ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2013, том 452, № 1, с. 17–20

МАТЕМАТИКА

УДК 519.248.23

РОЛЬ ПАМЯТИ В СХОДИМОСТИ К ИНВАРИАНТНОЙ МЕРЕ ГИББСА

© 2013 г. А. А. Лыков, В. А. Малышев

Представлено академиком В.В. Козловым 15.02.2013 г.

Поступило 20.02.2013 г.

DOI: 10.7868/S086956521320005X

Линейные гамильтоновы системы всегда были интересным объектом для изучения (см., например, [1, 2]), в том числе и в неравновесной статистической механике (см. [3, 4] и другие ссылки там). Для замкнутых линейных систем говорить о сходимости к инвариантной мере Гиббса бессмысленно – инвариантные торы дают множество инвариантных мер, не имеющих ничего общего с мерой Гиббса. Однако если даже только одна степень свободы (из N возможных) находится в непосредственном контакте с внешним миром (подвергается внешнему случайному воздействию), ситуация радикально меняется. Инвариантные подпространства и торы перемешиваются динамикой и сходимость к единственной (инвариантной) мере становится типичным свойством. Эта инвариантная мера будет мерой Гиббса, если внешняя сила является белым шумом (который не имеет памяти во времени). Если же внешняя сила имеет корреляции во времени, то будет сходимость к некоторой мере, которая в типичном случае не будет мерой Гиббса. Последнее верно как для систем с конечным числом степеней свободы, так и (в термодинамическом пределе) для степеней свободы, так и (в термодинамическом пределе) для степеней свободы, расположенных (бесконечно) далеко от места контакта с внешним миром. Переходим теперь к точным формулировкам.

Определения. Рассмотрим фазовое пространство с N степенями свободы

$$L = L_{2N} = \mathbb{R}^{2N} =$$

$$= \left\{\psi = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} : q = (q_1, q_2, \ldots, q_N)^{\mathrm{T}},\right.$$

$$\left. p = (p_1, p_2, \ldots, p_N)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^N\right\},$$

(Т – транспозиция; таким образом, ψ – вектор-столбец) со скалярным произведением $(\psi, \psi')_2 = \sum_{i=1}^{N}(q_iq_i' + p_ip_i')$. Оно разлагается в прямую сумму

$$L = l_N^{(q)} \oplus l_N^{(p)} \qquad (1)$$

ортогональных подпространств координат и импульсов с индуцированными скалярными произведениями $(q, q')_2$ и $(p, p')_2$ соответственно. Мы выделяем $1 \le m \le N$ степеней свободы

$$\Lambda_m = \{N - m + 1, \ldots, N\} \subset \Lambda = (1, 2, \ldots, N),$$

$$m \ge 1,$$

и рассматриваем динамику, определяемую системой $2N$ стохастических дифференциальных уравнений

$$\frac{dq_k}{dt} = p_k,$$

$$\frac{dp_k}{dt} = -\sum_{l=1}^{N} V(k, l)q_l - \alpha\delta_k^{(m)}p_k + F_{t, N+k}, \qquad (2)$$

где $k = 1, 2, \ldots, N$, $V = (V(k, l))$ – положительно определенная $(N \times N)$-матрица, $\delta_k^{(m)} = 1$ при $k > N - m$ и $\delta_k^{(m)} = 0$ при $k \le N - m$. Это означает, что только степени свободы из выделенного множества $\Lambda^{(m)}$ (мы будем называть это множество границей Λ) подвергаются диссипации (определяемой множителем $\alpha > 0$) и внешним силам. Удобно ввести $2N$-вектор F_t так, что его компоненты $F_{t,k} = 0$, $k \le 2N - m$, а для $k > 2N - m$ процессы $F_{t,k}$ являются независимыми копиями некоторого гауссовского стационарного процесса f_t.

