E^1}} d\vec{q}\,d\vec{p} - \left(\frac{1}{\Omega} + \delta f_2\right)\ln\left(\frac{1}{\Omega} + \delta f_2\right)\int\limits_{\mathrm{Surf_E^2}} d\vec{q}\,d\vec{p} = \\ = -\left(\frac{1}{\Omega} + \delta f_1\right)\ln\left(\frac{1}{\Omega} + \delta f_1\right)\Omega_1 - \left(\frac{1}{\Omega} + \delta f_2\right)\ln\left(\frac{1}{\Omega} + \delta f_2\right)\Omega_2.$$

Используя

$$\ln\left(\frac{1}{\Omega} + \delta f_{1,2}\right) = \ln\frac{1}{\Omega} + \ln\ln\left(1 + \Omega\,\delta f_{1,2}\right),$$

а также соотношения

$$\delta f_1 = \frac{1}{\Omega}\kappa_1, \quad \Omega_1 = \rho_1\Omega, \quad \Omega_2 = (1 - \rho_1)\Omega, \quad \delta f_2 = -\frac{\rho_1}{1 - \rho_1}\frac{1}{\Omega}\kappa_1,$$

получаем

$$\ln\Omega + \delta S = -\Omega_1\frac{1}{\Omega}\ln\frac{1}{\Omega} - \Omega_2\frac{1}{\Omega}\ln\frac{1}{\Omega} - \Omega_1\,\delta f_1\ln\frac{1}{\Omega} - \Omega_2\,\delta f_2\ln\frac{1}{\Omega} - \\ - \frac{\Omega_1}{\Omega}(1 + \Omega\,\delta f_1)\ln(1 + \Omega\,\delta f_1) - \frac{\Omega_2}{\Omega}(1 + \Omega\,\delta f_2)\ln(1 + \Omega\,\delta f_2).$$

Далее,

$$-\Omega_1 \frac{1}{\Omega} \ln \frac{1}{\Omega} - \Omega_2 \frac{1}{\Omega} \ln \frac{1}{\Omega} = -\ln \frac{1}{\Omega} = \ln \Omega;$$

сумма членов

$$\Omega_1\, \delta f_1 \ln \frac{1}{\Omega} - \Omega_2\, \delta f_2 \ln \frac{1}{\Omega} = 0$$

вследствие условия нормировки, наложенного на δf_1 и δf_2. Окончательно имеем

$$\delta S = -\rho_1(1+\kappa_1)\ln(1+\kappa_1) - (1-\rho_1)\left(1 + \frac{\rho_1}{1-\rho_1}\kappa_1\right)\ln\left(1 + \frac{\rho_1}{1-\rho_1}\kappa_1\right).$$

Приложение 4. Преобразование равенства (38)

$$\int\limits_{x_k - L_k/2}^{x_k + L_k/2} g_k(\xi_k,\, x_k) D_{km}(x_k)\, d\xi_k =$$

$$= A_{km} \int\limits_{x_k - L_k/2}^{x_k + L_k/2} g_k(\xi_k,\, x_k) \cos\left(2\pi m \frac{x_k}{L_k}\right) d\xi_k + B_{km} \int\limits_{x_k - L_k/2}^{x_k + L_k/2} g_k(\xi_k,\, x_k) \sin\left(2\pi m \frac{x_k}{L_k}\right) d\xi_k. \quad (38)$$

В данной работе мы рассматриваем функции g_k, имеющие симметричную форму:

$$g_k(\xi_k,\, x_k) = g_k(\xi_k - x_k) = g_k(x_k - \xi_k).$$

Представим аргумент косинуса и синуса в следующем виде:

$$2\pi m \frac{\xi_k}{L_k} = 2\pi m \frac{\xi_k - x_k}{L_k} + 2\pi m \frac{x_k}{L_k}.$$

Используем известные формулы

$$\cos(\alpha+\beta) = \cos(\alpha)\cos(\beta) - \sin(\alpha)\sin(\beta) \quad \text{и} \quad \sin(\alpha+\beta) = \sin(\alpha)\cos(\beta) + \cos(\alpha)\sin(\beta)$$

