Современная математика. Фундаментальные направления. Том 64, № 1 (2018). С. 37–59

DOI: 10.22363/2413-3639-2018-64-1-37-59 УДК 517.958

ЭНТРОПИЯ ПО БОЛЬЦМАНУ И ПУАНКАРЕ, ЭКСТРЕМАЛИ БОЛЬЦМАНА И МЕТОД ГАМИЛЬТОНА—ЯКОБИ В НЕГАМИЛЬТОНОВОЙ СИТУАЦИИ

© 2018 г. **В. В. ВЕДЕНЯПИН, С. З. АДЖИЕВ, В. В. КАЗАНЦЕВА**

Аннотация. В работе доказывается H-теорема для обобщений уравнений химической кинетики. Рассматриваются важные физические примеры такого обобщения: дискретные модели квантовых кинетических уравнений (уравнений Улинга—Уленбека) и квантовый марковский процесс (квантовое случайное блуждание). Доказывается совпадение временных средних с экстремалями по Больцману для всех таких уравнений, а также для уравнения Лиувилля. Это служит основой для выбора переменных действие—угол в методе Гамильтона—Якоби в негамильтоновой ситуации. Предлагается простейший вывод уравнения Гамильтона—Якоби из уравнений Лиувилля в конечномерном случае.

ОГЛАВЛЕНИЕ

1. Введение

Метод Гамильтона—Якоби считается «самым могущественным методом нахождения общего интеграла уравнений движения» [31].

Этот метод использует две идеи: подходящая замена переменных и уравнение Гамильтона—Якоби как способ получения тех уравнений, где данная замена применима. Ранее было показано, что уравнение Гамильтона—Якоби получается из уравнения неразрывности или Лиувилля гидродинамической подстановкой, изобретенной для уравнения Власова и являющейся распределением Максвелла с нулевой температурой. Здесь мы обобщаем эту конструкцию на бесконечномерный случай, изучая возможность метода Гамильтона—Якоби в негамильтоновой ситуации. Для оптимального выбора замены переменных хорошо подходит теорема о совпадении временного среднего с экстремалями Больцмана. На этом пути удается показать, что часто существуют аналоги переменных действие—угол даже в неинтегрируемых ситуациях.

H-теорема впервые была рассмотрена Больцманом в работе «Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen» (1872) [6, 44]. Эту теорему, обосновывающую сходимость решений уравнений типа Больцмана к максвелловскому распределению, Больцман связал с законом возрастания энтропии.

Первую главу Больцман посвящает уравнению, которое мы сегодня назвали бы пространственно однородным уравнением Больцмана с зависимостью функции распределения только от модуля скорости (от квадрата скорости или энергии, которую он называет «живой силой»). Именно для этого уравнения Больцман доказывает H-теорему.

Вторая глава называется «Замена интегралов суммами» — там появляются простейшие дискретные модели уравнения Больцмана. Одна из них похожа на трехскоростную модель, которую мы назвали бы сейчас моделью Годунова—Султангазина, или одномерной моделью Бродуэлла [21] (см. систему (1.1) ниже).

В этой же главе появляется принцип максимума энтропии и объясняется, что стационар можно получать без решения уравнения. Итак, Больцман определяет здесь экстремаль Больцмана для простейшей дискретной модели.

В [6, гл. 2, сноска на с. 156] формулируется принцип максимума энтропии. Рассматривается следующая система уравнений:

$$\begin{aligned} &du_1/dt = B\left(u_2^2 - u_1u_3\right), \\ &\sqrt{2}du_2/dt = 2B\left(u_1u_3 - u_2^2\right), \\ &\sqrt{3}du_3/dt = B\left(u_2^2 - u_1u_3\right). \end{aligned} \tag{1.1}$$

Доказывается, что функционал

$$E(u) = u_1 \ln u_1 + \sqrt{2}u_2 \ln u_2 + \sqrt{3}u_3 \ln u_3 \tag{1.2}$$

убывает в силу системы (1.1):

$$\frac{dE}{dt} = B\left(u_2^2 - u_1u_3\right) \ln \frac{u_1u_3}{u_2^2} \leqslant 0. \tag{1.3}$$

После этого делается вывод, что решения системы сходятся к своему стационару. Больцман использует сохраняющиеся линейные функционалы для поиска стационара по начальному условию. В случае уравнения (1.1) это

$$A(u) = u_1 + \sqrt{2}u_2 + \sqrt{3}u_3 = a, \quad B(u) = u_1 + 2\sqrt{2}u_2 + 3\sqrt{3}u_3 = b. \tag{1.4}$$

Отметим, что система (1.1), как и вообще дискретные модели в работе [6, 44], отличаются от уравнений химической кинетики (и от современных общепринятых дискретных моделей уравнения Больцмана) как формой коэффициентов уравнения, так и формой H-функции. Это связано с тем, что функция распределения в [6,44] зависит от квадрата скорости, а не от скорости или импульса.

Чтобы определить, к чему сходится произвольное решение уравнения (1.1), надо найти минимум функционала (1.2) при условиях (1.4), где постоянные a и b находятся из начальных условий. Это и есть экстремаль Больцмана. Фундаментальность этого понятия Больцман подчеркнул в работе [7, 45].

В [7, 45] из принципа максимума энтропии при фиксации энергии и числа частиц получается формула для наиболее вероятного распределения (теплового равновесия). Эта работа известна «статистикой Больцмана». Но во второй ее главе Больцман старается найти наиболее вероятное распределение и формулирует для этого следующий вариационный принцип (принцип Больцмана). Он выписывает три следующих интеграла один под другим:

$$M' = \int_0^\infty f(x) \ln f(x)\, dx, \tag{1.5}$$

$$n = \int_0^\infty f(x)\, dx, \tag{1.6}$$

$$L = \int_0^\infty x f(x)\, dx. \tag{1.7}$$

Функция распределения $f(x)$ есть плотность кинетической энергии x, а выражения (1.5)–(1.7) суть соответственно энтропия с обратным знаком, число частиц и полная кинетическая энергия.

Больцман ищет минимум функционала

$$\int_0^\infty \left[f(x) \ln f(x) + k f(x) + h x f(x)\right] dx \tag{1.8}$$

с неопределенными множителями Лагранжа k и h.

Варьирование этого выражения дает искомое распределение

$$f\left(x\right) = Ce^{-hx}. \tag{1.9}$$

Получающиеся из этого вариационного принципа (1.8) стационары (1.9) будем называть экстремалями Больцмана. Больцман исследует вторую вариацию, доказывает ее положительность и находит минимум функционала. Этот прием может быть использован во многих динамических задачах, что мы в дальнейшем и продемонстрируем.

В настоящей работе доказывается H-теорема для обобщений уравнений химической кинетики. Доказывается также, что понятие экстремали Больцмана существует и в этом случае. Однако появляются и новые особенности: в связи с тем, что функционал энтропии может быть невыпуклым, вообще говоря, стационар не единственный.

Итак, мы продолжаем линию работы Больцмана, стараясь расширить класс уравнений, для которых справедлив закон возрастания энтропии. Такая работа проводилась многими учеными в связи с несколькими вопросами. Доказательство H-теоремы делает поведение решения уравнения понятным, так как позволяет узнать, к чему сходится решение для данного уравнения при стремлении времени к бесконечности. Это можно сделать без решения уравнения на основе принципа максимума энтропии. Во-вторых, H-теорема обеспечивает устойчивость полученных стационарных решений (экстремалей по Больцману).

Кроме того, не иссякает интерес к пониманию энтропии и ее связям с парадоксами Лошмидта и Цермело—Пуанкаре. Вопрос Лошмидта — как из обратимых уравнений механики получается необратимость и рост энтропии? Вопрос Цермело — не противоречит ли рост энтропии теореме о возврате Пуанкаре? Вопросы были обращены к Больцману, давшему в работе [6, 44] доказательство H-теоремы. Ответом на эти возражения могло бы служить сравнение разных моделей, которые применяются для описания поведения большого числа объектов. В частности, сравнение уравнения Лиувилля с его дискретизацией: когда их свойства близки, и правильно ли одно дает асимптотику другого при времени, стремящемся к бесконечности?

Диссипативные свойства уравнения Лиувилля были «нащупаны» уже Пуанкаре в работе [37] в 1906 г. Работа Пуанкаре [37] показала на примерах, что, несмотря на сохранение энтропии для уравнения Лиувилля, асимптотически она растет при стремлении времени к бесконечности. Эти результаты были доказаны и обобщены на случай произвольной гамильтоновой системы в работах В. В. Козлова и Д. В. Трещева [27,29]. Оказывается, что понятие экстремали по Больцману можно перенести с уравнений типа Больцмана без изменений на уравнения Лиувилля. При этом сохраняется основное свойство — совпадение временного среднего с экстремалью по Больцману [1, 11]. В разделе 5 настоящей работы мы рассматриваем случай уравнения Лиувилля, обобщая результаты [1, 11]. Предел при времени, стремящемся к бесконечности, здесь не всегда существует, в отличие от уравнений типа дискретных моделей уравнения Больцмана. Но для уравнения Лиувилля всегда существует временное среднее (его называют иногда средним по Чезаро [1,11,27,29]) — это статистическая эргодическая теорема фон Неймана [38]. Но в случае наличия предела даже в слабой форме он совпадает с временным средним.

В случае обобщений уравнений химической кинетики, в разделах 2-3, мы доказываем сходимость к экстремалям по Больцману, и здесь не требуется средних по Чезаро, так как предел при времени, стремящемся к бесконечности, существует. Таким образом, показывается, что во всех описанных случаях система сходится «туда, куда нужно» — к стационару, выделяющемуся максимумом энтропии при условиях линейных законов сохранения.

Роль именно линейных законов сохранения остается несколько загадочной и удивительной. Эти общие свойства для обратимого уравнения Лиувилля и необратимых дискретных моделей уравнения Больцмана, возможно, проясняют связь между обратимостью и необратимостью. При дискретизации уравнения надо тщательно следить за линейными (и только такими) законами сохранения: их следует оставлять ровно столько, сколько в исходном уравнении Лиувилля (если вообще возможно говорить о сопоставлении конечномерного пространства интегралов компьютера и бесконечномерного пространства интегралов исходного уравнения Лиувилля). При дискретизации любого уравнения Лиувилля всегда требуют сохранении числа частиц и сохранения свойства положительности, а любой линейный оператор, удовлетворяющий этим двум свойствам в конечномерном случае, дает стохастическую матрицу и определяет марковский процесс. Периодические траектории при дискретизации по пространству как бы совсем теряются — в этом смысле труднее всего моделировать уравнение Лиувилля для осциллятора. Дальнейшая дискретизация времени дает марковские цепи и возвращает периодические траектории (см. [1]).

Цели настоящего обзора следующие.

1. Написать обыкновенные дифференциальные уравнения, для которых имеется теорема о росте энтропии (H-теорема Больцмана), максимально обобщив результаты работ [5–8, 10, 12, 15, 19, 21, 24, 30, 32, 33, 36, 39, 42, 44, 45, 48–50], для квантового вида энтропии в случаях Бозе и Ферми и для произвольного вида H-функции.
2. Вывести формулу для относительной энтропии в квантовом случае и в случае общего вида H-функции.
3. Получить формулу относительной энтропии для уравнения Лиувилля, определяемой произвольной выпуклой функцией, обобщая этим результаты работ [1, 11, 27, 29, 37, 38, 48, 50]. Относительная энтропия требуется для систем, у которых дивергенция скорости не равна нулю.
4. Проверить, что во всех этих случаях временные средние совпадают с экстремалями Больцмана, обобщая и упрощая результаты работ [1, 5–8, 10–12, 15, 18, 19, 21, 22, 24, 27, 29, 30, 32, 33, 36–39, 42, 44, 45, 48–50].
5. Вывести уравнение Гамильтона—Якоби простейшим способом в конечномерном случае и обосновать появление переменных действие—угол в неинтегрируемой ситуации с помощью экстремалей Больцмана.
6. Обобщить теорему о совпадении временных средних и экстремалей Больцмана на представления групп. Проиллюстрировать теорему о росте энтропии по Пуанкаре и парадоксы необратимости в простейших случаях.

2. Модели химической кинетики

Пусть есть смесь из n химически взаимодействующих веществ с пространственно однородными концентрациями. Обозначим через $f_i(t)$ концентрацию i-го вещества ($i = 1, 2, \ldots, n$) в момент времени t.

