Н. С. КРЫЛОВ

РАБОТЫ ПО ОБОСНОВАНИЮ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

АКАДЕМИЯ НАУК СССР

ОТДЕЛЕНИЕ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК

Н. С. КРЫЛОВ

РАБОТЫ ПО ОБОСНОВАНИЮ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ИЗДАТЕЛЬСТВО АКАДЕМИИ НАУК СССР

Н. С. КРЫЛОВ

*Печатается по постановлению
Редакционно-издательского совета
Академии Наук СССР*

*

Редактор издательства *Г. А. Аристов.*
Технический редактор *И. И. Карпов*
Корректоры *Е. А. Васильева* и *Н. Н. Шкуратова*

*

РИСО АН СССР № 3922.Т-03484. Издат. №2499.
Тип. заказ № 277. Подп. к печ. 11.VII 1950 г.
Формат бум. $60 \times 92^{1}/_{16}$. Печ. л. 13+1 вклейка.
Бум. л. $6^{1}/_{2}$. Уч.-издат. 12,75. Тираж 2500.
Цена в переплете 13 руб.

2-я тип. Издательства Академии Наук СССР
Москва, Шубинский пер., д. 10

СОДЕРЖАНИЕ

РАБОТЫ Н. С. КРЫЛОВА ПО ОБОСНОВАНИЮ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Ответственный
редактор
академик В. А. ФОК

Николай Сергеевич КРЫЛОВ

Печатаемые в этой книге работы покойного ленинградского физика Н. С. Крылова посвящены вопросам обоснования статистической физики. В настоящую книгу входят: первые главы задуманной Н. С. Крыловым большой монографии «Обоснование физической статистики», его докторская диссертация на тему «Процессы релаксации статистических систем и критерий механической неустойчивости» и небольшая статья «Об описании немаксимально-полных опытов».

По замыслу автора, его монография должна была включать, кроме нового материала, также и тот, который входит в его докторскую диссертацию. Поэтому печатаемая здесь диссертация частично заменяет недостающие главы монографии.

Научный талант Николая Сергеевича находился в самом расцвете, когда тяжелая болезнь приковала его к постели и преждевременная смерть помешала закончить задуманный им труд.

Николай Сергеевич принадлежит к молодому поколению советских физиков. Он родился 10 августа 1917 г. в г. Устюжна Вологодской области. В 1934 г. поступил на физический факультет Ленинградского университета. Еще будучи студентом, он обращал на себя внимание своими блестящими способностями и стремлением самостоятельно и до конца разобраться в интересовавших его вопросах теоретической физики. Эта вдумчивость и глубина понимания предмета характерны для Николая Сергеевича во всей его научной деятельности, начало которой относится к студенческому времени. До окончания университета им были написаны работы: «Об обосновании физической статистики» (Ученые записки ЛГУ, 57, 74; 1940) и «О способах получения распределения Гиббса» (совместно с Г. Филиппченко, Ученые записки ЛГУ, 57, 97; 1940).

В 1939 г. Николай Сергеевич окончил университет и был принят в аспирантуру к В. А. Фоку. В годы аспирантуры у него сложилась та система взглядов на принципы статистической физики, которая легла в основу дальнейших его работ. В июле 1941 г. он блестяще защитил кандидатскую диссертацию «Процессы размешивания в фазовом пространстве» и начал свою работу в качестве научного сотрудника в ЛГУ.

В годы Великой Отечественной войны друзья Николая Сергеевича помнят его на дежурствах по противовоздушной обороне города всегда с книжкой в руках. В тяжелые дни ленинградской блокады Николай Сергеевич не прекращал научной деятельности. Он упорно работал над развитием своих взглядов на обоснование статистики, и как только, после эвакуации из Ленинграда, восстановил свои силы, защитил в Ленинградском физико-техническом институте (находившемся тогда в Казани) свою докторскую диссертацию. Это было летом 1942 г.