при $\alpha = 2\pi m \frac{\xi_k - x_k}{L_k}$ и $\beta = 2\pi m \frac{x_k}{L_k}$. Тогда

$$\int\limits_{x_k - L_k/2}^{x_k + L_k/2} g_k(\xi_k - x_k) D_{km}(\xi_k)\, d\xi_k =$$

$$= \left[A_{km} \cos\left(2\pi m \frac{x_k}{L_k}\right) + B_{km} \sin\left(2\pi m \frac{x_k}{L_k}\right)\right] \cdot \int\limits_{x_k - L_k/2}^{x_k + L_k/2} g_k(\xi_k - x_k) \cos\left(2\pi m \frac{\xi_k - x_k}{L_k}\right) d\xi_k +$$

$$+ \left[B_{km} \cos\left(2\pi m \frac{x_k}{L_k}\right) - A_{km} \sin\left(2\pi m \frac{x_k}{L_k}\right)\right] \cdot \int\limits_{x_k - L_k/2}^{x_k + L_k/2} g_k(\xi_k - x_k) \sin\left(2\pi m \frac{\xi_k - x_k}{L_k}\right) d\xi_k.$$

Второй интеграл в этом выражении берется от антисимметричной функции в симметричных пределах. Поэтому он равен нулю. Учитывая (37), получаем

$$\int\limits_{x_k - L_k/2}^{x_k + L_k/2} g_k(\xi_k - x_k) D_{km}(\xi_k)\, d\xi_k = D_{km}(x_k) \cdot \int\limits_{x_k - L_k/2}^{x_k + L_k/2} g_k(\xi_k - x_k) \cos\left(2\pi m \frac{\xi_k - x_k}{L_k}\right) d\xi_k. \quad (55)$$

Приложение 5. Преобразование уравнения (51)

Скорость изменения энтропии имеет вид

$$\frac{dS}{dt} = \varphi_0\Omega \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} D(\vec{x},\, t)\ln(1+\Omega D(\vec{x},\, t))\,d\vec{x} - \varphi_0\Omega \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \left[\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{\xi},\, \vec{x})D(\vec{\xi},\, t)\,d\vec{\xi}\right]\ln(1+\Omega D(\vec{x},\, t))\,d\vec{x}. \quad (51)$$

Преобразуем второй член в правой части (51):

$$-\varphi_0\Omega \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \left[\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{\xi},\, \vec{x})D(\vec{\xi},\, t)\,d\vec{\xi}\right]\ln(1+\Omega D(\vec{x},\, t))\,d\vec{x} =$$

$$= -\varphi_0 \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \left[\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{\xi},\, \vec{x})(1+\Omega D(\vec{\xi},\, t))\,d\vec{\xi}\right]\ln(1+\Omega D(\vec{x},\, t))\,d\vec{x} +$$

$$+ \varphi_0 \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \left[\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{\xi},\, \vec{x})\,d\vec{\xi}\right]\ln(1+\Omega D(\vec{x},\, t))\,d\vec{x}.$$

Поскольку $\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{\xi},\, \vec{x})\,d\vec{\xi} = 1$, это выражение равно

$$-\varphi_0 \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \left[\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{\xi},\, \vec{x})(1+\Omega D(\vec{\xi},\, t))\,d\vec{\xi}\right]\ln(1+\Omega D(\vec{x},\, t))\,d\vec{x} + \varphi_0 \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \ln(1+\Omega D(\vec{x},\, t))\,d\vec{x}.$$

Подставляя это выражение в (51), получаем

$$\frac{dS}{dt} = \varphi_0 \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} (1+\Omega D(\vec{x},\, t))\ln(1+\Omega D(\vec{x},\, t))\,d\vec{x} -$$

$$- \varphi_0 \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{\xi},\, \vec{x})(1+\Omega D(\vec{\xi},\, t))\ln(1+\Omega D(\vec{x},\, t))\,d\vec{\xi}\,d\vec{x}. \quad (56)$$

Введем обозначение:

$$S_g = \frac{1}{\Omega} \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} g(\vec{\xi},\, \vec{x})(1+\Omega D(\vec{\xi},\, t))\ln(1+\Omega D(\vec{x},\, t))\,d\vec{\xi}\,d\vec{x}. \quad (57)$$

Далее используем выражение для энтропии:

$$S(t) = \ln\Omega - \frac{1}{\Omega} \int\limits_{\mathrm{Surf_E}} (1+\Omega D(\vec{x},\, t))[\ln(1+\Omega D(\vec{x},\, t))]\,d\vec{x}, \quad (50)$$

