ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2005, том 401, № 6, с. 744–748

МАТЕМАТИКА

УДК 517.9

ГРАДИЕНТНЫЕ СИСТЕМЫ

© 2005 г. А. М. Молчанов, Д. А. Молчанова

Представлено академиком Т.М. Энеевым 30.06.2004 г.

Поступило 10.08.2004 г.

Рассмотрим в пространстве векторов $x = (x_1, x_2, \ldots, x_N)$ произвольную скалярную функцию $h = h(x)$ (гамильтониан) и произвольную матрицу $M = (M_{ki})$ с постоянными коэффициентами. Система уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = M\left(\frac{dh}{dx_i}\right)^* \tag{1}$$

называется градиентной системой. Похожие системы впервые рассмотрены в работе А.М. Обухова [2] в предположении, что матрица M невырождена. Они названы А.М. Обуховым симметризуемыми. Звездочка, превращающая строку в столбец, необходима для "выравнивания тензорной размерности" левой и правой частей системы уравнений. В частном случае матрицы M, такой, что $M^2 = -E$ (при четной размерности $\dim x = 2s$ фазового пространства), возникает собственно гамильтонова система.

ПАРНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Пусть уравнения движения макросистемы, состоящей из большого числа $N^2 \gg 1$ одинаковых компонент x_i задаются гамильтонианом H и матрицей M:

$$H = H(x_1, x_2, \ldots, x_N), \quad \frac{dx_i}{dt} = M\left(\frac{\partial H}{\partial x_i}\right)^*. \tag{2}$$

Обычно рассматривается парное взаимодействие,

$$H = \sum_{i=1}^{N}\sum_{l=1}^{N} H(x_i, x_l),$$

когда гамильтониан H – это сумма N^2 гамильтонианов $H = H(x,y)$, задающих взаимодействие двух компонент x и y. Слагаемые отличаются одно от другого только номерами аргументов.

СУММАРНЫЕ ФУНКЦИИ ХИНЧИНА

Последовательное изучение свойств сумматорных функций в статистических вопросах восходит к работе Хинчина [1] и связано с обобщением на функции закона больших чисел, хотя роль симметрических функций известна еще из алгебры – формулы Ф. Виета (около 1590 г.). В нашей задаче сумматорные функции возникают сами собой, как следствие применения метода Фурье разложения функций в ряд по базису.

Рассмотрим произвольный базис $\{z_\alpha(x)\}$ в пространстве функций одной переменной x и разложим гамильтониан взаимодействия $H(x, y)$ по соответствующему базису $\{z_\alpha(x)z_\beta(y)\}$ в пространстве функций двух переменных:

$$H(x, y) = \sum_{\alpha\beta} H^{\alpha\beta} z_\alpha(x) z_\beta(y). \tag{3}$$

Подставляя найденное выражение в гамильтониан системы, получаем

$$H = \sum_{\alpha\beta} H^{\alpha\beta}\left[\sum_l z_\alpha(x_l)\right]\left[\sum_l z_\beta(x_l)\right]. \tag{4}$$

Сумматорные функции $Z_\alpha = \sum_{i=l}^{N} z_\alpha(x_i)$ возникают, таким образом, автоматически, при изменении порядка суммирования. Выражая гамильтониан H через новые переменные Z_α,

$$H = \sum_{\alpha\beta} H^{\alpha\beta} Z_\alpha Z_\beta, \tag{5}$$

приходим к важному выводу: гамильтониан есть квадратичная функция макровеличин Z_α (эта квадратичность есть следствие парности взаимодействия). Отметим также, что коэффициенты квадратичной формы H совпадают с коэффициентами Фурье $H^{\alpha\beta}$ разложения гамильтониана взаимодействия $H(x, y)$ по базису $\{z_\alpha(x)z_\beta(y)\}$.

Институт математических проблем биологии Российской Академии наук, Пущино Московской обл.

МАКРОДИНАМИКА

Запись гамильтониана системы H в переменных Z $H = H(Z)$ позволяет упростить уравнения движения

$$\frac{dx_i}{dt} = \sum_{\beta} \frac{\partial H}{\partial Z_\beta} M \frac{\partial z_\beta}{\partial x_i}. \quad (6)$$

Правые части полученных уравнений содержат как скалярные (макро) величины

$$L^\beta = \frac{\partial H}{\partial Z_\beta}, \quad (7)$$

так и векторные (микро) поля

$$a_\beta(x) = M\left(\frac{\partial z_\beta}{\partial x}\right)^*. \quad (8)$$

В этих обозначениях более четко видна структура уравнений движения

$$\frac{dx_i}{dt} = \sum_{\beta} L^\beta a_\beta(x_i),$$

подсказывающая идею выделения макродинамики (эволюции Z_β) из огромного множества ($N \gg 1$) микродвижений x_i.