В общем виде уравнения для сложных химических реакций записываются в виде [5, 10, 19]:

$$\frac{df_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{(\alpha,\beta)\in\Im} (\beta_i - \alpha_i) \left(K_\beta^\alpha \mathbf{f}^\alpha - K_\alpha^\beta \mathbf{f}^\beta \right), \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{2.1}$$

Здесь через $\mathbf{f}^\alpha$ обозначено произведение $\mathbf{f}^\alpha = f_1^{\alpha_1} f_2^{\alpha_2} \ldots f_n^{\alpha_n}$, суммирование ведется по некоторому конечному множеству $\Im$ мультииндексов (α, β), $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n)$ и $\beta = (\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_n)$ — векторы с целочисленными неотрицательными компонентами. Мультииндекс (α, β) соответствует элементарной реакции

$$\alpha_1 S_1 + \alpha_2 S_2 + \ldots + \alpha_n S_n \to \beta_1 S_1 + \beta_2 S_2 + \ldots + \beta_n S_n, \quad (\alpha, \beta) \in \Im,$$

S_i — химические символы реагирующих веществ, $K_\beta^\alpha \geqslant 0$ — коэффициенты скоростей реакций (константы реакций). Коэффициенты α_i, β_i называются *стехиометрическими коэффициентами*. Без ограничения общности можно считать множество $\Im$ симметричным относительно перестановок α и β. При этом некоторым парам (α, β) могут соответствовать нулевые коэффициенты скоростей реакций: $K_\beta^\alpha = 0$, при том, что возможно $K_\alpha^\beta > 0$ (допускается необратимость реакций). Например, для реакции $2S_1 + S_2 \to 2S_3$ имеем $\alpha = (2, 1, 0)$, $\beta = (0, 0, 2)$ и пару, симметричную ей. Тогда система (2.1) принимает вид:

$$df_1/dt = 2\left(k_2 f_3^2 - k_1 f_1 f_2^2\right),$$
$$df_2/dt = k_2 f_3^2 - k_1 f_1 f_2^2,$$
$$df_3/dt = 2\left(k_1 f_1 f_2^2 - k_2 f_3^2\right),$$

где k_1 — константа скорости прямой реакции $2S_1 + S_2 \to 2S_3$, а k_2 — обратной к ней: $2S_3 \to 2S_1 + S_2$.

Приведем еще пример: для реакции образования аммиака $N_2 + 3H_2 \to 2NH_3$ имеем $\alpha = (1, 3, 0)$, $\beta = (0, 0, 2)$ и пару, симметричную ей.

В [5, 10] представлена классификация уравнений химической кинетики (2.1) по энтропийному принципу: $S \subset D \subset E \subset C$, где через C обозначен класс всех систем (2.1) с конечным числом реакций, E — это класс систем, для которых выполняется условие динамического равновесия, и это, как показано в [5,10], гарантирует возрастание энтропии, D — класс систем (2.1) с детальным равновесием, S — класс систем с симметричными константами реакций, т. е. систем, для которых $K^{\alpha}_{\beta} = K^{\beta}_{\alpha}$. Эти понятия будут объяснены ниже в разделе 3 в более общей ситуации.

Если множество $\Im$ содержит только единичные векторы (т. е. векторы, у которых одна из компонент равна единице, а остальные равны нулю), то система (2.1) является линейной. Линейная система (2.1) — это уравнение марковского процесса.

Далее мы изучим системы уравнений более общего вида, чем (2.1). Важные физические примеры таких систем, которые будут рассмотрены в разделе 3 — дискретные модели квантовых кинетических уравнений и квантовые марковские процессы.

Все уравнения, которые мы привели выше, для которых имеет место H-теорема, обладают следующим фундаментальным свойством: для получения предела, к которому стремится решение при времени, стремящемся к бесконечности, нет необходимости решать уравнение, а можно найти условный максимум энтропии (H-функция с обратным знаком) при фиксированных линейных законах сохранения. Это мы проиллюстрируем в следующем разделе, а в дальнейшем мы расширим это свойство на произвольное уравнение Лиувилля и даже в теории представлений групп. Мы следуем в этих двух разделах статье [2], имея ввиду объединить результаты о совпадении временного среднего с экстремалями Больцмана этой статьи и понятия действие—угол из теории Гамильтона—Якоби.

3. Примеры

Пример 3.1. Дискретные модели квантовых кинетических уравнений (уравнений Улинга—Уленбека) [12] для смесей.

Пусть движение частиц происходит в d-мерном пространстве, $d = 1, 2, 3$. Пусть в классическом случае $f_i(t, \mathbf{x})$ — функция распределения частиц по пространству $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ в момент времени t, имеющих массу m_i и импульс $\mathbf{p}_i \in \mathbb{R}^d$, $i = 1, 2, \ldots, n$. Среди масс m_i могут быть и совпадающие. Про квантовый случай см. в [30]. Пусть скорость изменения функции $f_i(t, \mathbf{x})$ в результате взаимодействия частиц есть $F_i(f_1, \ldots, f_n)$. Тогда в пространственно однородном случае имеем систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{df_i}{dt} = F_i(f_1, \ldots, f_n), \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{3.1}$$

Если i-е вещество движется со скоростью $v_i \in \mathbb{R}^n$, то получаем следующую систему уравнений в частных производных:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + (v_i, \frac{\partial f_i}{\partial x}) = F_i(f_1, \ldots, f_n).$$

Здесь $(v_i, \frac{\partial f_i}{\partial x})$ — скалярное произведение скорости v_i и градиента $\frac{\partial f_i}{\partial \vec{x}} = (\frac{\partial f_1}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f_n}{\partial x_n})$. Эта система называется *дискретной моделью* квантового кинетического уравнения, если F_i моделирует интеграл столкновений:

$$F_i(f_1, \ldots, f_n) = \sum_{k,l,j} \sigma^{ij}_{kl} (1 + \theta f_i)(1 + \theta f_j)(1 + \theta f_k)(1 + \theta f_l)(h_k h_l - h_i h_j), \tag{3.2}$$

где $i = 1, \ldots, n$, $h_i = f_i/(1 + \theta f_i)$, $\sigma^{ij}_{kl} = \sigma^{kl}_{ij} = \sigma^{ji}_{kl} = \sigma^{ij}_{lk}$; $\theta = 1$ для бозонов, $\theta = -1$ для фермионов, $\theta = 0$ для дискретных моделей уравнения Больцмана. Суммирование ведется по таким k, l, j, которые участвуют в выбранных заранее взаимодействиях (столкновениях, реакциях) $(i, j) \leftrightarrow (k, l)$: для них $\sigma^{ij}_{kl} \neq 0$. Это множество четверок индексов $((i, j), (k, l))$, являющихся неупорядоченными парами неупорядоченных пар индексов, обозначим через S. Выбранные столкновения таковы, что для каждого из них удовлетворяются законы сохранения импульса и энергии:

$$\mathbf{p}_i + \mathbf{p}_j = \mathbf{p}_k + \mathbf{p}_l, \quad \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + \frac{\mathbf{p}_j^2}{2m_j} = \frac{\mathbf{p}_k^2}{2m_k} + \frac{\mathbf{p}_l^2}{2m_l},$$

где $m_i = m_k$, $m_j = m_l$.

Подчеркнем, что запись (3.1), (3.2) с совпадающими массами удобна тем, что позволяет избежать двуиндексных обозначений: реальное количество разных масс значительно меньше n.

В классическом случае (т. е. при $\theta = 0$) дискретная модель (3.1), (3.2) является системой уравнений химической кинетики. Далее рассмотрим простейший пример уравнений такого вида.

Пример 3.2. Классическая и квантовая пространственно однородная модель Карлемана.

Пространственно однородная модель Карлемана [24] — это система двух уравнений:

$$\begin{cases} \dfrac{df_1}{dt} = \sigma\left(f_2^2 - f_1^2\right), \\ \dfrac{df_2}{dt} = \sigma\left(f_1^2 - f_2^2\right). \end{cases} \tag{3.3}$$

Она является системой уравнений химической кинетики с одной обратимой реакцией вида $2S_1 \to 2S_2$: частицы одного сорта, взаимодействуя с собой, дают частицы второго сорта. (В данном случае константы прямой и обратной реакции равны — симметричный случай.)

Квантовая пространственно однородная модель Карлемана [12] — это система

$$\begin{cases} \dfrac{df_1}{dt} = \sigma\left(1+\theta f_1\right)^2\left(1+\theta f_2\right)^2\left(h_2^2 - h_1^2\right), \\ \dfrac{df_2}{dt} = \sigma\left(1+\theta f_1\right)^2\left(1+\theta f_2\right)^2\left(h_1^2 - h_2^2\right), \end{cases} \tag{3.4}$$

где $h_i = f_i/(1+\theta f_i)$ $(i = 1, 2)$, θ то же, что и в примере 3.1.

Отметим, что для модели Карлемана нет сохранения ни импульса, ни энергии, а есть только закон сохранения числа частиц: $f_1 + f_2 = \mathrm{const}$.

Следующий пример обобщает оба примера 3.1 и 3.2, а также уравнения химической кинетики (2.1) и уравнения квантовой химической кинетики с симметричными константами ($K_\beta^\alpha = K_\alpha^\beta$) на случай произвольного вида энтропии. Это позволяет получить самый простой способ доказательства H-теоремы с единой точкой зрения на столь различные ситуации.

Пример 3.3 (см. [10, 15]). Обобщение уравнений химической кинетики на случай произвольной H-функции, включающий квантовую химическую кинетику, но с симметричными коэффициентами. Это, видимо, простейшее доказательство H-теоремы, когда общность резко упрощает доказательство.

Пусть $H(\mathbf{f})$ некоторая функция и

$$h_i = \exp\left(\partial H/\partial f_i\right), \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{3.5}$$

Пусть $\sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f})$ — набор положительных функций таких, что $\sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f}) = \sigma_\alpha^\beta(\mathbf{f})$. Рассмотрим систему дифференциальных уравнений:

$$\frac{df_i}{dt} = \frac{1}{2}\sum_{(\alpha,\beta)\in\Im}\left(\beta_i - \alpha_i\right)\sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f})\left(\mathbf{h}^\alpha - \mathbf{h}^\beta\right). \tag{3.6}$$

Функционал H является убывающим в силу (3.6):

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{2}\sum_{(\alpha,\beta)\in\Im}\sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f})\left(\nabla H, \beta - \alpha\right)\left(\exp\left(\nabla H, \alpha\right) - \exp\left(\nabla H, \beta\right)\right) \leqslant 0. \tag{3.7}$$

вследствие неравенства $(x-y)\left(e^y - e^x\right) \leqslant 0$.

Если в качестве $H(\mathbf{f})$ взять стандартную энтропию со знаком минус: $H(\mathbf{f}) = \sum\limits_{i=1}^n f_i\left(\ln f_i - 1\right)$, $\dfrac{\partial H(\mathbf{f})}{\partial f_i} = \ln f_i$, то согласно (3.5) $\mathbf{h} = \mathbf{f}$, а если квантовую: $H(\mathbf{f}) = \sum\limits_{i=1}^n \left(f_i \ln f_i - \theta^{-1}\left(1+\theta f_i\right)\ln\left(1+\theta f_i\right)\right)$, $\dfrac{\partial H(\mathbf{f})}{\partial f_i} = \ln\left(f_i/(1+\theta f_i)\right)$, то $h_i = f_i/(1+\theta f_i)$. Мы получаем классические и квантовые модели, рассмотренные ранее, а неравенство (3.7) обеспечивает выполнение H-теоремы.

Далее рассмотрим примеры, в которых коэффициенты не симметричны. В рассмотренных дискретных моделях они были симметричны, поскольку такая симметрия присутствует в уравнении Больцмана и в уравнениях Улинга—Уленбека. Но если рассматривается задача рассеивания одного сорта частиц на частицах другого сорта с заданной функцией распределения, то в классическом случае получается линейное уравнение Больцмана для функции распределения частиц первого из сортов, а при его дискретизации (по импульсам) — марковский процесс (или случайное блуждание), где коэффициенты, вообще говоря, не симметричны. В квантовом случае получается квантовый марковский процесс. Их мы и рассмотрим в следующих примерах.

Пример 3.4. Случайное блуждание с двумя состояниями и его обобщения. Случайное блуждание (марковский процесс) с двумя состояниями описывается линейной системой двух уравнений:

$$\begin{cases} \dfrac{df_1}{dt} = K_1^2 f_2 - K_2^1 f_1, \\ \dfrac{df_2}{dt} = K_2^1 f_1 - K_1^2 f_2, \end{cases} \tag{3.8}$$

квантовое случайное блуждание с двумя состояниями — системой

$$\begin{cases} \dfrac{df_1}{dt} = (1+\theta f_1)(1+\theta f_2)\left(K_1^2 h_2 - K_2^1 h_1\right), \\ \dfrac{df_2}{dt} = (1+\theta f_1)(1+\theta f_2)\left(K_2^1 h_1 - K_1^2 h_2\right), \end{cases} \tag{3.9}$$

где $h_i = f_i/(1+\theta f_i)$ $(i=1,2)$.

Функционал H, определяемый соотношениями (3.5), уже не будет убывающим в случае несимметричных коэффициентов. Поэтому запишем обобщение систем (3.8) и (3.9) в виде:

$$\begin{cases} \dfrac{df_1}{dt} = \sigma(\mathbf{f})\left(K_1^2 h_2 - K_2^1 h_1\right), \\ \dfrac{df_2}{dt} = \sigma(\mathbf{f})\left(K_2^1 h_1 - K_1^2 h_2\right), \end{cases} \tag{3.10}$$

где $h_i = \exp\left(\partial G(\mathbf{f})/\partial f_i\right)$ $(i=1,2)$.