Если $\alpha = 0$, $f_t = 0$, то система (2) будет линейной гамильтоновой системой с квадратичным гамильтонианом

$$H(\psi) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} p_i^2 + \frac{1}{2}\sum_{i,j} V(i,j)q_iq_j. \qquad (3)$$

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Заметим, что распределение Гиббса, соответствующее гамильтониану (3),

$$Z^{-1}\exp(-\beta H) = Z^{-1}\exp\left(-\frac{1}{2}(C_{G,\beta}^{-1}\psi, \psi)_2\right) \quad (4)$$

будет гауссовым вектором, а его ковариация в (2×2)-блочной форме, соответствующей разложению (1), имеет вид

$$C_{G,\beta} = \beta^{-1}\begin{pmatrix} V^{-1} & 0 \\ 0 & E \end{pmatrix}. \quad (5)$$

В векторной форме система (2) имеет вид

$$\frac{d\psi}{dt} = A\psi + F_t, \quad A = \begin{pmatrix} 0 & E \\ -V & -\alpha D \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где E – единичная $(N\times N)$-матрица, D – диагональная $(N\times N)$-матрица с $D_{k,k} = 1$, $k = N - m + 1, \ldots, N$ и $D_{kk} = 0$, $k \le N - m$.

Инвариантные подпространства. Определим подмножество фазового пространства L

$$L_- = \{\psi \in L: H(e^{tA}\psi) \to 0, \quad t\to\infty\} \subset L.$$

Обозначим e_i N-вектор-столбцы со всеми нулевыми компонентами, кроме i-й, равной единице.

Лемма 1. 1. *L_- является линейным подпространством L и $L_- = \left\{\begin{pmatrix} q \\ p\end{pmatrix} \in L: q\in l_V, p \in l_V\right\}$, где l_V – подпространство R^N, порожденное векторами $V^k e_i$, $i = N - m + 1, \ldots, N$; $k = 0, 1, \ldots$ Кроме того, L_- и его ортогональное дополнение L_0 инвариантны относительно оператора A.*

2. *Спектр ограничения A_- оператора A на подпространство L_- принадлежит левой полуплоскости, и $\|e^{tA_-}\|_2 \to 0$ при $t\to\infty$ экспоненциально быстро.*

Классы гамильтонианов. Для любого N определим $\mathbf{H}_N$ как класс всех гамильтонианов вида (3) с положительно определенной матрицей V. Размерность этого множества $\dim\mathbf{H}_N = \frac{N(N+1)}{2}$, что совпадает с размерностью множества симметрических матриц V. Действительно, возьмем некоторую положительно определенную матрицу V, например диагональную. Тогда матрица $V + V_1$, где V_1 симметрична и имеет достаточно малые элементы, будет положительно определенной.

В более общем виде, пусть $\Gamma = \Gamma_N$ – связный (ненаправленный) граф с N вершинами, $i = 1, 2, \ldots, N$, причем каждую пару вершин (i, j) соединяет не более одного ребра, и предполагается, что все пары (i, i) являются ребрами Γ. Пусть $\mathbf{H}_\Gamma$ – множество положительно определенных V, таких что $V(i, j) = 0$, если (i, j) не является ребром Γ. Такой же аргумент показывает, что размерность множества $\mathbf{H}_\Gamma$ равна числу ребер графа Γ. Заметим, что $\mathbf{H}_N = \mathbf{H}_\Gamma$ в случае полного графа Γ с N вершинами. В частности, можно рассматривать граф $\Gamma = \Gamma(d, \Lambda)$ с множеством вершин – кубом d-мерной решетки

$$\Lambda = \Lambda^{(M)} = \{(x_1, x_2, \ldots, x_d) \in Z^d: |x_i| \le M,$$
$$i = 1, 2, \ldots, d\} \subset Z^d,$$

и ребрами (i, j), $|i - j| \le 1$.

Будем говорить, что некоторое свойство имеет место почти для всех гамильтонианов из $\mathbf{H}_\Gamma$, если множество $\mathbf{H}_\Gamma^{(+)}$, где это свойство выполняется, открыто и всюду плотно.

Лемма 2. *Для всех Γ, определенных выше, и почти всех $\mathbf{H} \in \mathbf{H}_\Gamma$ будет* $\dim L_0 = 0$.

Внешние силы. Внешняя сила f_t предполагается стационарным гауссовым процессом с нулевым средним. Среди них есть процесс без памяти – гауссовский обобщенный процесс с независимыми значениями – белый шум с ковариацией $C_f(s) = \sigma^2\delta(s)$. Другие процессы, которые мы будем здесь рассматривать – процессы с памятью – стационарные гауссовские процессы с нулевым средним и ковариацией $C_f(s) = \langle f_t f_{t+s}\rangle$. Мы будем предполагать, что они имеют непрерывные траектории и интегрируемую ковариацию. Для всех этих процессов известно, что решение системы (6) с произвольным начальным вектором $\psi(0)$ существует на всем промежутке времени, единственно и равно

$$\psi(t) = e^{tA}\left(\int_0^t e^{-sA}F_s ds + \psi(0)\right). \quad (7)$$

Для завершенности результатов иногда мы предполагаем, что C_f принадлежит пространству Шварца S. Тогда и спектральная плотность процесса

$$a(\lambda) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-it\lambda}C_f(t)dt$$

принадлежит пространству S.

