Доклады Академии Наук СССР
1947. Том LVI, № 7

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

А. М. ЯГЛОМ

О СТАТИСТИЧЕСКОЙ ОБРАТИМОСТИ БРАУНОВСКОГО ДВИЖЕНИЯ

(Представлено академиком А. Н. Колмогоровым 17 I 1947)

1. Брауновское движение системы с n степенями свободы мы будем рассматривать, следуя Уленбеку и Орнштейну (1), как марковский случайный процесс в $2n$-мерном пространстве координат и скоростей (в фазовом пространстве системы) *. Этот марковский процесс мы будем считать однородным во времени и имеющим всюду положительную плотность вероятности перехода $f(t, x', \ldots, x^n, \dot{x}', \ldots, \dot{x}^n, y', \ldots, y^n, \dot{y}', \ldots, \dot{y}^n) = f(t, x, \dot{x}, y, \dot{y})$, удовлетворяющую уравнению Фоккера — Планка. Плотность $f(t, x, \dot{x}, y, \dot{y})$ мы будем относить к единице объема фазового пространства, предполагая, что в координатном пространстве задана риманова метрика $ds^2 = g_{ij}\,dx^i d\,x^j$ **; в таком случае элемент объема фазового пространства $dV_{x,\dot{x}} = g(x)\,dx' \ldots dx^n d\dot{x}' \ldots d\dot{x}^n$, где $g(x) = \mathrm{Det}\,\|g_{ij}(x)\|$. В дальнейшем мы всюду будем считать, что $\frac{1}{2} g_{ij}\dot{x}^i\dot{x}^j = T$ есть кинетическая энергия системы.

Особо мы выделим те движения, для которых существует стационарное распределение с плотностью $w(x, \dot{x})$, так что

$$\int w(x, \dot{x}) f(t, x, \dot{x}, y, \dot{y})\, dV_{x,\dot{x}} = w(y, \dot{y}).$$

Такое распределение всегда будет единственным и к нему будет стремиться распределение для момента времени t при $t \to \infty$ и любом начальном распределении (7). $w(x, \dot{x})$ естественно принять за плотность абсолютного распределения вероятностей (термодинамическая вероятность статистической физики). По $w(x, \dot{x})$ и $f(t, x, \dot{x}, y, \dot{y})$ мы можем определить условную плотность вероятности того, что система в момент времени t_0 находилась в состоянии $(x, \dot{x})$, если известно ее состояние $(y, \dot{y})$ в момент $t_0 + t$; эта плотность равна

$$g(x, \dot{x}, y, \dot{y}) = \frac{w(x, \dot{x})\, f(t, x, \dot{x}, y, \dot{y})}{w(y, \dot{y})}. \tag{1}$$

Определение. Брауновское движение называется статистически обратимым, если для него существует стационарное распределение и

$$f(t, x, \dot{x}, y, \dot{y}) = g(t, y, -\dot{y}, x, -\dot{x}). \tag{2}$$

---

* Относительно такого подхода к изучению брауновского движения см. также (2—4) и обзорные статьи (5, 6).

** Строго говоря, достаточно было бы задать в координатном пространстве эквиаффинную связность.

Это определение является естественным обобщением определения обратимости для детерминированных механических процессов.

2. Для выяснения условий обратимости броуновского движения мы воспользуемся уравнением Фоккера — Планка и сопряженным ему уравнением. Далее мы всюду будем считать, что эти уравнения однозначно определяют функцию $f(t, x, \dot{x}, y, \dot{y})$. Нужные нам уравнения в общем виде приведены в заметке Колмогорова [2]. Мы перепишем эти уравнения в следующей инвариантной форме:

$$\frac{\partial f}{\partial t}=\dot{x}^i\nabla_i^{(x)}f+K^i(x, \dot{x})\frac{\partial f}{\partial \dot{x}^i}+B^{ij}(x, \dot{x})\frac{\partial^2 f}{\partial \dot{x}^i\,\partial \dot{x}^j}, \tag{3}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t}=-\dot{y}^i\nabla_i^{(y)}f-\frac{\partial}{\partial \dot{y}^i}\left\{K^i(y, \dot{y})f\right\}+\frac{\partial^2}{\partial \dot{y}^i\,\partial \dot{y}^j}\left\{B^{ij}(y, \dot{y})f\right\}. \tag{4}$$