Пусть ξ является стационарным решением (3.10):

$$K_1^2 \exp\left(\frac{\partial G(\xi)}{\partial f_2}\right) = K_2^1 \exp\left(\frac{\partial G(\xi)}{\partial f_1}\right).$$

Тогда функционал $H(\mathbf{f}) \equiv G(\mathbf{f}) - (\nabla G(\xi), \mathbf{f})$ убывает вдоль решений системы (3.10):

$$\frac{dH(\mathbf{f})}{dt} = \left(\left(\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_1} - \frac{\partial G(\xi)}{\partial f_1}\right) - \left(\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_2} - \frac{\partial G(\xi)}{\partial f_2}\right)\right) \times$$

$$\times \sigma(\mathbf{f})\left(K_1^2 \exp\left(\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_2}\right) - K_2^1 \exp\left(\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_1}\right)\right) =$$

$$= \left(\left(\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_1} - \frac{\partial G(\xi)}{\partial f_1}\right) - \left(\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_2} - \frac{\partial G(\xi)}{\partial f_2}\right)\right) \sigma(\mathbf{f}) K_1^2 \exp\left(\frac{\partial G(\xi)}{\partial f_2}\right) \times$$

$$\times \left(\exp\left(\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_2} - \frac{\partial G(\xi)}{\partial f_2}\right) - \exp\left(\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_1} - \frac{\partial G(\xi)}{\partial f_1}\right)\right) \leqslant 0.$$

в силу неравенства $(x-y)(e^y - e^x) \leqslant 0$.

Система (3.8) представляет собой систему уравнений химической кинетики с одной обратимой реакцией вида $S_1 \to S_2$. Система (3.9) также является системой уравнений химической кинетики, и ее еще называют системой уравнений квантовой химической кинетики. Условие, при котором справедлива H-теорема, для этого примера формулируется так: существует вектор ξ такой, что $K_2^1 \xi_1/(1+\theta\xi_1) = K_1^2 \xi_2/(1+\theta\xi_2)$, и с помощью его выбора можно получить любые K_1^2 и K_2^1.

Пример 3.5. Квантовый марковский процесс (квантовое случайное блуждание) с произвольным конечным числом состояний. Он описывается системой уравнений вида:

$$\frac{df_m}{dt} = \sum_j (1+\theta f_m)(1+\theta f_j)\left(K_m^j h_j - K_j^m h_m\right), \tag{3.11}$$

где $m = 1, \ldots, n$, $h_m = f_m/(1+\theta f_m)$.

Во всех этих случаях H-теорема позволяет находить стационарное решение, к которому стремится произвольное решение из принципа Больцмана условного максимума энтропии, т. е. не решая уравнения.

В следующих разделах мы предложим приложение данной идеологии к методу Гамильтона—Якоби в негамильтоновой ситуации. В разделе 4 будет выведено уравнение Гамильтона—Якоби из уравнения Лиувилля и при этом сразу в бесконечномерном случае. В разделе 5 мы получим теорему о совпадении временных средних с экстремалями Больцмана по аналогии с разделами 1–3. Это даст нам аналоги переменных действие—угол в негамильтоновой и неинтегрируемой ситуации. В разделе 6 мы рассмотрим этот вопрос для представлений групп.

4. Метод Гамильтона—Якоби в негамильтоновой ситуации

Связь между уравнениями Гамильтона и Гамильтона—Якоби известна и обсуждается во многих учебниках по механике [4,31], но со студенческой скамьи один из авторов (В. В. В.) не был удовлетворен ситуацией: сами уравнения вообще ниоткуда не следовали и был скрыт их геометрический смысл. На одной из лекций В. В. Козлова этот автор увидел, что уравнения Гамильтона—Якоби получаются из некоторого уравнения, названного В. В. Козловым уравнением Лэмба, но откуда берутся сами уравнения Лэмба, было неясно. Автор заподозрил, что уравнения могут быть получены из уравнения Лиувилля гидродинамической подстановкой, и это оправдалось. Сам Козлов ссылался на работы Аржаных и Долматова [3, 23], но в его последующих работах все было проще и короче [25, 26, 28]. Так получился простейший вывод уравнений Гамильтона—Якоби, при этом уравнения Лэмба были обобщены на негамильтонову ситуацию [13, 14, 16, 17, 52]. Был также прояснен смысл этих обобщенных уравнений Лэмба: это уравнение движения m-мерных поверхностей в n-мерном фазовом пространстве исходной системы нелинейных дифференциальных уравнений. Уравнения Лэмба в гамильтоновом случае в средней размерности ведут к уравнениям Гамильтона—Якоби дальнейшей градиентной подстановкой (Аржаных—Долматов—Козлов) и таким образом приводят к лагранжевым многообразиям, введенным В. П. Масловым [34, 35]. Уравнения Лэмба обладают тем замечательным свойством, что для них, как правило, имеет место градиентная катастрофа или опрокидывание фронтов — одна из излюбленных тем В. И. Арнольда [4]: этим он занимался под влиянием Я. Б. Зельдовича, когда тот строил крупномасштабную теорию Вселенной (блинная теория Зельдовича). Об этом одному из авторов (В. В. В.) красочно рассказывал С. Ф. Шандарин: «*Арнольд мне присылает список особенностей, а я посчитаю, и говорю ему, что там есть еще. Он поищет аналитически, снова присылает список*». Так что теория гамильтоновых особенностей тоже связана с уравнениями типа Лэмба и гидродинамической подстановкой.

Рассмотрим Гамильтоновы канонические уравнения

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\partial H(\mathbf{x},\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}, \quad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H(\mathbf{x},\mathbf{p})}{\partial \mathbf{x}}, \tag{4.1}$$

где $\mathbf{p}$ — импульсы и $\mathbf{x}$ — пространственные переменные из $\mathbb{R}^n$.

Уравнение Лиувилля для функции распределения $f(\mathbf{x},\mathbf{p},\mathbf{t})$, полученное из (4.1), будет выглядеть следующим образом:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial x_i}\frac{\partial f}{\partial p_i}\right) = 0. \tag{4.2}$$

В уравнении Власова изучается подстановка $f(\mathbf{x},\mathbf{p},\mathbf{t}) = \rho(\mathbf{x},\mathbf{t})\delta(\mathbf{p}-\mathbf{Q}(\mathbf{x},\mathbf{t}))$ (так называемая *гидродинамическая подстановка*). Здесь $\delta(.)$ — функция Дирака, $\rho(\mathbf{x},\mathbf{t})$ и $\mathbf{Q}(\mathbf{x},\mathbf{t})$ имеют смысл плотности частиц и импульса частиц в точке $\mathbf{x}$ в момент времени t соответственно. Вывод уравнений для ρ и $\mathbf{Q}$ проводится прямым способом:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial t}\delta(\mathbf{p}-\mathbf{Q}) - \rho(\nabla\delta, \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{t}}),$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{\partial \rho}{\partial x_i}\delta - \rho(\nabla\delta, \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x_i}) + \rho\frac{\partial \delta}{\partial p_i}, \qquad \frac{\partial f}{\partial p_i} = \rho\frac{\partial \delta}{\partial p_i}.$$

Собирая множители при δ-функции, получаем:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n}\left(\left.\frac{\partial H}{\partial p_i}\right|_{p_i=Q_i}\frac{\partial \rho}{\partial x_i} + \rho\,\mathrm{div}\left.\frac{\partial H}{\partial p_i}\right|_{p_i=Q_i}\right) = 0.$$

Здесь мы должны положить во 2-ом слагаемом после операции дифференцирования $\mathbf{p} = \mathbf{Q}$; обозначим для краткости $\mathbf{V} \equiv (\partial H/\partial \mathbf{p})|_{\mathbf{p}=\mathbf{Q}}$. Тогда получаем уравнение, совпадающее по виду с классическим уравнением непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho V_i) = 0,$$

так что по физическому смыслу можно называть величину $\mathbf{V} = (\partial \mathbf{H}(\mathbf{x},\mathbf{p})/\partial \mathbf{p})|_{\mathbf{p}=\mathbf{Q}(\mathbf{x},\mathbf{t})}$, введенную выше, «обобщенной скоростью».

Приравнивая выражения при производных дельта-функции, получаем второе уравнение:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} V_i\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x_i} = \mathbf{F},$$

где $F_i(\mathbf{x},t) = -\partial H(\mathbf{x},\mathbf{Q}(\mathbf{x},t))/\partial x_i$ — компоненты обобщенной силы.

Итак, получаем систему уравнений (которую можно назвать редуцированной системой Эйлера или РСЭ), которая является точным следствием уравнения Лиувилля:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}(\rho\mathbf{V}) = 0, \qquad \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + (\mathbf{V}, \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{x}}) = \mathbf{F}, \tag{4.3}$$

где обобщенные скорость $\mathbf{V}$ и сила $\mathbf{F}$ определены выше.

Рассмотрим альтернативный вышеизложенному вывод уравнений (4.3) с помощью уравнений моментов. Проинтегрируем уравнение Лиувилля (4.2), полагая $\rho = \int f(\mathbf{x},\mathbf{p},t)d\mathbf{p}$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial f}{\partial x_i}d\mathbf{p} - \frac{\partial H}{\partial x_i}\frac{\partial f}{\partial p_i}d\mathbf{p}\right) = 0.$$

Второе слагаемое в скобках преобразуем, вынося $\partial/\partial x_i$ за знак интеграла, тогда учитывая, что $f = \rho(\mathbf{x},t)\delta(\mathbf{p}-\mathbf{Q})$:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\int\frac{\partial H}{\partial p_i}\rho(\mathbf{x},t)\delta(\mathbf{p}-\mathbf{Q})\,d\mathbf{p} = \int\frac{\partial^2 H}{\partial x_i\partial p_i}f\,d\mathbf{p} + \int\left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)\,d\mathbf{p},$$

откуда имеем для второго слагаемого:

$$\int\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial f}{\partial x_i}\,d\mathbf{p} = \mathrm{div}(\rho\mathbf{V}) - \frac{\partial^2 H}{\partial x_i\partial p_i}(\mathbf{x},\mathbf{Q})\rho,$$

а третье слагаемое преобразуем, интегрируя по частям:

$$\int\frac{\partial H}{\partial x_i}\frac{\partial f}{\partial p_i}\,d\mathbf{p} = \rho\frac{\partial^2 H}{\partial x_i\partial p_i}(\mathbf{x},\mathbf{Q}).$$

Это слагаемое сокращается с последним членом второго, и окончательно получаем уравнение неразрывности.

Чтобы получить второе из уравнений РСЭ, умножим (4.2) на $\mathbf{p}$ и, обозначая $\mathbf{Q}(\mathbf{x},t) = \rho^{-1}\int f(\mathbf{x},\mathbf{p},t)\mathbf{p}\,d\mathbf{p}$, получаем:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\mathbf{Q}) + \sum_{i=1}^{n}\left(\int\mathbf{p}\frac{\partial f}{\partial x_s}\frac{\partial H}{\partial p_s}d\mathbf{p} - \int\mathbf{p}\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial x_i}d\mathbf{p}\right) = 0.$$

Делая преобразования, аналогичные рассмотренным выше при выводе уравнения неразрывности, имеем

$$\int \mathbf{p}\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial f}{\partial x_i}d\mathbf{p} = \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\mathbf{Q}V_i) - \rho\mathbf{Q}\frac{\partial^2 H}{\partial x_i \partial p_i}(\mathbf{x},\mathbf{Q}) - \int \mathbf{p}\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial x_i}d\mathbf{p} =$$

$$= \int \frac{\partial^2 H}{\partial x_i \partial p_i}\mathbf{p}\rho\delta(\mathbf{p}-\mathbf{Q})d\mathbf{p} + \rho\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{x},\mathbf{Q}).$$

Получаем окончательно:

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{Q})}{\partial t} + \int\left(\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\mathbf{Q}V_i)\right) = \rho\mathbf{F}.$$

Последнее уравнение несколько отличается по внешнему виду от второго уравнения РСЭ (4.3), но приводится к таковому с привлечением уравнения неразрывности. Однако, вообще говоря, оно представляет и самостоятельный интерес, поэтому запишем РСЭ в новой форме:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\mathbf{V}) = 0, \quad \frac{\partial(\rho\mathbf{Q})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\mathbf{Q}\mathbf{V}) = \rho\mathbf{F}. \tag{4.4}$$

Второе из уравнений системы (4.3) совпадает с уравнением, выведенным в [25, 26, 28] из других соображений. Поэтому систему (4.3) или (4.4) можно считать выведенной из уравнений Гамильтона, как обоснование результатов этих работ. В работах [25, 26, 28] показывается, как из (4.3) получаются уравнения Гамильтона—Якоби. Во-первых, приведем второе уравнение (4.3) к форме Громеки—Лэмба [14, 25, 26, 28]:

$$\frac{\partial\mathbf{Q}}{\partial t} + V_i\frac{\partial\mathbf{Q}}{\partial x_i} - V_i\frac{\partial Q_i}{\partial\mathbf{x}} = -\frac{\partial H}{\partial\mathbf{x}} - \frac{\partial H}{\partial p_i}(\mathbf{x},\mathbf{Q})\frac{\partial Q_i}{\partial\mathbf{x}}. \tag{4.5}$$