Покинув временно Ленинград, Николай Сергеевич работал в различных научных учреждениях в Елабуге, Йошкар-Ола и в Москве. Вернувшись в Ленинград в конце 1944 г., он возобновил работу в Физическом институте Ленинградского университета в качестве старшего научного сотрудника.

Характерной чертой Н. С. как ученого являлся интерес к принципиальным и наиболее трудным вопросам физики и совершенно исключительная способность к глубокому и оригинальному их анализу. Эта способность проявлялась и в малом, и в большом. Ему часто случалось подмечать парадоксы или противоречия в общепринятых рассуждениях, и он неизменно добивался в каждом вопросе полной ясности. Но особенно характерна для него целеустремленная работа над одной крупной проблемой в течение ряда лет. Как и все ученые такого типа, Н. С. публиковал сравнительно мало, считая возможным печатать только до конца продуманные работы. Помимо упомянутых статей, им были опубликованы работы: «Об описании немаксимально-полных опытов» (Ученые записки ЛГУ); «Процессы релаксации в статистических системах» (Nature, 10 июня 1944 г., стр. 709); «О двух основных толкованиях соотношений неопределенности для энергии и времени» (совместно с В. А. Фоком, ЖЭТФ, 17, 93; 1947). Из законченных, но не опубликованных работ упомянем исследование, посвященное границам применимости принципа симметрии кинетических коэффициентов Онзагера.

В 1946 г. Николай Сергеевич приступил к работе над большой монографией, первые главы которой здесь печатаются. Он не прекращал работу над ней даже во время тяжелой болезни, которая привела к его смерти.

Николай Сергеевич умер 21 июня 1947 г., в самом начале научной жизни, успев осуществить лишь малую долю своих творческих планов. Но и то, что он сделал, настолько значительно, что не должно пройти незаметно для советской науки. Собранные в настоящей книге труды Н. С. позволят ознакомиться с его идеями всем работающим в области статистической физики.

Академик *В. А. Фок*

А. Б. МИГДАЛ и В. А. ФОК

ВЗГЛЯДЫ Н. С. КРЫЛОВА НА ОБОСНОВАНИЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Задача обоснования физической статистики заключается, как известно, в установлении связи между статистическими законами и микромеханикой. Это означает, что из микромеханики должна быть выведена вся совокупность опытных фактов статистической физики и дан критерий применимости статистики к данной механической системе.

Опыт показывает, что замкнутая макроскопическая система через определенное время — время релаксации — приближается к состоянию статистического равновесия. Статистическое равновесие проявляется на опыте в том, что для любой подсистемы распределение состояний, фиксируемых в разные моменты времени, дается гиббсовым законом флюктуаций. Распределение состояний тождественных подсистем в данный момент времени определяется тем же законом флюктуаций. Известно, что закон флюктуаций непосредственно следует из предположения о равновероятности различных состояний системы на поверхности однозначных интегралов движения.

Существенной чертой статистической физики является вероятностный характер ее утверждений.

В классической механике задание начального состояния (точки в фазовом пространстве) однозначно определяет все дальнейшее поведение системы. Поэтому временные ряды состояний механической системы не являются точными вероятностными рядами, а могут лишь приближенно имитировать некоторые черты этих рядов.

Можно было бы предположить, что наблюдаемые статистические законы не являются вероятностными законами в точном смысле, а возникают как результат такой приближенной имитации. Однако последовательное проведение этой точки зрения, повидимому, невозможно. В частности, не может быть исключена возможность подбора таких начальных состояний, которые приводят к нарушению гиббсова закона распределения подсистем в течение времен, много больших времени релаксации (даже если система является квазиэргодической; см. ниже).