Дифференцируя по времени соотношение, определяющее величину Z_α,

$$\frac{dZ_\alpha}{dt} = \sum_i \frac{\partial z_\alpha}{\partial x_i} \frac{dx_i}{dt}, \quad (9)$$

и подставляя значения производных x_i, получаем

$$a_\beta(x_i) = M\left(\frac{\partial z_\beta}{\partial x_i}\right)^*,$$

$$\frac{dZ_\alpha}{dt} = \sum_i \frac{\partial z_\alpha}{\partial x_i}\left[\sum_\beta L^\beta a_\beta(x_i)\right] = \quad (10)$$

$$= \sum_\beta L^\beta \left\{\sum_i \frac{\partial z_\alpha}{\partial x_i} M\left(\frac{\partial z_\beta}{\partial x_i}\right)^*\right\}.$$

Выражение в фигурных скобках есть сумматорная функция, каждое слагаемое которой может быть разложено по базису.

$$\frac{\partial z_\alpha}{\partial x} M\left(\frac{\partial z_\beta}{\partial x_i}\right) = I^\gamma_{\alpha\beta} z_\gamma(x_i).$$

Здесь постоянные $I^\gamma_{\alpha\beta}$ (коэффициенты Фурье) определяются только свойствами базиса $\{z_\alpha(x)\}$, матрицы M и никак не связаны с исходными уравнениями. Суммирование по всем компонентам x_i приводит к полному исключению μ-переменных, и мы получаем уравнения

$$\frac{dZ_\alpha}{dt} = I^\gamma_{\alpha\beta} Z_\gamma L^\beta. \quad (11)$$

Подставляя из (7) выражение для L^β, получаем уравнения макродинамики

$$\frac{dZ_\alpha}{dt} = I^\gamma_{\alpha\beta} Z_\gamma \frac{\partial H}{\partial Z_\beta}. \quad (12)$$

M-АЛГЕБРЫ. КВАДРАТИЧНЫЕ МНОГОЧЛЕНЫ

Проведенный анализ не претендует на формальную строгость, так как игнорировались вопросы сходимости возникающих рядов. Однако эти выкладки становятся вполне строгими для важного случая M-алгебр.

Определение. Конечномерное подпространство в пространстве функций с базисом $z_\gamma(x)$ называется M-алгеброй, если оно замкнуто относительно операции $\otimes$-произведения, определенного следующим образом:

$$z_\alpha \otimes z_\beta = \frac{dz_\alpha}{dx} M\left(\frac{dz_\beta}{dx}\right) = I^\gamma_{\alpha\beta} z_\gamma(x). \quad (13)$$

Коэффициенты разложения $I^\gamma_{\alpha\beta}$ называются структурными константами алгебры.

Непустота множества определяемых объектов есть очевидное требование содержательности определения. В нашем случае пространство квадратичных форм образует алгебру для любой матрицы M. Это вытекает из того, что производная (градиент) квадратичной формы есть линейная форма, а произведение двух таких форм есть квадратичная форма. M-алгебру можно расширить, добавив константу и все линейные функции x_i. Пример расширенной M-алгебры, демонстрируя непустоту множества M-алгебр, далеко не исчерпывает этого множества. В простейшем случае системы с одной степенью свободы конечная алгебра порождается всего двумя функциями

$$a(x) = x, \quad b(x) = \frac{x^2}{2}. \quad (14)$$

Уже в этом случае возникает содержательная задача. Итак, пусть

$$H = H(A, B), \quad \text{где} \quad A = \sum_i x_i, \quad B = \sum_i \frac{x_i^2}{2}.$$

Уравнения для переменных x_i в новых обозначениях приобретают вид

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial A} + x_i\frac{\partial H}{\partial B}, \tag{15}$$

откуда можно вывести замыкающие систему уравнения макродинамики

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= N\frac{\partial H}{\partial A} + A\frac{\partial H}{\partial B}, \\ \frac{dB}{dt} &= A\frac{\partial H}{\partial A} + 2B\frac{\partial H}{\partial B}. \end{aligned} \tag{16}$$

В этих уравнениях не использовано предположение о парности взаимодействия и, следовательно, квадратичности гамильтониана H по M-переменным A и B. Уравнения справедливы при значительно более общем предположении

$$H = H(A, B). \tag{17}$$

Заметим, что все уравнения (13) совпадают (с точностью до обозначений) с уравнением μ-движения одной компоненты:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial A} + x\frac{\partial H}{\partial B}. \tag{18}$$

Поэтому система из N уравнений сведена по существу к системе трех уравнений (15) и (16). Проинтегрировав (аналитически или численно) систему (16), мы получаем одно линейное уравнение (18) с переменными коэффициентами. Любое решение $x_i(t)$ получается подстановкой надлежащих начальных данных в решение уравнения (14).