Выражение $(\partial Q_i/\partial x_j)dx_i \wedge dx_j$ есть дифференциал от $Q_i dx_j$, и форма Громека показывает, что уравнение для ротора $R_{ij} = \partial Q_i/\partial x_j - \partial Q_j/\partial x_i$ имеет решение $\mathbf{R} \equiv 0$:

$$\frac{\partial\mathbf{R}}{\partial t} + \operatorname{rot}[\mathbf{R},\mathbf{V}] = 0. \tag{4.6}$$

Мы воспользовались тем, что второе и третье слагаемое в левой части (4.5) — это компоненты векторного произведения $[\mathbf{R},\mathbf{V}]$, а справа стоит градиент функции:

$$\frac{\partial H(\mathbf{x},\mathbf{Q})}{\partial x_i} = \frac{\partial H(\mathbf{x},\mathbf{Q})}{\partial x_j} + \frac{\partial H(\mathbf{x},\mathbf{Q})}{\partial p_i}\frac{\partial Q_i}{\partial x_j}$$

(композиция $\operatorname{rot}\circ\operatorname{grad}$). Обратно, если ротор $\mathbf{Q}$ равен нулю, то $\mathbf{Q}$ есть градиент некоторой функции (в односвязной области): $Q_i = \partial S/\partial x_i$, и это свойство, как показывает уравнение (4.6), сохраняется со временем. Из (4.5) следует:

$$\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}\left(\frac{\partial S}{\partial t} + H(\mathbf{x},\frac{\partial S}{\partial\mathbf{x}})\right) = 0.$$

Отсюда $\partial S/\partial t + H(\mathbf{x}, \partial S/\partial\mathbf{x}) = f(t)$. Снова следуя [25, 26, 28] и делая замену $S = \tilde{S} + \int f(t)dt$, получаем чистое уравнение Гамильтона—Якоби:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(\mathbf{x},\frac{\partial S}{\partial\mathbf{x}}) = 0.$$

В частности, если $H = p^2/(2m) + U(\mathbf{x})$, то $\mathbf{V}(\mathbf{x},t) = (\partial H(\mathbf{x},\mathbf{p})/\partial\mathbf{p})|_{\mathbf{p}=\mathbf{Q}} = \mathbf{Q}/m$ (стандартная функция Гамильтона для классической частицы), $\mathbf{F} = -(\partial H(\mathbf{x},\mathbf{p})/\partial\mathbf{x})|_{\mathbf{p}=\mathbf{Q}} = -\partial U/\partial\mathbf{x}$. Система (4.3) в этом случае имеет вид

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{1}{m}\operatorname{div}(\rho\mathbf{Q}) = 0, \quad \frac{\partial\mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{1}{m}(\nabla\mathbf{Q},\mathbf{Q}) = -\frac{\partial U}{\partial\mathbf{x}}.$$

Отметим, что в этом случае уравнение Гамильтона—Якоби имеет вид

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S,\nabla S) + U(\mathbf{x}) = 0.$$

Итак, мы получили уравнение Гамильтона—Якоби простейшим способом. Аналогичные уравнения можно получить и для негамильтонова случая — гидродинамическая подстановка проходит (см. [16, 17, 52]). При этом класс получающихся уравнений совпадает с уравнениями с одинаковой главной частью.

Рассмотрим теперь общую (негамильтонову) автономную систему обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка в n-мерном пространстве:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \quad t \in \mathbb{R}^1. \tag{4.7}$$

Введем вновь функцию распределения $f(\mathbf{x}, t)$ изображающих точек в n-мерном фазовом пространстве, представляющую собой вероятность пребывания точки траектории динамической системы в окрестности данной точки пространства $\mathbb{R}^n$ в момент времени t. Ее эволюция описывается обобщенным уравнением Лиувилля:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div}_n(\mathbf{v}f) = 0. \tag{4.8}$$

Чтобы описать движение m-мерной ($1 \leqslant m \leqslant n-1$) поверхности, представим вектор $\mathbf{x}$ как упорядоченную пару $(\mathbf{q}, \mathbf{p})^T$, $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^{n-m}$. Иначе говоря, разложим фазовое пространство системы в декартову сумму фазовых множеств, определяемых новыми переменными: $\mathbb{R}^n_{\mathbf{x}} = \mathbb{R}^m_{\mathbf{q}} \oplus \mathbb{R}^{n-m}_{\mathbf{p}}$. Перепишем систему (4.7) в этих переменных:

$$\frac{d\mathbf{q}}{dt} = \mathbf{w}(\mathbf{q}, \mathbf{p}), \quad \frac{\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{g}(\mathbf{q}, \mathbf{p}), \tag{4.9}$$

где $\mathbf{w}(\mathbf{q},\ \mathbf{p})$ и $\mathbf{g}(\mathbf{q},\ \mathbf{p})$ — это, соответственно, m первых и $n-m$ последних компонент векторной функции $\mathbf{v}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ из (4.7) (т. е. $(\mathbf{w}, \mathbf{g})^T = \mathbf{v}$).

Будем искать решение уравнения Лиувилля (4.8), вновь используя гидродинамическую подстановку: $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \rho(\mathbf{q}, t)\delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}(\mathbf{q}, t))$. Здесь $\mathbf{p} = \mathbf{P}(\mathbf{q}, t)$ — уравнение m-мерной поверхности в момент времени t, $\rho(\mathbf{q}, t)$ — плотность изображающих точек на ней. Подстановка данного представления $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ в уравнение (4.8) дает уравнение неразрывности и уравнение движения поверхности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{k=1}^{m} \frac{\partial}{\partial q_k}(\rho W_k) = 0, \tag{4.10}$$

$$\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + \sum_{k=1}^{m} W_k \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial q_k} = \mathbf{G}. \tag{4.11}$$

Здесь $\mathbf{W}(\mathbf{q}, t) = \mathbf{w}(\mathbf{q}, \mathbf{P}(\mathbf{q}, t))$, $\mathbf{G}(\mathbf{q}, t) = \mathbf{g}(\mathbf{q}, \mathbf{P}(\mathbf{q}, t))$. Отсюда получаем уравнение Гамильтона—Якоби, как и выше в гамильтоновом случае.

Итак, в настоящем разделе мы получили вывод уравнения Гамильтона—Якоби простейшим способом. Метод Гамильтона—Якоби состоит из двух частей: уравнение Гамильтона—Якоби и выбор замены переменных. Мы получили, что на роль аналога уравнения Гамильтона—Якоби претендует любое из уравнений волновых фронтов (движения поверхностей) в евклидовом пространстве конечной размерности как в гамильтоновом, так и в негамильтоновом случаях. Действительно, уравнения Гамильтона—Якоби описывают движения n-мерных поверхностей в $2n$-мерном пространстве специального вида — лагранжевых, в терминологии В. П. Маслова и В. И. Арнольда [4, 20, 34]. В этом смысле уравнения волновых фронтов более общие и в гамильтоновой ситуации.

В следующем разделе мы обсуждаем вторую часть метода Гамильтона—Якоби: оптимальный выбор координат для данного уравнения. По сути, будет доказана теорема о существовании некого аналога переменных действие—угол в негамильтоновой неинтегрируемой ситуации.

5. Вариационный принцип для уравнения Лиувилля, экстремали Больцмана и переменные действие—угол

Специалисты по механике привыкли к тому, что переменные действие—угол появляются в интегрируемых случаях при наличии соответствующих интегралов в инволюции. Здесь, опираясь на теорему о совпадении временных средних с экстремалями Больцмана, мы предъявляем в негамильтоновом случае в неинтегрируемых ситуациях координаты, которые во многих случаях аналогичны переменным действие—угол. В каких смыслах — обсудим в конце раздела.

Рассмотрим систему n обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$d\mathbf{x}/dt = \mathbf{v}\left(\mathbf{x}\right). \tag{5.1}$$

Здесь $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$, $\mathbf{v}\left(\mathbf{x}\right) = \left(v_1\left(\mathbf{x}\right), v_2\left(\mathbf{x}\right), \ldots, v_n\left(\mathbf{x}\right)\right)$, $v_i\left(\mathbf{x}\right)$ — непрерывно дифференцируемые функции.

Рассмотрим уравнение неразрывности или уравнение Лиувилля для этой системы:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div} f\mathbf{v}\left(\mathbf{x}\right) = 0. \tag{5.2}$$

Пусть решение системы (5.1) существует и единственно при всех временах (т. е. в целом). Если она бездивергентна: $\operatorname{div}\mathbf{v}\left(\mathbf{x}\right) = 0$, то решение уравнения (5.2) можно записать в виде

$$f\left(t, \mathbf{x}\right) = f\left(0, \mathbf{g}^{-t}\left(\mathbf{x}\right)\right), \tag{5.3}$$

где $\mathbf{g}^t\left(\mathbf{x}\right)$ — положение точки, движущейся в силу системы (5.1), в момент времени t при условии, что при $t = 0$ она совпадала с $\mathbf{x}$: $\mathbf{g}^0\left(\mathbf{x}\right) \equiv \mathbf{x}$.

Определим временные средние, или средние по Чезаро, решения уравнения (5.2) формулой

$$f_T\left(\mathbf{x}\right) = \frac{1}{T}\int\limits_0^T f\left(t, \mathbf{x}\right) dt.$$

Правая часть (5.3) при фиксированном t задает оператор, действующий на функцию $f\left(\mathbf{x}\right)$. Этот оператор линейный, и он сохраняет L_2-норму функции в случае, если $\operatorname{div}\mathbf{v}\left(\mathbf{x}\right) = 0$. Именно для таких операторов справедлива статистическая эргодическая теорема фон Неймана, которая утверждает, что предел f^C (Чезаро) функции f_T при T, стремящемся к бесконечности, существуют в $L_2\left(\mathbb{R}^n\right)$ при любых начальных данных из этого же пространства.

В бездивергентном случае определим энтропию формулой

$$S\left(h\right) = -\int h\left(\mathbf{x}\right)\ln h\left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x}$$

как строго вогнутый функционал на положительных функциях $h\left(\mathbf{x}\right)$ из $L_2\left(\mathbb{R}^n\right)$. Такие функционалы сохраняются для уравнения (5.2) в бездивергентном случае. Однако в работе Пуанкаре [37] обсуждался вопрос о росте энтропии для предельной функции на частном примере бесстолкновительного газа. В. В. Козловым и Д. В. Трещевым было доказано обобщение этого факта в [27, 29], т. е. что энтропия временного среднего не меньше, чем энтропия начального распределения для уравнений (5.2). В [11] было показано, что решение уравнения (5.2) сходится «туда, куда надо»: временные средние определяются условным принципом максимума энтропии (принцип Больцмана), и вместо стандартной энтропии $S\left(h\right) = -\int h\left(\mathbf{x}\right)\ln h\left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x}$ можно брать вогнутые функционалы $S\left(h\right) = \int \phi\left(h\left(\mathbf{x}\right)\right) d\mathbf{x}$, где ϕ — строго вогнутая функция. Первые попытки применить принцип Больцмана в этой ситуации содержатся в [10]. В настоящем разделе мы обобщим результат работы [11] на случай, когда дивергенция не равна нулю.

Пример 5.1 (см. [10])**.** Гармонический осциллятор.

Рассмотрим динамическую систему $dx/dt = v$, $dv/dt = -x$. Соответствующее уравнение неразрывности имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v\frac{\partial f}{\partial x} + x\frac{\partial f}{\partial v} = 0.$$

Его решение, как и решение исходной динамической системы, осциллирует со временем и не стремится к стационару. Однако формула для экстремали Больцмана приводит к осмысленному результату: $f^B = exp(\lambda(H))$, где $H = (1/2)(v^2 + x^2)$ — энергия системы, $\lambda(H)$ — множитель Лагранжа (произвольная функция от энергии).