Для объяснения вероятностных закономерностей в рамках классической механики можно предположить вероятностное распределение начальных состояний системы. Такова больцмановская постановка вопроса: начальное макроскопическое состояние выделяет некоторый объем фазового пространства, все точки которого (определяющие микросостояние системы) равновероятны. Для того чтобы временное распределение состояний подсистемы совпадало с тем, которое дается законом флюктуаций, необходимо, чтобы траектории, выходящие из точек начального объема, проходили через все ячейки фазового пространства. Размеры этих ячеек выбираются в соответствии с требуемой точностью: для более точной проверки формулы флюктуаций требуется более тонкое разделение фазового пространства. Отсюда вытекает требование эргодичности (точнее квазиэргодичности). Обычно предполагалось, что этого требования достаточно для применимости к данной системе законов статистической физики.

Н. С. Крылов показал, что эргодичности недостаточно для объяснения процесса релаксации. Для существования времени релаксации необходимо, чтобы системы были «размешивающегося» типа. Размешивающиеся системы характеризуются тем, что первоначальная область, отвечающая макроскопическому состоянию системы, настолько усложняет свою форму (сохраняя объем, согласно теореме Луивилля, и связность вследствие непрерывности уравнений движения), что при $t \to \infty$ равномерно покрывает поверхность однозначных интегралов движения (см. стр. 26).

Необходимость размешивания очевидна из следующего рассуждения. Пусть имеется начальная область M_0 с определенным распределением вероятностей точек (например, равномерным) и пусть нет размешивания, т. е. мера множества точек области M_0 (при $t \to \infty$) в областях M_1 и M_2 не пропорциональна величине последних. Тогда вероятности состояний M_1 и M_2, пропорциональные мере множества точек M_0, попавших в них, не будут пропорциональны объемам областей и, следовательно, не будут совпадать с вероятностями, даваемыми флюктуационной формулой.

В теории размешивания Крылова естественным образом возникает понятие времени релаксации как времени, в течение которого начальная область равномерно, с требуемой точностью, расплывается по поверхности однозначных интегралов движения.

Вычисления Крылова, проведенные им до конца для случая идеального газа (см. диссертацию), приводят к правильной оценке времени релаксации. Следующая картина может придать наглядность механизму размешивания. В размешивающихся системах траектории, идущие из двух близких точек, быстро удаляются. При этом траектории, выходящие из подавляющего большинства точек, настолько резко изменяют свое направление, что поверхность однозначных интегралов движения оказывается через короткое время грубо, а затем все мельче изрезанной траекториями. Поэтому уже через короткое время опыт, проверяющий грубую равночастость пребывания в областях фазового пространства с равными объемами, дает положительный результат, в согласии с требованиями статистики. Через более длительное время будет обеспечена равночастость уже для более тонкого разделения фазового пространства (в соответствии с тем, что меньшим объемам, т. е. бо́льшим флюктуациям, отвечают бо́льшие времена ожидания). Между тем, эргодичность обеспечивает даже грубую равночастость только через неограниченно большое время. Можно представить себе систему, траектория которой заполняет поверхность заданной энергии в фазовом пространстве подобно тому, как медленно прецессирующий эллипс заполняет площадь кольца. При усреднении за длительное время равенство средних временных средним фазовым будет выполняться, однако за малые времена такое равенство не будет выполнено даже приближенно, в противоречии с требованиями статистики.

Таким образом, хотя совокупность состояний, проходимых эргодической системой за большие промежутки времени, и находится в согласии со статистикой, последовательность этих состояний во времени может противоречить опытным фактам статистической физики (существованию конечного времени релаксации).

Попытки обосновать статистическую физику исходя из классической механики с необходимостью привели Больцмана к сформулированному выше принципу равновероятности микросостояния области, выделенной заданным макроскопическим состоянием. Задача обоснования статистической физики в этой постановке вопроса сводится к объяснению на основе микромеханики принципа равновероятности для точек начальной области.

Можно было бы попытаться получить этот принцип как следствие «приготовления» системы в результате взаимодействия ее с другими системами, имеющими большое количество степеней свободы и поэтому устанавливающими состояния данной системы по законам «случая». Однако при такой точке зрения трудность только переносится с рассматриваемой системы на более сложную, включающую также приготовляющие тела.

Как показывает подробный анализ, произведенный Крыловым (I; § 12 и 14), принцип равновероятности не только не может быть получен, но даже не может быть введен как постулат в рамках классической механики.