Мы будем говорить, что некоторое свойство выполняется почти для всех C_f из класса S, если множество $S^{(+)}$, где оно выполняется, является открытым и всюду плотным подмножеством пространства Шварца.

Конечные системы. Используя (5), положим $C_G = C_{G,2\alpha}$. Фиксируем связный граф Γ с $N > 1$ вершинами.

Теорема 1. *Пусть f_t либо белый шум, либо имеет непрерывные траектории и интегрируемую ковариацию. Тогда для почти всех гамильтонианов $H \in \mathbf{H}_\Gamma$ имеет место:*

1) *существует случайный гауссовский $(2N)$-вектор с нулевым средним $\psi(\infty)$, такой что для любых*

начальных условий $\psi(0)$ *распределение* $\psi(t)$ *сходится при* $t \to \infty$ *к распределению* $\psi(\infty)$;

2) *более того, для самого процесса* $\psi(t)$ *имеет место*

$$C_{\psi(\infty)}(s) = \lim_{t \to \infty} C_{\psi}(t, t+s) =$$

$$= \lim_{t \to \infty} \langle \psi(t)\psi^{\mathrm{T}}(t+s)\rangle = W(s)C_G + C_G W(-s)^{\mathrm{T}}, \quad (8)$$

где

$$W(s) = \int_0^{+\infty} e^{\tau A} C_f(\tau + s) d\tau. \quad (9)$$

С л е д с т в и е 1. *Если* f_t – *белый шум с дисперсией* σ^2, *то вектор* $\psi(\infty)$ *имеет распределение Гиббса* (4) *с температурой*

$$\beta^{-1} = \frac{\sigma^2}{2\alpha}.$$

Последний результат для $m = 1$ был доказан в [6]. Из (8) следует и другое полезное выражение

$$C_{\psi} = -\int_{-\infty}^{+\infty} a(\lambda)(R_A(i\lambda)C_G + C_G R_A^{\mathrm{T}}(i\lambda))d\lambda$$

для $C_\psi = C_{\psi(\infty)}(0)$ в терминах спектральной плотности $a(\lambda)$ и резольвенты A

$$R_A(z) = (A - z)^{-1}.$$

Т е о р е м а 2. *Пусть* $N \geq 2$ *и фиксируем граф* Γ *и некоторый* $H \in \mathbf{H}_\Gamma$ *с* $L_0 = \{0\}$. *Тогда имеют место следующие утверждения*:

1) *для любого* $C_f \in S$ *в предельном распределении нет корреляций между координатами и скоростями, т.е.* $C_\psi(q_i, p_j) = 0$ *для любых* i, j;

2) *для почти всех* $C_f \in S$ *существуют ненулевые корреляции между скоростями, т.е.* $C_\psi(p_i, p_j) \neq 0$ *для некоторых* $i \neq j$. *Поэтому предельное распределение не будет гиббсовским.*

Б о л ь ш и е N. Более интересно доказать, что сходимость к гиббсовской мере невозможна даже в точках бесконечно далеко от границы в термодинамическом пределе $N \to \infty$. Следующий результат сводит (для больших N) вычисление матрицы C_ψ к вычислению более простой матрицы

$$C_V = \frac{\pi}{\alpha}\begin{pmatrix} a(\sqrt{V})V^{-1} & 0 \\ 0 & a(\sqrt{V}) \end{pmatrix},$$

где $\sqrt{V}$ – единственный положительный корень из V. Интересно отметить, что C_V также является инвариантной мерой по отношению к чистой (т.е. при $\alpha = 0$, $F_t = 0$) гамильтоновой динамике, а в случае белого шума соответствует мере Гиббса.

Пусть задан некоторый связный граф Γ с множеством вершин Λ, $|\Lambda| = N$, и границей $\Lambda^{(m)}$. Расстоянием $r(i, j)$ между вершинами i и j на графе назовем наименьшую длину (число ребер) путей между ними. Далее мы предполагаем V γ-локальным на Γ, т.е. $V(i, j)$ равно нулю, если $r(i, j) > \gamma$. Пусть $\eta \geq \ln m$.