В двумерном случае, $x = (p, q)$, возникает пять M-переменных (из алгебры квадратичных многочленов):

$$\begin{aligned} &P = \sum p_i, \quad W = \sum\frac{p_i^2}{2}, \quad R = \sum p_i q_i, \\ &Q = \sum q_i, \quad Z = \sum\frac{q_i^2}{2}. \end{aligned} \tag{19}$$

Гамильтонова система

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

в случае гамильтониана, зависящего только от макровеличин $H = H(P, Q, R, W, Z)$, переписывается в виде

$$\begin{aligned} \frac{dp_i}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial Q} - p_i\frac{\partial H}{\partial R} - q_i\frac{\partial H}{\partial Z}, \\ \frac{dq_i}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p} + p_i\frac{\partial H}{\partial W} + q_i\frac{\partial H}{\partial R}. \end{aligned} \tag{20}$$

Отсюда вытекают уравнения макродинамики

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dt} &= -N\frac{\partial H}{\partial Q} - P\frac{\partial H}{\partial R} - Q\frac{\partial H}{\partial Z}, \\ \frac{dQ}{dt} &= N\frac{\partial H}{\partial P} - P\frac{\partial H}{\partial W} - Q\frac{\partial H}{\partial R}, \\ \frac{dR}{dt} &= P\frac{\partial H}{\partial P} - 2W\frac{\partial H}{\partial R} - Q\frac{\partial H}{\partial Q} - 2Z\frac{\partial H}{\partial Z}, \\ \frac{dW}{dt} &= -P\frac{\partial H}{\partial Q} - 2W\frac{\partial H}{\partial R} - R\frac{\partial H}{\partial Z}, \\ \frac{dZ}{dt} &= Q\frac{\partial H}{\partial P} - R\frac{\partial H}{\partial W} + 2Z\frac{\partial H}{\partial R}. \end{aligned} \tag{21}$$

Механизм выделения макродинамических уравнений тот же самый, разумеется, что и в случае M-алгебры общего вида. Особо отметим важный частный случай механических систем, когда гамильтониан есть сумма кинетической и потенциальной энергии:

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2Nm} + \sum_i\sum_l U\left(q_i, q_l, \frac{q_i^2}{2}, \frac{q_l^2}{2}\right). \tag{22}$$

В этом случае

$$H = \frac{1}{m}W + U(Q, Z) \tag{23}$$

и система макродинамических уравнений существенно упрощается:

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dt} &= -N\frac{\partial U}{\partial Q} - Q\frac{\partial U}{\partial Z}, \\ \frac{dQ}{dt} &= \frac{1}{m}P, \\ \frac{dR}{dt} &= \frac{2}{m}W - Q\frac{\partial U}{\partial Q} - 2Z\frac{\partial U}{\partial Z}, \\ \frac{dW}{dt} &= -P\frac{\partial U}{\partial Q} - R\frac{\partial U}{\partial Z}, \\ \frac{dZ}{dt} &= \frac{1}{m}R. \end{aligned} \tag{24}$$

В задачу настоящей работы не входит анализ поведения системы уравнений макродинамики, но численные эксперименты (за проведение которых автор благодарен А.С. Кондрашову) обнаружили, кроме положений равновесия, и другие весьма разнообразные (чтобы не сказать затейливые) стационарные режимы.

"РАСЦЕПЛЕНИЕ" КОМПОНЕНТ

Изложим основные идеи анализа. Пусть имеется произвольная M-алгебра $\{z_\gamma(x)\}$,

$$\frac{dz_\alpha}{dx} M \left(\frac{dz_\beta}{dx}\right)^* = I^\gamma_{\alpha\beta} z_\gamma(x) \tag{25}$$