Если $\operatorname{div}\mathbf{v}\left(\mathbf{x}\right) \neq 0$, но имеется не обращающееся в нуль стационарное решение $\xi\left(\mathbf{x}\right)$ уравнения (5.2):

$$\operatorname{div}\xi\mathbf{v}\left(\mathbf{x}\right) \equiv 0, \tag{5.4}$$

то непосредственной подстановкой проверяется, что (5.2) равносильно уравнению бездивергентного вида:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \left(\mathbf{v}\left(\mathbf{x}\right), \frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}}\right) = 0, \tag{5.5}$$

где $F \equiv f/\xi$. Решение уравнения (5.5) можно записать в виде $F\left(t, \mathbf{x}\right) = F\left(0, \mathbf{g}^{-t}\left(\mathbf{x}\right)\right)$. Поэтому решение уравнения (5.2) имеет вид:

$$f\left(t, \mathbf{x}\right) = \frac{\xi\left(x\right)}{\xi\left(\mathbf{g}^{-t}\left(\mathbf{x}\right)\right)} f\left(0, \mathbf{g}^{-t}\left(\mathbf{x}\right)\right). \tag{5.6}$$

Положительное стационарное решение $\xi\left(\mathbf{x}\right)$ уравнения Лиувилля (5.2) определяет инвариантную меру $\xi d\mathbf{x}$. Для новой функции распределения F число частиц в области $G\left(t\right)$ записывается в виде: $N\left(G\left(t\right)\right) = \int\limits_{G(t)} F\left(t, \mathbf{x}\right) \xi\left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x}$. Функция F не растет, так как полная производная от нее есть нуль, и поскольку число частиц сохраняется, то мера $\xi d\mathbf{x}$ сохраняется тоже:

$$\xi\left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x} = \xi\left(\mathbf{g}^{-t}\left(\mathbf{x}\right)\right) d\mathbf{g}^{-t}\left(\mathbf{x}\right). \tag{5.7}$$

В качестве энтропии для (5.2) требуется строго вогнутый функционал, не убывающий на решениях уравнения (5.2). Если стационарное решение $\xi\left(\mathbf{x}\right)$ положительно для всех $\mathbf{x}$, то энтропией для (5.2) является функционал

$$S\left(h\right) = \int \xi \phi\left(h/\xi\right) d\mathbf{x} \tag{5.8}$$

на положительных функциях $h\left(\mathbf{x}\right)$ из $L_2\left(\mathbb{R}^n\right)$, где ϕ — строго вогнутая функция, определенная при положительных значениях своего аргумента. Действительно, он не убывает на решениях уравнения (5.2):

$$S\left(f\left(t, \cdot\right)\right) = \int \xi\left(\mathbf{x}\right) \phi\left(f\left(t, \mathbf{x}\right)/\xi\left(\mathbf{x}\right)\right) d\mathbf{x} = \int \xi\left(\mathbf{x}\right) \phi\left(f\left(0, \mathbf{g}^{-t}\left(\mathbf{x}\right)\right)/\xi\left(\mathbf{g}^{-t}\left(\mathbf{x}\right)\right)\right) d\mathbf{x} =$$

$$= \int \xi\left(\mathbf{g}^{-t}\left(\mathbf{x}\right)\right) \phi\left(f\left(0, \mathbf{g}^{-t}\left(\mathbf{x}\right)\right)/\xi\left(\mathbf{g}^{-t}\left(\mathbf{x}\right)\right)\right) d\mathbf{g}^{-t}\left(\mathbf{x}\right) = S\left(f\left(0, \cdot\right)\right).$$

Здесь мы сначала воспользовались (5.6), а потом (5.7).

Определим линейные законы сохранения уравнения неразрывности (5.2) как линейные функционалы $I_q\left(h\right) = \int q\left(\mathbf{x}\right) h\left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x} = \left(q, h\right)$, сохраняющиеся в силу (5.2): $\left(q, f\left(t, \cdot\right)\right)$ не зависит от времени на решениях $f\left(t, \mathbf{x}\right)$ уравнения (5.2). Обозначим через I множество всех таких функций q из L_2 (интегралы).

Рассмотрим задачу Коши для (5.2) с положительными начальными условиями $f\left(0\right)$ из $L_2\left(\mathbb{R}^n\right)$. Рассмотрим экстремаль Больцмана $f^B = f^B\left(f\left(0\right)\right)$ как функцию, где достигается максимум энтропии (5.8) при фиксированных законах сохранения: $S\left(f^B\right) = \max S\left(h\right)$ на множестве $L\left(I, f\left(0\right)\right) = \{h \text{ такие, что } \left(q, h - f\left(0\right)\right) = 0 \text{ для всех } q \text{ из } I\}$.

Норма функции $h\left(\mathbf{x}\right)$ задается в $L_2\left(\mathbb{R}^n\right)$ выражением $\sqrt{\int h^2\left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x}}$, определенным только для функций из $L_2\left(\mathbb{R}^n\right)$. Потребуем от стационарного решения ξ, чтобы выражение

$$\sqrt{\int h^2\left(\mathbf{x}\right)/\xi\left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x}} \tag{5.9}$$

также давало норму $h\left(\mathbf{x}\right)$ в $L_2\left(\mathbb{R}^n\right)$, определенную только на функциях из $L_2\left(\mathbb{R}^n\right)$. Тогда справедлива следующая

Теорема 5.1. *Пусть на множестве* $L\left(I, f\left(0\right)\right)$ *энтропия* (5.8) *определена, непрерывна, и если* $L\left(I, f\left(0\right)\right)$ *неограниченно, то* $\lim\limits_{\substack{\|f\|_{L_2} \to +\infty \\ f \in L(I, f(0))}} S\left(f\right) = -\infty$.

Тогда:

1. *экстремаль Больцмана существует и единственна*;
2. *среднее Чезаро и экстремаль Больцмана совпадают*: $f^C = f^B$.

Доказательство. Норма (5.9) получается, если взять корень из «минус энтропии» (5.8) при $\phi(h) = -h^2$. В силу того, что энтропия сохраняется, норма (5.9) также сохраняется на решениях, т. е. при действии оператора (5.6). Значит, в силу условия на стационарное решение ξ оператор (5.6), действуя на функцию из L_2, снова дает функцию из L_2, и его норма, порожденная нормой функций (5.9), равна единице. Применив теорему из [11] или [1] для этого линейного оператора, получаем теорему 5.1. □

Теорема 5.2. *Пусть выполнены условия теоремы* 5.1 *и существует базис гладких линейных законов сохранения* $\mathbf{q}(\mathbf{x}) \equiv \{q_1(\mathbf{x}), q_2(\mathbf{x}), \ldots, q_k(\mathbf{x})\}$: *множество всех линейных законов сохранения* I *совпадает с множеством всех функций* $\lambda(q_1(\mathbf{x}), q_2(\mathbf{x}), \ldots, q_k(\mathbf{x}))$ *из* $L_2(\mathbb{R}^n)$. *Тогда экстремаль Больцмана существует, единственна, совпадает с временным средним и имеет вид*:

$$f^B(\mathbf{x}) = N^{-1}\eta(\mathbf{q},\psi)\int g(\mathbf{q},\psi)\,J(\mathbf{q},\psi)\,d\psi\Big|_{\mathbf{q}=\mathbf{q}(\mathbf{x})}, \tag{5.10}$$

где $N \equiv \int \eta(\mathbf{q},\psi)\,J(\mathbf{q},\psi)\,d\psi$, $\psi(\mathbf{x}) \equiv \{\psi_1(\mathbf{x}), \psi_2(\mathbf{x}), \ldots, \psi_{n-k}(\mathbf{x})\}$ — *координаты на множествах* $\mathbf{q}(\mathbf{x}) = \mathrm{const}$, *причем совокупность* $(\mathbf{q},\psi)$ *дает систему координат в* $\mathbb{R}^n$, $J(\mathbf{q},\psi)$ — *якобиан перехода к этой системе координат,* $g(\mathbf{q},\psi) \equiv f(0,\mathbf{x})$, $\eta(\mathbf{q},\psi) \equiv \xi(\mathbf{x})$.

Доказательство. Применим теорему 5.1 и получим экстремаль по Больцману:

$$f^B(\mathbf{x}) = \xi(\mathbf{x})\cdot\left[\phi'\right]^{-1}\left(\lambda\left(q_1(\mathbf{x}), q_2(\mathbf{x}), \ldots, q_k(\mathbf{x})\right)\right). \tag{5.11}$$

Определяем $\lambda(q_1(\mathbf{x}), q_2(\mathbf{x}), \ldots, q_k(\mathbf{x}))$ из законов сохранения по начальным данным:

$$\int \gamma(\mathbf{q}(\mathbf{x}))\,f^B(\mathbf{x})\,d\mathbf{x} = \int \gamma(\mathbf{q}(\mathbf{x}))\,f(0,\mathbf{x})\,d\mathbf{x},$$

где $\gamma(\mathbf{q}(\mathbf{x}))$ — произвольная функция из L_2 от функций $q_1(\mathbf{x})$, $q_2(\mathbf{x})$,..., $q_k(\mathbf{x})$.

Переходя к координатам $(\mathbf{q},\psi)$, с учетом (5.11) имеем:

$$\int \gamma(\mathbf{q})\cdot\eta(\mathbf{q},\psi)\cdot\left[\phi'\right]^{-1}(\lambda(\mathbf{q}))\cdot J(\mathbf{q},\psi)\,d\mathbf{q}d\psi = \int \gamma(\mathbf{q})\cdot g(\mathbf{q},\psi)\cdot J\cdot d\mathbf{q}d\psi.$$

В силу произвольности функции γ получаем:

$$\left[\phi'\right]^{-1}(\lambda(\mathbf{q}))\cdot\int \eta(\mathbf{q},\psi)\,J(\mathbf{q},\psi)\,d\psi = \int g(\mathbf{q},\psi)\,J(\mathbf{q},\psi)\,d\psi,$$

и отсюда (5.10). □

Отметим работу [22], в которой доказывалось, что при фиксированной непрерывной функции область значений временного среднего совпадает с областью значений пространственных средних. Пространственные средние, рассматриваемые в [22], и есть экстремали по Больцману.

Еще одно возможное приложение — это эргодическая гипотеза [18]. Например, для твердых шаров в ящике: это старая проблема о том, что при времени, стремящемся к бесконечности, функция распределения сходится только к функции от энергии. Тут две проблемы — доказать, что сходимость есть, и вычислить предел. Теоремы типа Пуанкаре—Козлова—Трещева [27, 29, 37] решают первую из них. Из теорем работ [1, 11] следует, что этот предел зависит только от интегралов — шажок в решении именно второй проблемы. Теперь задача сведена к рассмотрению интегралов, т. е. достаточно исследовать стационарное уравнение Лиувилля. Надо добавить граничное условие зеркального отражения на границе области и доказать, что решение такой граничной задачи в L_2 является функцией только кинетической энергии. Такая редукция к описанию множества интегралов в эргодической проблеме возможна и для других уравнений с помощью теорем из работ [1, 11] и настоящего раздела.

Функции $q(x) \equiv \{q_1(x), q_2(x), \ldots, q_k(x)\}$, базис гладких линейных законов сохранения, и есть аналоги переменных действия, а дополнительные функции $\phi(x) \equiv \{\phi_1(x), \phi_2(x), \ldots, \phi_{n-k}(x)\}$, координаты на множествах $q(x) = \mathrm{const}$ — это аналоги углов.

6. Энтропия и H-теорема в теории представлений групп

Назовем выпуклый функционал $S(x)$, $x \in V$, *энтропией* представления ρ группы G, если $S(gx) \geqslant S(x)$ для всех $g \in G$.

Лемма 6.1. *Энтропия сохраняется при действии G: если $S(gx) \geqslant S(x)$, то $S(gx) = S(x)$.*

Доказательство. $S(x) = S(g^{-1}gx) \geqslant S(gx)$, и мы доказали обратное неравенство, а потому и равенство. □

Такое свойство, когда любой убывающий функционал оказывается сохраняющимся, можно рассматривать как свойство обратимости динамики. Здесь обратимость оказывается просто связанной с групповым свойством динамики.

Введем понятие *среднего* (аналог временного среднего) для действия группы G:

$$[x] = \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}\rho(g)x = \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}gx. \tag{6.1}$$

Здесь $|G|$ — количество элементов в группе.

Лемма 6.2. *Энтропия существует.*

Доказательство. Если $K(x)$ — произвольный выпуклый функционал, то $S(x) = \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}K(gx)$ — энтропия: $S(gx) = S(x)$. Действительно, линейная комбинация $\phi(x) = \sum\lambda_i\phi_i(x)$ выпуклых функционалов $\phi_i(x)$ с положительными коэффициентами λ_i является выпуклой. □

Теорема 6.1 (H-теорема для представлений групп)**.** $S([x]) \geqslant S(x)$.

Доказательство. $S([x]) = S\Big(\frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}gx\Big) \geqslant \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}S(gx) = \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}S(x) = S(x)$; мы воспользовались выпуклостью $S(x)$. Это аналог теоремы Пуанкаре—Козлова—Трещева для уравнения Лиувилля [29, 37]. □

Эта теорема вместе с леммой 6.1 связывают обратимость и необратимость в наиболее ясном виде. Эта связь очень волновала классиков Больцмана, Лошмидта, Цермело, Пуанкаре [6,7,37,44,45], и возможно, являлась одной из мотивировок эргодической теории [38, 41, 53]. Она продолжает интересовать и современных исследователей [2, 29, 40]. Рост энтропии в теореме 6.1 связывается с усреднением: наблюдатель при быстром усреднении видит именно среднее, как спицы у вращающегося колеса или белый цвет вращающегося разноцветного волчка Максвелла. Это полностью согласуется с работами [29, 37], где группа — это действительные числа (аналог времени): там тоже при эволюции энтропия парадоксальным образом сохраняется, а ее предел больше или равен (но в примерах часто оказывается строго больше), чем эта сохраняющаяся величина. Отметим, что аналогия не буквальная, ибо в классических эргодических теоремах Биркгофа, фон Неймана, Рисса и Боголюбова речь всегда идет о полугруппах, так как усреднение происходит по положительной полуоси. В случае некомпактных групп необходимо заботиться о сходимости, но уже фон Нейманом и Риссом [38, 41, 53] была получена по сути альтернативная формулировка в форме проекционного метода, что мы проделаем в следующем разделе.