из которого получаем

$$\int\limits_{\mathrm{Surf_E}} (1+\Omega D(\vec{x},\, t))[\ln(1+\Omega D(\vec{x},\, t))]\,d\vec{x} = \Omega(\ln\Omega - S(t)). \quad (58)$$

Подставляя (58) и (57) в (56), получаем общее выражение для скорости изменения энтропии:

$$\frac{dS}{dt} = \varphi_0\Omega[\ln\Omega - S(t) - S_g(t)].$$

Список литературы (References)

Зубарев Д. Н. Неравновесная статистическая термодинамика. — М.: Наука, Физматлит, 1971.
Zubarev D. N. Neravnovesnaya statisticheskaya dinamika [Nonequilibrium statistical dynamics]. — Moscow: Nauka, Fizmatlit, 1971 (in Russian).

Климонтович Ю. Л. Статистическая теория открытых систем. Т. I. — М.: ТОО Янус, 1995.
Klimontovich Yu. L. Statisticheskaya teoriya otkrytykh sistem [Statistical theory of open systems]. — Moscow: TOO Yanus, 1995 (in Russian).

Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика. — М.: Наука, Физматлит, 1988.
Landau L. D., Lifshitz E. M. Mekhanika [Mechanics]. — Moscow: Nauka, Fizmatlit, 1988 (in Russian).

Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Часть 1. — М.: Наука, Физматлит, 1995.
Landau L. D., Lifshitz E. M. Statisticheskaya fizika. Chast' 1 [Statistical physics. Part 1]. — Moscow: Nauka, Fizmatlit, 1995 (in Russian).

Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. — М.: Наука, Физматлит, 1979.
Lifshitz E. M., Pitayevskii L. P. Fizicheskaya kinetika [Physical kinetics]. — Moscow: Nauka, Fizmatlit, 1979 (in Russian).

Седов Л. И. Механика сплошной среды. Т. I. — М.: Наука, Физматлит, 1970.
Sedov L. I. Mekhanika sploshnoi sredy [Mechanics of continuum]. — Moscow: Nauka, Fizmatlit, 1970 (in Russian).

Эльсгольц Л. Э. Дифференциальные уравнения и вариационное исчисление. — М.: Наука, Физматлит, 1965.
Elsgolts L. E. Differentsialnyye uravneniya i variatsionnoye ischisleniye [Differential equations and variations calculus]. — Moscow: Nauka, Fizmatlit, 1965 (in Russian).

Balescu R. Equilibrium and nonequilibrium statistical mechanics. — New York, London, Sydney, Toronto: John Wiley and Sons, 1975.

Hoch M. J. R. Statistical and thermal physics. — 2^{nd} ed. — Boca Raton, London, New York: CRC Press, 2021.

Huang K. Introduction to statistical physics. — 2^{nd} ed. — Boca Raton, London, New York: CRC Press, 2010.

Kennett M. P. Essential statistical physics. — Cambridge: Cambridge University Press, 2021.

Kittel Ch., Kroemer H. Thermal physics. — 2^{nd} ed. — New York: W. H. Freeman and Co., 1980.

Kondepudi D., Prigogine I. Modern thermodynamics. From heat engines to dissipative structures. — Chichesster, New York, Weinheim, Brisbane, Toronto, Singapore: John Wiley & Sons, 1998.

Minkevich I. G. On the kinetics of entropy of a system with discrete microscopic states // Computer Research and Modeling. — 2023. — Vol. 15, No. 5. — P. 1207–1236.

Müller-Kirsten H. J. W. Basics of statistical physics. — 3^{d} ed. — New Jersey, London, Singapore, Beijing, etc.: World Scientific Publishing Co., 2022.

Nolting W. Theoretical Physics 8. Statistical Physics. — Cham: Springer International Publishing AG, 2018.

Reichl L. E. A modern course in statistical physics. — 4^{th} ed. — Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., KGaA, 2016.

Sadovskii M. V. Statistical physics. — 2^{nd} ed. — Berlin, Boston: Walter de Gruyter GmbH, 2019.

Sekerka R. F. Thermal physics. Thermodynamics and statistical mechanics for scientists and engineers. — Amsterdam, Boston, Heidelberg, etc.: Esevier, 2015.

Sethna J. P. Statistical mechanics. Entropy, order parameters, and complexity. — Oxford: Oxford University Press, 2006.

Succi S. The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond. — Oxford: Oxford University Press, 2001.