Здесь $\nabla_i^{(x)}$ есть инвариантная тензорная операция дифференцирования, обращающаяся в операцию ковариантного дифференцирования в применении к величинам, не зависящим от скоростей; для скалярной функции f $\nabla_i^{(x)}f=\frac{\partial f}{\partial x^i}-\frac{\partial f}{\partial \dot{x}^k}\Gamma_{li}^k\dot{x}^l$ (Γ_{li}^k — символы Кристофеля); $\nabla_i^{(y)}$ — та же операция по отношению к точке $(y, \dot{y})$, а вектор $K^i(x, \dot{x})$ и тензор $B^{ij}(x, \dot{x})$ определяются следующим образом:

$$K^i(x, \dot{x})=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{\overline{\Delta \dot{x}^i}}{\Delta t}+\Gamma_{jk}^i\dot{x}^j\dot{x}^k, \quad B^{ij}(x, \dot{x})=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{\overline{\Delta \dot{x}^i\,\Delta \dot{x}^j}}{2\Delta t} \tag{5}$$

(черта сверху всюду служит символом математического ожидания).

Тензор $B^{ij}(x, \dot{x})$ определяется интенсивностью случайных толчков, действующих на систему. Вектор $K^i(x, \dot{x})$ при нашем выборе метрики равен математическому ожиданию контравариантного вектора силы: $K^i(x, \dot{x})=\overline{Q}^i$.

Предполагая, как это принято в теории броуновского движения, что интенсивность случайных толчков не зависит от скоростей, а математическое ожидание вектора силы зависит от скоростей линейно, будем считать, что: a) $B^{ij}(x, \dot{x})=B^{ij}(x)$, b) $K^i(x, \dot{x})=F^i(x)-A_j^i(x)\dot{x}^j$. Кроме того, мы предположим, что c) $\mathrm{Det}\,\|B^{ij}(x)\|\neq 0$ ни для какого x.

3. Обозначим через $b_{ij}=\frac{\mathrm{Ad}\,B^{ij}}{\mathrm{Det}\,\|B^{ij}\|}$ тензор, взаимный с B^{ij}.

Теорема. *Для того чтобы броуновское движение, удовлетворяющее условиям* (a), (b) *и* (c), *было статистически обратимым, необходимо и достаточно выполнение следующих условий*:

A. $P_{ij}=b_{ik}A^k_{\ j}$ *является симметрическим тензором, ковариантная производная которого равна нулю, а квадратичная форма* $P_{ij}\dot{x}^i\dot{x}^j$ *положительно определена.*

B. $\tilde{F}_i=P_{ij}F^j$ *есть потенциальный вектор*: $\tilde{F}_i=\frac{\partial C(x)}{\partial x^i}$.

Если координатное пространство неограничено, то к этому добавляется еще условие

C. $\int e^{C(x)}\,dV_x<\infty.$

Стационарным распределением (абсолютной вероятностью) в этом случае будет

$$w(x, \dot{x}) = Ae^{C(x) - \frac{1}{2} P_{ij}(x)\dot{x}^i \dot{x}^j}, \tag{6}$$

где A — постоянная. Наоборот, если брауновское движение имеет стационарное распределение вида (6), *то условия* (A), (B) *и* (C) *выполняются, и движение статистически обратимо.*

4. Если $P_{ij} = \frac{g_{ij}}{\theta}$ (θ — положительная постоянная), то распределение (6) совпадает с каноническим распределением Гибса

$$w(x, \dot{x}) = A \exp\left(-\frac{T(x, \dot{x}) + U(x)}{\theta}\right),$$

где $F_i(x) = -\frac{\partial U(x)}{\partial x^i}$. Таким образом, из существования стационарного канонического распределения вытекает статистическая обратимость брауновского движения, т. е. выполнимость условий (A), (B) и (C), причем в этом случае $P_{ij} = \frac{g_{ij}}{\theta}$. Отсюда, в частности, следует, что $A_{ij} = \frac{1}{\theta} g_{ik} g_{jl} B^{kl}$ и, следовательно,

$$A_{ij} = A_{ji}, \tag{7}$$

т. е. в этом случае коэффициенты при силах трения симметричны и силы трения могут быть получены, как производные по скоростям от диссипативной функции.

Соотношение (7) иным путем обосновывалось Онзагером ([8]) (наиболее четко идея Онзагера реализована в книге Ландау и Лифшица ([9]), § 42). Общий вид тензоров P_{ij}, удовлетворяющих условиям (A), был изучен Эйзенхартом ([10]).