Т е о р е м а 3. *Для почти всех* $H \in \mathbf{H}_\Gamma$ *предельная матрица ковариаций допускает разложение*

$$C_\psi = C_V + Y_V,$$

где Y_V – *остаточный член, малый в следующем смысле: если* V *является* γ-*локальным и таким, что* $\|V\|_\infty = \max_i \sum_j |V(i,j)| \leq B$ *для некоторого* $B > 0$, *и если* $C_f(t)$ *имеет ограниченный носитель, т.е.* $C_f(t) = 0$ *при* $|t| > b$, *то для любой пары* i, j, *далекой от границы, т.е. на расстоянии* $r(i, \Lambda^{(m)})$, $r(j, \Lambda^{(m)}) > \eta(N)$, *имеет место оценка*

$$|Y_V(q_i, q_j)|, |Y_V(p_i, p_j)| < K_0\left(\frac{K}{\eta}\right)^{\eta\gamma^{-1}}$$

для некоторых констант $K_0 = K(b, B, \alpha, \gamma)$, $K = K(b, B, \alpha, \gamma)$, *не зависящих от* N. *Для произвольного же* $C_f \in S$ *оценка имеет вид*

$$|Y_V(q_i, q_j)|, |Y_V(p_i, p_j)| < C(k)\eta^{-k}$$

для всех $k > 0$ *и некоторых констант* $\|V^{-1}\|_\infty C(k) = C(k, b, B, \alpha, \gamma)$.

Из этой теоремы можно извлекать разные следствия относительно термодинамического предела. Например, фиксируем $a(\lambda) \in S$, а также некоторый связный граф Γ_∞ с множеством вершин Λ_∞, и рассмотрим возрастающую последовательность $\Gamma_1 \subset \Gamma_2 \subset \ldots \subset \Gamma_n \subset \ldots$ подграфов, таких что $\Gamma = \cup\Gamma_n$. Пусть Λ_n – множество вершин Γ_n (мы считаем, что подграф с заданным множеством вершин наследует все ребра графа Γ между этими вершинами), $N_n = |\Lambda_n|$ и предположим, что заданы также границы $\Lambda_n^{(m)}$, причем $m = m(n) = o(N_n)$. Фиксируем также некоторый γ-локальный положительно определенный оператор V с $\|V\|_\infty \leq B$. Обозначим через V_n ограничение V на Λ_n. Заметим, что условие $L_0(V_n) = \{0\}$ может не выполняться.

Однако существует последовательность положительно определенных операторов V_n', таких что $L_0 = L_0(V_n') = \{0\}$ для всех n и $\|V_n - V_n'\|_\infty \to 0$ при $n \to \infty$. Обозначим через $C_\psi^{(n)}$ предельную матрицу ковариаций для V_n'.

Теорема 4. *Если для всех* i, $j \in \Gamma_\infty$ *существует предел* $\lim_{n\to\infty} V_n^{-1}(i,j) = V^{-1}(i, j)$ *и* $\|V^{-1}\|_\infty < \infty$, *то термодинамический предел* $C_\psi^{(\infty)} = \lim_{n\to\infty} C_\psi^{(n)}$ *существует, но не является гиббсовским. Точнее,* $C_\psi^{(\infty)}(p_i, p_j) \neq 0$ *для любых двух вершин* $i \neq j$ *в* Λ_∞, *таких что* $a(\sqrt{V})(i,j) \neq 0$ *и таких что, начиная с некоторого* n, *имеет место* $r(i, \Lambda_n^{(m(n))})$, $r(j, \Lambda_n^{(m(n))}) \geq \ln m(n)$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Williamson J.* // Amer. J. Math. 1936. V. 58. № 1. P. 141–163.
2. *Козлов В.В.* // ДАН. 2003. Т. 393. № 4. С. 453–455.
3. *Rieder Z., Lebowitz J., Lieb E.* // J. Math. Phys. 1967. V. 8. № 5. P. 1073–1078.
4. *Spohn H., Lebowitz J.* // Communs Math. Phys. 1977. V. 54. P. 97–120.
5. *Lykov A.A., Malyshev V.A.* // Markov Processes and Related Fields. 2012. V. 18. № 4. P. 721–729.
6. *Лыков А.А., Малышев В.А.* // Теория вероятностей и ее применения. 2012. Т. 57. В. 4. С. 794–799.