Пусть $I \subset V$ — линейное подпространство инвариантов: $I = \{x \in V \;|gx = x \;\forall g \in G\}$. Пусть $W \subset V$ — линейная оболочка элементов $x - gx$.

Лемма 6.3. *V есть прямая сумма I и W: $V = I \oplus W$.*

Доказательство. Каждый элемент $x \in V$ представим в виде $x = \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}gx + \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}(x - gx)$. Здесь первая сумма — элемент подпространства I, а вторая — из W. □

Следствие 6.1. *Среднее $[x]$ совпадает с проекцией x на подпространство I: $[x] = P_I(x)$.*

В теоремах фон Неймана и Рисса [38, 41, 53] такая проекция ортогональна, так как действие группы сохраняет норму гильбертова пространства. Здесь проекция не ортогональна в общем случае, и все выводы не зависят от какой-либо нормы, а связаны только с линейностью пространства.

Пример. Рассмотрим представление группы $\mathbb{Z}_2 = \{e, g\}$ в двумерном пространстве. Для неединичного элемента g выполнено: $g^2 = e$.

Оператор $\rho(g) = \begin{pmatrix} -1 & a \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, а значит, вектор $(a, 2)$ инвариантен относительно действия $\rho(g)$, т. е. порождает пространство I, а вектор $(1, 0)$ переходит в $(-1, 0)$, т. е. порождает пространство W.

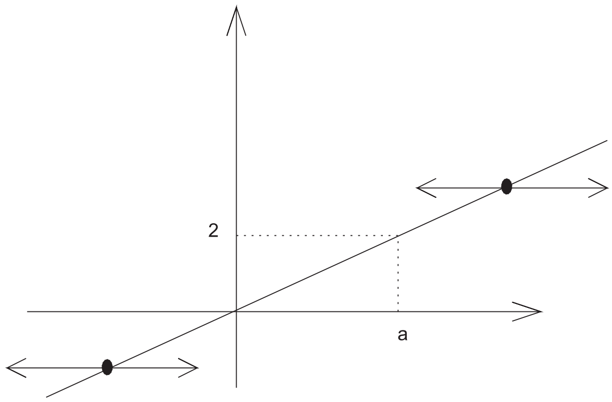

Рис. 1

Итак, здесь наше представление — это отражение (см. рис. 1), но не ортогональное в смысле обычной метрики. Отметим, что в теореме фон Неймана речь идет о группе $\mathbb{R}$, а в теореме Рисса — о группе $\mathbb{Z}$ (строго говоря, о положительных их частях, т. е. о полугруппах), а проекции ортогональны в смысле метрики гильбертова пространства.

Работы [6, 44] и [7, 45] — самые известные работы Больцмана. В работе [6, 44] доказывается H-теорема и на примере дискретной модели уравнения Больцмана «нащупывается» понятие экстремали энтропии при фиксированных линейных законах сохранения (с. 155-156 русского издания), к которому стремится решение уравнения при времени, стремящемся к бесконечности. В работе [7, 45] вводится то, что называется статистикой Больцмана, и экстремаль Больцмана уже используется как фундаментальное понятие и как рабочий инструмент: находится условный максимум энтропии с множителями Лагранжа при интегралах числа частиц и кинетической энергии, и получается максвелловское распределение (с. 209 русского издания). Определим это понятие в нашем случае представлений групп аналогичным образом, как условный экстремум энтропии при тех же инвариантах, что и исходный вектор пространства, где действует представление.

Обозначим через V_x множество векторов пространства V таких, что их проекция на подпространство I вдоль W совпадает с проекцией на I вектора x. Пусть энтропия (строго выпуклый инвариантный при действии группы функционал) $S(x)$ имеет единственную точку максимума на V_x. Точку, где достигается этот максимум, мы будем называть *экстремалью Больцмана* $\mathrm{Ext}^B(x)$: $\mathrm{Ext}^B_S(x) = \operatorname*{argmax}_{y \in V_x} S(y)$.

Теорема 6.2. *Среднее по группе* $[x]$ *элемента* x *совпадает с экстремалью Больцмана*:
$$[x] = P_I(x) = \mathrm{Ext}^B(x).$$

Доказательство. Заметим, что в силу следствия 6.1 все элементы V_x имеют одно и то же среднее, а значит, в частности, среднее вектора x совпадает со средним для вектора $\mathrm{Ext}^B(x)$: $[x] = [\mathrm{Ext}^B(x)]$. Ясно, что $[x] \in V_x$, а значит, $S(\mathrm{Ext}^B(x)) \geqslant S([x])$. Но в силу теоремы 6.1 $S(\mathrm{Ext}^B(x)) \leqslant S([\mathrm{Ext}^B(x)]) = S([x])$. Значит, имеет место равенство $S(\mathrm{Ext}^B(x)) = S([x])$, и таким образом теорема доказана в силу единственности точки максимума. $\square$

Обобщим результаты на случай компактной группы. Для любой компактной группы существует мера Хаара, инвариантная относительно действия группы (обозначим ее μ). Пусть для компактной группы G задано представление $\rho : G \to Aut(V)$, где V — линейное пространство.

По аналогии с конечной группой определим *энтропию* $S(x), x \in V$ как неубывающий при действии группы G функционал на V.

Лемма 6.4. *Энтропия сохраняется при действии компактной группы G.*

Доказательство аналогично доказательству леммы 6.1.

Введем понятие *среднего* для компактной группы G: $[x] = \dfrac{1}{\mu(G)} \int \rho(g)x\,d\mu = \dfrac{1}{\mu(G)} \int gx\,d\mu$.

Лемма 6.5. *Энтропия существует.*

Доказательство. Если $K(x)$ — произвольный выпуклый функционал, то $S(x) = \dfrac{1}{\mu(G)} \int K(gx)d\mu$ — энтропия: $S(gx) = S(x)$. □

Теорема 6.3 (H-теорема для представлений компактных групп). $S([x]) \geqslant S(x)$.

Доказательство. $S([x]) = S\Big(\dfrac{1}{\mu(G)} \int gxd\mu\Big) \geqslant \dfrac{1}{\mu(G)} \int S(gx)d\mu = \dfrac{1}{\mu(G)} \int S(x)d\mu = S(x)$ в силу выпуклости $S(x)$. □

Построим разложение фон Неймана—Рисса для представления компактной группы G в линейное пространство V. А именно, пусть $I \subset V$ — это пространство всех таких векторов $x \in V$, что $x = gx$ для любого $g \in G$, и пусть W — пространство всех векторов вида $x - gx$ и их пределов, где $x \in V$, $g \in G$, т. е. пространство W — замыкание линейной оболочки векторов вида $x - gx$. Заметим, что в случае конечномерного V подпространство $W = \{x - gx | \ \forall x \in V, \forall g \in G\}$ априори замкнуто.

Теорема 6.4. *Пространство $V = I \oplus W$ есть прямая сумма, и вектор $[x]$ есть проекция вектора $x \in V$ на подпространство I.*

Доказательство. Заметим, что линейная оболочка $\{x - gx\}$ (т. е. само пространство W) инвариантна относительно действия группы G: $h(x - gx) = h(x) - h(g(x)) = h(x) - hg(x) = (x - hg(x)) - (x - h(x))$, где $h, g \in G$.

Вектор $[x]$ лежит в I. Действительно:

$$g_0[x] = g_0 \left(\frac{1}{\mu(G)} \int gxd\mu \right) = \frac{1}{\mu(G)} \int g_0gxd\mu = \frac{1}{\mu(G)} \int gxd\mu = [x].$$

Тогда любой вектор $x \in V$ представим в виде суммы $x = \dfrac{1}{\mu(G)} \int gxd\mu + \dfrac{1}{\mu(G)} \int (x - gx)d\mu$, где вектор $\dfrac{1}{\mu(G)} \int gxd\mu = [x]$ лежит в пространстве I, а вектор $\dfrac{1}{\mu(G)} \int (x - gx)d\mu$ в силу замкнутости линейной оболочки $\{x - gx\}$ лежит в пространстве W. Значит, $W = I \oplus W$. Отсюда получаем, что $[x]$ есть проекция вектора x на пространство I. □

Таким образом, результаты конечного случая могут быть полностью обобщены на случай компактной группы.

Что дает общая конструкция разделов 2–5 данной работы по сравнению с работой [11] для основного вопроса эргодической теории? Под основным вопросом эргодической теории понимаем, к чему сходится решение произвольной системы нелинейных уравнений с течением времени и соответствующего уравнения для плотности — уравнения Лиувилля.

Если в эргодических теоремах фон Неймана, Рисса, Биркгофа и Боголюбова доказывалось существование временных средних, то в [11] доказывается совпадение временных средних с экстремумом энтропии (в случаях Рисса и фон Неймана). Из конструкций этой работы вытекает, что не требуется сопряженных пространств и функционалов, а достаточно проекции Рисса, и это дает возможность упростить и обобщить все четыре эргодические теоремы с единой точки зрения.

Что могут дать двойственные пространства и законы сохранения? Уже из работы [11] следует, что эргодические компоненты (т. е. инвариантные множества исходной динамической системы) суть совместные линии уровня ее интегралов. Но интегралы — из L_2, поэтому линии уровня не существуют, и возникает вопрос о функциональном базисе этих интегралов. Отметим, что если есть инвариантные множества, то это означает наличие кусочно-постоянных интегралов, так что это укладывается в данную схему. Если в этих инвариантных множествах этот базис из непрерывных функций, то мы можем по крайней мере взять совместные линии уровня этих интегралов и проинтегрировать по ним начальное распределение, представив так в явном виде предел при времени, стремящемся к бесконечности (см. [2, формулы (45)-(46)]). Если же этот базис законов сохранения из гладких функций, то по теореме о неявной функции можно получить, что структура эргодических компонент — это многообразие соответствующей гладкости.

Таким образом, возникает классификация динамических систем по гладкости функционального базиса законов сохранения, и эргодическая проблема переходит на другой уровень. Эти законы сохранения могут быть полезны и в методе Гамильтона—Якоби в негамильтоновой ситуации [17, 52]. Именно они должны быть взяты в качестве переменных действия, а переменные углы — как раз дополнительные на их линиях уровня, как показывает та же [2, формула (46)].

Здесь же возникает вопрос, насколько переносятся конструкции из книг В. П. Маслова [34,35], например, канонический оператор, на нелагранжевы многообразия? Возникает вопрос об асимптотике при времени, стремящемся к бесконечности, в квантовом случае и о его соответствии классическому случаю. Что результаты работ [1, 10, 11] и данной работы дают для метода Гиббса? Откуда возникает гиббсова экспонента? Это самая классическая больцмановская экстремаль из работы [7, 45]: именно там Больцман берет экстремум энтропии при условии двух законов сохранения числа частиц и кинетической энергии и получает максвелловское распределение. Но как можно получить эту экспоненту из динамики? Совпадение временных средних с экстремалями Больцмана показывает, что, вообще говоря, невозможно получить по двум причинам: так как и законов сохранения может быть больше, и можно получить при разных начальных условиях любую функцию от энергии. Физики объясняют эту экспоненту взаимодействием с термостатом. Термостат можно представить математической моделью с граничной задачей для этого же уравнения Лиувилля, например с классическим зеркально-диффузным максвелловским законом отражения [10, 35]. Таким образом, если мы связываем гиббсову экспоненту с граничными условиями, физика требует не дифференциального, а интегро-дифференциального уравнения, что тоже укладывается в идеологию теорем данной статьи, поскольку оператор эволюции остается линейным.

Таковы возможные перспективы развития последних двух разделов. Простейшие примеры группы $\mathbb{Z}_2$ показывают, каковы в этой ситуации переменные действия, а каковы углы. Также это дает простейшую иллюстрацию к сохранению энтропии примера Пуанкаре 1906 г. и возрастанию энтропии на бесконечности — т. е. иллюстрацию всех парадоксов необратимости.

7. Заключение

Проблема построения H-функции (т. е. убывающего функционала с доказательством H-теоремы) для квантовых случайных блужданий, для которых не выполняется условие детального баланса [2], остается открытой. В работах А. Пуанкаре [37], В. В. Козлова [27] и Д. В. Трещева [29] рассматривается новая форма H-теоремы. Она справедлива для уравнения Лиувилля и их обобщений [1, 11, 27, 29, 37] (раздел 5 настоящей работы). Понятие экстремали Больцмана там тоже работает [1, 11] (раздел 5 настоящей работы): она совпадает с временным средним (средним по Чезаро, чезаровским средним), и это делает его общематематическим и фундаментальным и как метод поиска стационаров широкого класса уравнений (линейных, типа уравнения Лиувилля, и нелинейных), и как широкое обобщение понятия энтропии. Введение этих представлений в теорию представлений групп (раздел 6 настоящей работы) проясняет и упрощает ситуацию, и ставит новые вопросы.

Представляет интерес обобщение полученных результатов на нелинейные системы с дискретным временем и перенесение условия Штюккельберга—Батищевой—Пирогова [5, 20, 32, 33] на дискретное время.