5. Приближенная теория Энштейна — Смолуховского, вполне удовлетворительно описывающая реальные процессы брауновского движения систем с малой инерцией для не слишком малых промежутков времени, рассматривает такое движение как марковский случайный процесс в пространстве координат системы.

Предположение о малости инерции системы эквивалентно предположению о том, что коэффициенты F^i, A^i_j и B^{ij} велики, причем B^{ij} порядка квадрата остальных коэффициентов. Если при этом все эти величины являются достаточно гладкими функциями координат и выполняется условие (A) теоремы п. 3, то можно показать, что функцию $\varphi(t, x, \dot{x}, y) = \int f(t, x, \dot{x}, y, \dot{y})\, dV_{\dot{y}}$ ($dV_{\dot{y}}$ — элемент объема в пространстве скоростей) для не слишком малого t можно с большой степенью точности апроксимировать функцией $\varphi(t, x, y)$, не зависящей от $\dot{x}$ и удовлетворяющей уравнению типа Фоккера — Планка

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{g(y)}} \left\{ \sqrt{g(y)} \left(D^{ij} \frac{\partial \varphi}{\partial y^j} - L^i(y)\varphi \right) \right\}, \tag{8}$$

где

$$D^{ij} = a^i_m a^j_n B^{mn}, \quad L^i = a^i_m F^m \tag{9}$$

(a^k_i — тензор, взаимный с A^i_k). (Для одного частного случая брауновского движения вывод приближенного уравнения (8) из уравнения (4) был проведен Крамерсом ([3]).)

Переход от функции $f(t, x, \dot{x}, y, \dot{y})$ и уравнения (4) к функции $\varphi(t, x, y)$ и уравнению (8) есть переход от теории Уленбека — Орнштейна к теории Эйнштейна — Смолуховского; (8) есть общее уравнение Фоккера — Планка этой последней теории. В случае, рассмотренном Крамерсом, оно совпадает с уравнением Смолуховского для диффузии в силовом поле; в случае брауновского движения трехосного эллипсоида — с уравнением Перрена ([11]).

6. В теории Эйнштейна — Смолуховского брауновское движение называется статистически обратимым, если для него

$$\varphi(t, x, y) = \psi(t, x, y), \tag{10}$$

где $\psi(t, x, y)$ есть обращенная плотность вероятности в координатном пространстве, определяемая аналогично (1) и имеющая подобный же смысл (см. ([12],[13])).

В силу пп. 3 и 5 статистически обратимые в смысле (2) брауновские движения (и только такие движения) в теории Эйнштейна — Смолуховского описываются уравнениями (8) с коэффициентами, удовлетворяющими условиям:

B'. $\tilde{L}_i = d_{ij} L^j$, где $d_{ij} = \dfrac{\mathrm{Ad}\, D^{ij}}{\mathrm{Det}\, \| D^{ij} \|}$, есть потенциальный вектор: $\tilde{L}_i = \dfrac{\partial C(x)}{\partial x^i}$.

C'. $\int e^{C(x)}\, dV_x < \infty$.

Эти условия лишь по форме отличаются от необходимых и достаточных условий обратимости в смысле Шредингера — Колмогорова, выведенных в работе ([13]). Таким образом, при пренебрежении инерцией системы обратимость в смысле (2) совпадает с принятой в теории Эйнштейна — Смолуховского обратимостью.

Поступило
17 I 1947

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] G. E. Uhlenbeck and L. S. Ornstein, Phys. Rev., **36**, 823 (1930). [2] A. Kolmogoroff, Ann. of Math., **35**, 116 (1934). [3] H. A. Kramers, Physica, **7**, 284 (1940). [4] I. L. Doob, Ann. of Math., **43**, 351 (1942). [5] S. Chandrasekhar, Rev. Mod. Phys., **15**, 1 (1943). [6] Ming-Chen-Wang and G. E Uhlenbeck, Rev. Mod. Phys., **17**, 323 (1945). [7] А. М. Яглом, ДАН, **56**, № 4 (1947). [8] L. Onsager, Phys. Rev., **37**, 405; **38**, 2265 (1931). [9] Л. Ландау и Л. Лифшиц, Статистическая физика, 1940. [10] L. P. Eisenhart, Trans. Am. Math. Soc., **25**, 297 (1923). [11] F. Perrin, J. de phys. et le rad., **5**, 497 (1934). [12] E. Schrödinger, Berl. Ber., 144 (1931). [13] A. Kolmogoroff, Math. Ann., **113**, 766 (1937).