и гамильтониан $H = H(Z_1, Z_2, \ldots, Z_k)$, зависящий только от макропеременных

$$Z_\alpha = \sum_i z_\alpha(x_i)$$

и являющийся (в случае парного взаимодействия) квадратичным многочленом от своих аргументов. Система $\{M, H\}$, порожденная матрицей M и гамильтонианом H,

$$\frac{dx_i}{dt} = M \left(\frac{\partial H}{\partial x_i}\right)^*, \tag{26}$$

и записанная в новых переменных

$$\frac{dx_i}{dt} = \sum_\beta \left(\frac{\partial H}{\partial Z_\beta}\right) M \left(\frac{dz_\beta}{dx_i}\right)^* \tag{27}$$

допускает "выщепление" макродвижений:

$$\frac{dZ_\alpha}{dt} = I^\gamma_{\alpha\beta} Z_\gamma \frac{\partial H}{\partial Z_\beta}. \tag{28}$$

Более того, при известных Z система микродвижений x_i распадается на независимые движения. Все уравнения оказываются копиями (с точностью до обозначения переменных) одного стандартного уравнения для x

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial Z_\alpha} M \left(\frac{dz_\alpha}{dx}\right)^*. \tag{29}$$

Траектория системы в многомерном макропространстве $(x_1, x_2, \ldots, x_N)$ может быть поэтому точно заменена набором из N траекторий (отличающихся только начальными данными) в стандартном μ-пространстве x.

Перечислим этапы анализа. В исходной системе каждая компонента взаимодействует с каждой. Всего N^2 связей. Введение "лишних" макропеременных Z позволяет заменить взаимодействие x_i и x_k действием Z на x_i. Остается N связей. Все компоненты одинаковы. Поэтому движение в многомерном макропространстве равнозначно движению "тучи точек" в стандартном μ-пространстве x. Остается только одна связь.

Для "расцепления" компонент достаточно знания одной траектории макросистемы. Вычисление такой траектории не представляет проблемы для современной вычислительной техники, так как размерность макросистемы не зависит от N, хотя само число N и может входить в коэффициенты макросистемы.

ЭКВИВАЛЕНТНОЕ ПОЛЕ И МАКРОДИНАМИЧЕСКОЕ РАВНОВЕСИЕ

Уравнение (29) удобно переписать в виде

$$\frac{dx}{dt} = M \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^*, \tag{30}$$

вводя "эквивалентное" поле $h(x, Z)$:

$$h(x, Z) = \sum_\alpha \frac{\partial H}{\partial Z_\alpha} z_\alpha(x). \tag{31}$$

Поэтому движение x можно интерпретировать как движение во "внешнем" поле $h(x, Z)$, параметры которого определяются макровеличинами Z. Исследование любых систем обычно начинается с изучения стационарных режимов, а нередко им и заканчивается, если для практических целей достаточно анализа именно стационарных режимов. Треугольность системы уравнений (уравнение для Z не содержит x)

$$\frac{dZ}{dt} = f(Z),$$

$$\frac{dx}{dt} = g(Z, x)$$

позволяет ввести понятие макродинамического равновесия,

$$f(Z) = 0, \quad Z = \mathrm{const},$$

которое означает стационарность только макросистемы. Это естественное обобщение понятия "термодинамического равновесия".

В состоянии макроравновесия эквивалентное поле $h(x, Z)$ оказывается не зависящим от времени и система уравнений для x становится автономной. Весьма правдоподобно, что этот важный частный случай понятия эквивалентного поля соответствует понятию самосогласованного поля в физике. Однако подобный анализ этого интересного вопроса выходит за рамки настоящей публикации. Стационарное эквивалентное поле интересно еще и тем, что дает простую и наглядную интерпретацию предельного перехода $N \to \infty$. Каждая траектория исходной системы порождает N траекторий в пространстве одной компоненты x. Если начальные точки этих траекторий распределены достаточно равномерно, то траектории (в пределе) заполнят все пространство. Следовательно, фазовый портрет системы может быть интерпретирован как предел проекции на μ-пространство одной траектории исходной системы.

Эта связь обещает интересные результаты в дальнейших исследованиях и существенно расширяет область приложений качественной теории обыкновенных дифференциальных уравнений. Напомним, что в случае парного взаимодействия правые части уравнений макродинамики всегда квадратичны. Это указывает на глубокое родство обсуждаемых систем с общими билинейными [3] системами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 04–01–00544).

Авторы будут благодарны всем, кто пришлет замечания по адресу am@impb.ru

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Хинчин А.Я.* Математические основания статистической механики. М.: Гостехиздат, 1943.
2. *Обухов А.М.* // ДАН. 1977. Т. 233. № 1. С. 35–38.
3. *Молчанов А.М.* Билинейные системы. Препринт Пущино: ОНТИ НЦБИ АН СССР, 1982.