Другие новые задачи — это обобщение теорем о совпадении временного среднего с экстремалью по Больцману [1, 11] (раздел 5 настоящей работы) на случай уравнения Лиувилля, когда отсутствует инвариантная мера, и на нелинейный случай, а именно, для уравнений Власова.

Развитие метода Гамильтона—Якоби в негамильтоновой ситуации представляется перспективным в нескольких направлениях: изучение связи полученных в разделе 4 уравнений с классом квазилинейных уравнений с одинаковой главной частью, рассмотрение отдельных примеров гамильтоновых и негамильтоновых систем и поиски базиса законов сохранения, построение новых классов уравнений типа химической кинетики, обобщающих рассмотренные в разделах 1–3.

Представляет интерес обобщение результата раздела 4 на бесконечномерный случай. Как для пространств с нормой (банаховых) [9], так и без, со строгими определениями, возможно, в стиле работ [3,23], а также H-теоремы для уравнений физико-химической кинетики (из разделов 2 и 3) на случай уравнений с бесконечным числом реакций. В первом случае суммы просто заменятся на интегралы, а вторая из тем уже начала развиваться в некоторых частных случаях [43,46,47].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Аджиев С. З., Веденяпин В. В.* Временные средние и экстремали Больцмана для марковских цепей, дискретного уравнения Лиувилля и круговой модели Марка Каца// Журн. выч. мат. и мат. физ. — 2011. — *51*, № 11. — С. 2063–2074.
2. *Аджиев С., Веденяпин В.* Энтропия по Больцману и Пуанкаре// Усп. мат. наук. — 2014. — *69*, № 6. — С. 45–80.
3. *Аржаных И. С.* Поле импульсов. — Ташкент: Наука, 1965.
4. *Арнольд В. И.* Математические методы классической механики. — М.: Наука, 1989.
5. *Батищева Я. Г., Веденяпин В. В.* II-й закон термодинамики для химической кинетики// Мат. модел. — 2005. — *17*, № 8. — С. 106–110.
6. *Больцман Л.* Дальнейшие исследования теплового равновесия между молекулами газа// В сб.: «Избранные труды». — М.: Наука, 1984. — С. 125–189.
7. *Больцман Л.* О связи между вторым началом механической теории теплоты и теорией вероятностей в теоремах о тепловом равновесии// В сб.: «Избранные труды». — М.: Наука, 1984. — С. 190–235.
8. *Брюно А. Д.* Ограниченная задача трех тел. — М.: Наука, 1990.
9. *Веденяпин В. В.* Дифференциальные формы в пространствах без нормы. Теорема о единственности H-функции Больцмана// Усп. мат. наук. — 1988. — *43*, № 1. — С. 159–179.
10. *Веденяпин В. В.* Кинетическая теория по Максвеллу, Больцману и Власову. Конспект лекций. — М.: МГОУ, 2005.
11. *Веденяпин В. В.* Временные средние и экстремали по Больцману// Докл. РАН. — 2008. — *422*, № 2. — С. 161–163.
12. *Веденяпин В. В., Мингалев И. В., Мингалев О. В.* О дискретных моделях квантового уравнения Больцмана// Мат. сб. — 1993. — *184*, № 11. — С. 21–38.
13. *Веденяпин В. В., Негматов М. А.* О топологии стационарных решений гидродинамических и вихревых следствий уравнения Власова и метод Гамильтона—Якоби// Докл. РАН. — 2013. — *449*, № 5. — С. 521–526.
14. *Веденяпин В. В., Негматов М. А., Фимин Н. Н.* Уравнения типа Власова и Лиувилля, их макроскопические, энергетические и гидродинамические следствия// Изв. РАН. Сер. Мат. — 2017. — *81*, № 3. — С. 45–82.
15. *Веденяпин В. В., Орлов Ю. Н.* О законах сохранения для полиномиальных гамильтонианов и для дискретных моделей уравнения Больцмана// Теор. мат. физ. — 1999. — *121*, № 2.. — С. 307–315.
16. *Веденяпин В. В., Фимин Н. Н.* Метод Гамильтона—Якоби для негамильтоновых систем// Нелин. динамика. — 2015. — *11*, № 2. — С. 279–286.
17. *Веденяпин В. В., Фимин Н. Н.* Метод Гамильтона—Якоби в негамильтоновой ситуации и гидродинамическая подстановка// Докл. РАН. — 2015. — *461*, № 2. — С. 136–139.
18. *Вершик А. М., Корнфельд И. П., Синай Я. Г.* Общая эргодическая теория групп преобразований с инвариантной мерой. I// Соврем. пробл. мат. Фундам. направл. — 1985. — *2*. — С. 5–111.
19. *Вольперт А. И., Худяев С. И.* Анализ в классах разрывных функций и уравнения математической физики. — М.: Наука, 1975.
20. *Гасников А. В.* (*ред.*) Введение в математическое моделирование транспортных потоков. — М.: МЦНМО, 2013.
21. *Годунов С. К., Султангазин У. М.* О дискретных моделях кинетического уравнения Больцмана// Усп. мат. наук. — 1971. — *26*, № 3. — С. 3–51.
22. *Гуревич Б. М., Темпельман А. А.* О множествах временных и пространственных средних для непрерывных функций на пространстве конфигураций// Усп. мат. наук. — 2003. — *58*, № 2. — С. 161-162.
23. *Долматов К. И.* Поле импульсов аналитической динамики// Дисс. канд. физ.-мат. наук. — Ташкент, 1950.
24. *Карлеман Т.* Математические вопросы теории газов. — М.: ИЛ, 1960.
25. *Козлов В. В.* Гидродинамика гамильтоновых систем// Вестн. Моск. ун-та. Сер. 1. Мат. Мех. — 1983. — *6*. — С. 10–22.
26. *Козлов В. В.* Симметрии, топология и резонансы в гамильтоновой механике. — Ижевск: Изд-во Удмуртского гос. ун-та, 1995.

27. *Козлов В. В.* Тепловое равновесие по Гиббсу и Пуанкаре. — М.—Ижевск: Ин-т комп. иссл., 2002.
28. *Козлов В. В.* Общая теория вихрей. — М.—Ижевск: Ин-т комп. иссл., 2013.
29. *Козлов В. В., Трещев Д. В.* Слабая сходимость решений уравнения Лиувилля для нелинейных гамильтоновых систем// Теор. мат. физ. — 2003. — *134*, № 3. — С. 388–400.
30. *Ландау Л. Д., Лившиц Е. М.* Квантовая механика. Краткий курс теоретической физики. Кн. 2. — М.: Наука, 1972.
31. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Механика. Т. 1. — М.: Наука, 1988.
32. *Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Теоретическая физика. Т. X. Физическая кинетика. — М.: Наука, 1979.
33. *Малышев В. А., Пирогов С. А.* Обратимость и необратимость в стохастической химической кинетике// Усп. мат. наук. — 2008. — *63*, №1. — С. 3–36.
34. *Маслов В. П.* Комплексные марковские цепи и континуальный интеграл Фейнмана (для нелинейных уравнений). — М.: Наука, 1976.
35. *Маслов В. П., Федорюк М. В.* Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики. — М.: Наука, 1976.
36. *Мозер Ю.* Лекции о гамильтоновых системах. — М.: Мир, 1973.
37. *Пуанкаре А.* Замечания о кинетической теории газов// В сб.: «Пуанкаре А. Избранные труды». — М., 1974. — *3*.
38. *Рисс Ф., Секефальви-Надь Б.* Лекции по функциональному анализу. — М.: Мир, 1979.
39. *Санов Н. Н.* О вероятностях больших отклонений случайных величин// Мат. сб. — 1957. — *42*, № 1. — С. 11–44.
40. *Синай Я. Г.* Современные проблемы эргодической теории. — М.: Физматлит, 1995.
41. *Халмош П. Р.* Теория меры. — М.: ИЛ, 1953.
42. *Ченцов Н. Н.* Несимметричное расстояние между распределениями вероятностей, энтропия и теорема Пифагора// Мат. заметки. — 1968. — *4*, № 3. — С. 323–332.
43. *Ball J. M., Carr J.* Asymptotic behavior of solutions to the Becker—Doring equations for arbitrary initial data// Proc. Royal Soc. Edinburgh. — 1988. — *108A*. — С. 109–116.
44. *Boltzmann L.* Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen// Wien. Ber. — 1872. — *66*. — С. 275–370.
45. *Boltzmann L.* Uber die Beziehung zwischen dem zweiten Hauptsatze der Mechanischen Warmetheorie und der Wahrscheinlichkeitsrechnung, respektive den Satzen uber das Warmegleichgewicht// Wien. Ber. — 1878. — *76*. — С. 373–435.
46. *Carr J.* Asymptotic behavior of solutions to the coagulation–fragmentation equations. I. The strong fragmentation case// Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A. — 1992. — *121A*. — С. 231–244.
47. *Carr J., da Costa F. P.* Asymptotic behavior of solutions to the coagulation–fragmentation equations. I. Weak fragmentation// J. Stat. Phys. — 1994. — *77*, № 1/2. — С. 89–123.
48. *Csiszar I.* Eine informationstheoretische Ungleichung und ihre Anwendung auf den Beweis der Ergodizitat von Markoffschen Ketten// Magyar. Tud. Akad. Mat. Kutato Int. Kozl. — 1963. — *8*. — С. 85–108.
49. *Kullback S., Leibler R. A.* On information and sufficiency// Ann. Math. Stat. — 1951. — *22*, № 1. — С. 79–86.
50. *Morimoto T.* Markov processes and the H-theorem// J. Phys. Soc. Jpn. — 1963. — *18*, № 3. — С. 328–331.
51. *Vedenyapin V. V.* Differential forms in spaces without a norm. A theorem on the uniqueness of Boltzmann's H-function// Russ. Math. Surv. — 1988. — *43*, № 1. — С. 193–219.
52. *Vedenyapin V. V., Fimin N. N.* The Hamilton—Jacobi method in the non-Hamiltonian situation and the hydrodynamic substitution// Dokl. Math. — 2015. — *91*, № 2. — С. 154–157.
53. *von Neumann J.* Zur Operatorenmethode in der Klassischen Mechanik// Ann. Math. (2). — 1932. — *33*. — С. 587–642.

Виктор Валентинович Веденяпин
Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН,
125047, г. Москва, Миусская пл., д. 4
E-mail: vicveden@yahoo.com

Сергей Загирович Аджиев
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,
119992, г. Москва, Воробьевы горы
E-mail: sergeyadzhiev@yandex.ru

Владлена Владимировна Казанцева

Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН,
125047, г. Москва, Миусская пл., д. 4
E-mail: vladastar@inbox.ru

DOI: 10.22363/2413-3639-2018-64-1-37-59 UDC 517.958

Entropy in the Sense of Boltzmann and Poincare, Boltzmann Extremals, and the Hamilton–Jacobi Method in Non-Hamiltonian Context

© 2018 **V. V. Vedenyapin, S. Z. Adzhiev, V. V. Kazantseva**

Abstract. In this paper, we prove the H-theorem for generalized chemical kinetics equations. We consider important physical examples of such a generalization: discrete models of quantum kinetic equations (Uehling–Uhlenbeck equations) and a quantum Markov process (quantum random walk). We prove that time averages coincide with Boltzmann extremals for all such equations and for the Liouville equation as well. This gives us an approach for choosing the action–angle variables in the Hamilton–Jacobi method in a non-Hamiltonian context. We propose a simple derivation of the Hamilton–Jacobi equation from the Liouville equations in the finite-dimensional case.

REFERENCES

1. S. Z. Adzhiev and V. V. Vedenyapin, "Vremennye srednie i ekstremali Bol'tsmana dlya markovskikh tsepey, diskretnogo uravneniya Liuvillya i krugovoy modeli Marka Katsa" [Time averages and Boltzmann extremals for Markov chains, discrete Liouville equation, and the Kac circular model], *Zhurn. vych. mat. i mat. fiz.* [J. Comput. Math. Math. Phys.], 2011, **51**, No. 11, 2063–2074 (in Russian).
2. S. Adzhiev and V. Vedenyapin, "Entropiya po Bol'tsmanu i Puankare" [Entropy in the sense of Boltzmann and Poincare], *Usp. mat. nauk* [Progr. Math. Sci.], 2014, **69**, No. 6, 45–80 (in Russian).
3. I. S. Arzhanykh, *Pole impul'sov* [Field of Impulses], Nauka, Tashkent, 1965 (in Russian).
4. V. I. Arnol'd, *Matematicheskie metody klassicheskoy mekhaniki* [Mathematical Methods of Classical Mechanics], Nauka, Moscow, 1989 (in Russian).
5. Ya. G. Batishcheva and V. V. Vedenyapin, "II-y zakon termodinamiki dlya khimicheskoy kinetiki" [The 2nd law of thermodynamics for chemical kinetics], *Mat. model.* [Math. Model.], 2005, **17**, No. 8, 106–110 (in Russian).
6. L. Bol'tsman, "Dal'neyshie issledovaniya teplovogo ravnovesiya mezhdu molekulami gaza" [Further investigation of thermal equilibrium between molecules of gas], In: *Izbrannye trudy* [Selected Works], Nauka, Moscow, 1984, pp. 125–189 (in Russian).
7. L. Bol'tsman, "O svyazi mezhdu vtorym nachalom mekhanicheskoy teorii teploty i teoriey veroyatnostey v teoremakh o teplovom ravnovesii" [On the relation between the second law of mechanical theory of heat and the probability theory in theorems on thermal equilibrium], In: *Izbrannye trudy* [Selected Works], Nauka, Moscow, 1984, pp. 190–235 (in Russian).
8. A. D. Bryuno, *Ogranichennaya zadacha trekh tel* [The Limited Three-Body Problem], Nauka, Moscow, 1990 (in Russian).
9. V. V. Vedenyapin, "Differentsial'nye formy v prostranstvakh bez normy. Teorema o edinstvennosti H-funktsii Bol'tsmana" [Differential forms in spaces without a norm. A theorem on the uniqueness of Boltzmann's H-function], *Usp. mat. nauk* [Progr. Math. Sci.], 1988, **43**, No. 1, 159–179 (in Russian).
10. V. V. Vedenyapin, *Kineticheskaya teoriya po Maksvellu, Bol'tsmanu i Vlasovu. Konspekt lektsiy* [Kinetic Theory in the Sense of Maxwell, Boltzmann, and Vlasov. Lecture Notes], MGOU, Moscow, 2005 (in Russian).
11. V. V. Vedenyapin, "Vremennye srednie i ekstremali po Bol'tsmanu" [Time averages and Boltzmann extremals], *Dokl. RAN* [Rep. Russ. Acad. Sci.], 2008, **422**, No. 2, 161–163 (in Russian).
12. V. V. Vedenyapin, I. V. Mingalev, and O. V. Mingalev, "O diskretnykh modelyakh kvantovogo uravneniya Bol'tsmana" [On discrete models of the quantum Boltzmann equation], *Mat. sb.* [Math. Digest], 1993, **184**, No. 11, 21–38 (in Russian).

13. V. V. Vedenyapin and M. A. Negmatov, “O topologii statsionarnykh resheniy gidrodinamicheskikh i vikhrevykh sledstviy uravneniya Vlasova i metod Gamil’tona—Yakobi” [On topology of stationary solutions of hydrodynamics and vortex consequences of the Vlasov equation and the Hamilton–Jacobi method], *Dokl. RAN* [Rep. Russ. Acad. Sci.], 2013, **449**, No. 5, 521–526 (in Russian).
14. V. V. Vedenyapin, M. A. Negmatov, and N. N. Fimin, “Uravneniya tipa Vlasova i Liuvillya, ikh makroskopicheskie, energeticheskie i gidrodinamicheskie sledstviya” [Vlasov and Liouville-type equations and their macroscopic, energetic, and hydrodynamics consequences], *Izv. RAN. Ser. Mat.* [Bull. Russ. Acad. Sci. Ser. Math.], 2017, **81**, No. 3, 45–82 (in Russian).
15. V. V. Vedenyapin and Yu. N. Orlov, “O zakonakh sokhraneniya dlya polinomial’nykh gamil’tonianov i dlya diskretnykh modeley uravneniya Bol’tsmana” [Conservation laws for polynomial Hamiltonians and for discrete models of the Boltzmann equation], *Teor. mat. fiz.* [Theor. Math. Phys.], 1999, **121**, No. 2., 307–315 (in Russian).
16. V. V. Vedenyapin and N. N. Fimin, “Metod Gamil’tona—Yakobi dlya negamil’tonovykh sistem” [The Hamilton–Jacobi method for non-Hamiltonian systems], *Nelin. dinamika* [Nonlinear Dynamics], 2015, **11**, No. 2, 279–286 (in Russian).
17. V. V. Vedenyapin and N. N. Fimin, “Metod Gamil’tona—Yakobi v negamil’tonovoy situatsii i gidrodinamicheskaya podstanovka” [The Hamilton–Jacobi method in non-Hamiltonian context and the hydrodynamical substitution], *Dokl. RAN* [Rep. Russ. Acad. Sci.], 2015, **461**, No. 2, 136–139 (in Russian).
18. A. M. Vershik, I. P. Kornfel’d, and Ya. G. Sinai, “Obshchaya ergodicheskaya teoriya grupp preobrazovaniy s invariantnoy meroy. I” [General ergodic theory of groups of transformations with invariant measure, I], *Sovrem. probl. mat. Fundam. napravl.* [Contemp. Probl. Math. Fundam. Directions], 1985, **2**, 5–111 (in Russian).
19. A. I. Vol’pert and S. I. Khudyaev, *Analiz v klassakh razryvnykh funktsiy i uravneniya matematicheskoy fiziki* [Analysis in classes of discontinuous functions and equations of mathematical physics], Nauka, Moscow, 1975 (in Russian).
20. A. V. Gasnikov (ed.), *Vvedenie v matematicheskoe modelirovanie transportnykh potokov* [Introduction to Mathematical Modelling of Transport Flows], MTSNMO, Moscow, 2013 (in Russian).
21. S. K. Godunov and U. M. Sultangazin, “O diskretnykh modelyakh kineticheskogo uravneniya Bol’tsmana” [On discrete models of the kinetic Boltzmann equation], *Usp. mat. nauk* [Progr. Math. Sci.], 1971, **26**, No. 3, 3–51 (in Russian).
22. B. M. Gurevich and A. A. Tempel’man, “O mnozhestvakh vremennykh i prostranstvennykh srednikh dlya nepreryvnykh funktsiy na prostranstve konfiguratsiy” [On sets of time and spatial averages for continuous functions on the space of configurations], *Usp. mat. nauk* [Progr. Math. Sci.], 2003, **58**, No. 2, 161-162 (in Russian).
23. K. I. Dolmatov, *Pole impul’sov analiticheskoy dinamiki* [Field of Impulses of Analytical Dynamics], PhD Thesis, Tashkent, 1950 (in Russian).
24. T. Carleman, *Matematicheskie voprosy teorii gazov* [Mathematical Problems of the Kinetic Theory of Gas], IL, M., 1960 (Russian translation).
25. V. V. Kozlov, “Gidrodinamika gamil’tonovykh sistem” [Hydrodynamics of Hamiltonian systems], *Vestn. Mosk. un-ta. Ser. 1. Mat. Mekh.* [Bull. Moscow Univ. Ser. 1. Math. Mech.], 1983, **6**, 10–22 (in Russian).
26. V. V. Kozlov, *Simmetrii, topologiya i rezonansy v gamil’tonovoy mekhanike* [Symmetries, Topology, and Resonances in Hamiltonian Mechanics], Izd-vo Udmurtskogo gos. un-ta, Izhevsk, 1995 (in Russian).
27. V. V. Kozlov, *Teplovoe ravnovesie po Gibbsu i Puankare* [Thermal Equilibrium in the Sense of Gibbs and Poincare], In-t komp. issl., M.—Izhevsk, 2002 (in Russian).
28. V. V. Kozlov, *Obshchaya teoriya vikhrey* [General Theory of Vortexes], In-t komp. issl., M.—Izhevsk, 2013 (in Russian).
29. V. V. Kozlov and D. V. Treshchev, “Slabaya skhodimost’ resheniy uravneniya Liuvillya dlya nelineynykh gamil’tonovykh sistem” [Weak convergence of solutions of the Liouville equation for nonlinear Hamiltonian systems], *Teor. mat. fiz.* [Theor. Math. Phys.], 2003, **134**, No. 3, 388–400 (in Russian).
30. L. D. Landau and E. M. Livshits, *Kvantovaya mekhanika. Kratkiy kurs teoreticheskoy fiziki. Kn. 2* [Quantum Mechanics. Brief Course in Theoretical Physics. Book 2], Nauka, Moscow, 1972 (in Russian).
31. L. D. Landau and E. M. Lifshits, *Mekhanika. T. 1* [Mechanics. V. 1], Nauka, Moscow, 1988 (in Russian).
32. E. M. Lifshits and L. P. Pitaevskiy, *Teoreticheskaya fizika. T. X. Fizicheskaya kinetika* [Theoretical Physics. V. 10. Physical Kinetics], Nauka, Moscow, 1979 (in Russian).
33. V. A. Malyshev and S. A. Pirogov, “Obratimost’ i neobratimost’ v stokhasticheskoy khimicheskoy kinetike” [Reversibility and irreversibility in stochastic chemical kinetics], *Usp. mat. nauk* [Progr. Math. Sci.], 2008, **63**, No. 1, 3–36 (in Russian).

34. V. P. Maslov, *Kompleksnye markovskie tsepi i kontinual'nyy integral Feynmana* (*dlya nelineynykh uravneniy*) [Complex Markov Chains and Feynman Path Integral (for Nonlinear Equations)], Nauka, Moscow, 1976 (in Russian).
35. V. P. Maslov and M. V. Fedoryuk, *Kvaziklassicheskoe priblizhenie dlya uravneniy kvantovoy mekhaniki* [Quasiclassical Approximation for Equations of Quantum Mechanics], Nauka, Moscow, 1976 (in Russian).
36. J. Moser, *Lektsii o gamil'tonovykh sistemakh* [Lecture Notes on Hamiltonian Systems], Mir, Moscow, 1973 (Russian translation).
37. A. Puankare, "Zamechaniya o kineticheskoy teorii gazov" [Notes on the kinetic theory of gases] In: *Puankare A. Izbrannye trudy* [Poincare A. Selected Works], **3**, M., 1974.
38. F. Riesz and B. Sz.-Nagy, *Lektsii po funktsional'nomu analizu* [Functional Analysis], Mir, Moscow, 1979 (Russian translation).
39. N. N. Sanov, "O veroyatnostyakh bol'shikh otkloneniy sluchaynykh velichin" [On probabilities of large deviations of random values], *Mat. sb.* [Math. Digest], 1957, **42**, No. 1, 11–44 (in Russian).
40. Ya. G. Sinai, *Sovremennye problemy ergodicheskoy teorii* [Contemporary Problems of Ergodic Theory], Fizmatlit, Moscow, 1995 (in Russian).
41. P. R. Halmos, *Teoriya mery* [Measure Theory], IL, Moscow, 1953 (Russian translation).
42. N. N. Chentsov, "Nesimmetrichnoe rasstoyanie mezhdu raspredeleniyami veroyatnostey, entropiya i teorema Pifagora" [Nonsymmetric distance between probability distributions, entropy, and Pythagorean theorem], *Mat. zametki* [Math. Notes], 1968, **4**, No. 3, 323–332 (in Russian).
43. J. M. Ball and J. Carr, "Asymptotic behavior of solutions to the Becker—Doring equations for arbitrary initial data," *Proc. Royal Soc. Edinburgh*, 1988, **108A**, 109–116.
44. L. Boltzmann, "Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen," *Wien. Ber.*, 1872, **66**, 275–370.
45. L. Boltzmann, "Uber die Beziehung zwischen dem zweiten Hauptsatze der Mechanischen Warmetheorie und der Wahrscheinlichkeitsrechnung, respektive den Satzen uber das Warmegleichgewicht," *Wien. Ber.*, 1878, **76**, 373–435.
46. J. Carr, "Asymptotic behavior of solutions to the coagulation–fragmentation equations. I. The strong fragmentation case," *Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A*, 1992, **121A**, 231–244.
47. J. Carr and F. P. da Costa, "Asymptotic behavior of solutions to the coagulation–fragmentation equations. I. Weak fragmentation," *J. Stat. Phys.*, 1994, **77**, No. 1/2, 89–123.
48. I. Csiszar, "Eine informationstheoretische Ungleichung und ihre Anwendung auf den Beweis der Ergodizitat von Markoffschen Ketten," *Magyar. Tud. Akad. Mat. Kutato Int. Kozl.*, 1963, **8**, 85–108.
49. S. Kullback and R. A. Leibler, "On information and sufficiency," *Ann. Math. Stat.*, 1951, **22**, No. 1, 79–86.
50. T. Morimoto, "Markov processes and the H-theorem," *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1963, **18**, No. 3, 328–331.
51. V. V. Vedenyapin, "Differential forms in spaces without a norm. A theorem on the uniqueness of Boltzmann's H-function," *Russ. Math. Surv.*, 1988, **43**, No. 1, 193–219.
52. V. V. Vedenyapin and N. N. Fimin, "The Hamilton—Jacobi method in the non-Hamiltonian situation and the hydrodynamic substitution," *Dokl. Math.*, 2015, **91**, No. 2, 154–157.
53. J. von Neumann, "Zur Operatorenmethode in der Klassischen Mechanik," *Ann. Math. (2)*, 1932, **33**, 587–642.

Victor V. Vedenyapin
Keldysh Institute of Applied Mathematics of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia
E-mail: vicveden@yahoo.com

Sergey Z. Adzhiev
Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
E-mail: sergeyadzhiev@yandex.ru

Vladlena V. Kazantseva
Keldysh Institute of Applied Mathematics of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia
E-mail: vladastar@inbox.ru