Появление квантовой механики вызвало новые попытки обоснования статистики. В результате подробного рассмотрения всех этих попыток (глава 2 Монографии) Крылов приходит к заключению, что и квантовая механика не может дать полного решения вопроса, если состояние системы описывается с помощью Ψ-функции, подчиняющейся уравнению Шредингера. Квантово-механическая система, находящаяся в ограниченном объеме, имеет, как известно, дискретный спектр. В этом случае выполняется теорема возврата: можно указать такое время, когда Ψ-функция системы будет как угодно мало отличаться от начальной Ψ-функции.

В противоположность этому, предсказания статистической физики не подчиняются теореме возврата; из начального состояния с течением времени должно установиться равномерное распределение вероятностей по всей поверхности однозначных интегралов движения, не содержащее никаких следов начального состояния. Это распределение вероятностей никогда не перейдет в начальное распределение, и вероятность найти систему через достаточно большое время в начальном (как и во всяком другом) состоянии будет даваться флюктуационной формулой. Помимо этого, квантово-механическое описание с помощью Ψ-функции, так же как и классическое, обладает свойством обратимости. Статистические же закономерности необратимы.

Попытки решения задачи, основанные на применении статистического оператора, также не могут считаться убедительными; как показал Крылов, предположение о применимости статистического оператора для описания любых немаксимально полных опытов может привести к противоречию.

Разрешение противоречий, возникающих при попытках обосновать статистическую физику, Крылов видел в следующем. Проведение максимально полного опыта над макроскопической системой приводит, как показал Крылов, к полному изменению макроскопической характеристики системы. Поэтому можно предположить, что между макроскопической характеристикой и обычным микроскопическим описанием существует своего рода дополнительность, аналогичная той, которая, согласно квантовой механике, возникает при классическом описании. Слишком детальное уточнение положения системы внутри фазовой области, выделенной макроскопическим состоянием, невозможно без нарушения макроскопической характеристики системы. Макроскопическое состояние не может быть определено точнее, чем некоторой минимальной областью (объем которой много больше h^{3N}, что делает законным пользование фазовым пространством системы). Связь с микромеханикой выражается в том, что в последующие моменты времени система может оказаться лишь в тех областях фазового пространства, которые достижимы по законам микромеханики.

Доказательства этих утверждений, над которыми Н. С. Крылов работал в последние годы своей жизни, должны были войти в те главы монографии, которые, к сожалению, остались ненаписанными.

* * *

Принятый Крыловым характер изложения несколько необычен для книг по теоретической физике. Во многих местах Крылов жертвует простотой изложения ради точности, причем одно и то же утверждение иногда доказывается им несколько раз, с различных исходных позиций. Логическая структура его работ довольно сложна. Поэтому целесообразно дать здесь обзор содержания книги, который может служить также более подробным оглавлением.

I. Обоснование статистической физики

Введение. Формулируется задача обоснования статистики, приведен предполагавшийся план монографии (стр. 15).

Глава I. В первой главе ставится задача выяснения возможностей обоснования статистической физики в рамках классической механики с дополнительными вероятностными предположениями.

§ 1. Характеризуются главные утверждения, лежащие в основе статистической физики. Особенное внимание обращено на существование у статистических систем процесса релаксации, протекающего за конечное время, и на вероятностный характер утверждений статистической физики (стр. 17).

§ 2. Отмечена невозможность обоснования статистической физики в рамках классической механики без дополнительных вероятностных предположений. Показано, что во всех попытках обоснования статистической физики были явно или неявно использованы вероятностные предположения. Например, в больцмановском доказательстве H-теоремы вероятностные предположения содержатся уже в допущении непрерывной функции распределения в μ-пространстве (стр. 20).

§ 3. Формулируются результаты дальнейшего анализа наиболее удовлетворительной схемы обоснования статистики в рамках классической механики с дополнительными вероятностными предположениями (стр. 22).

§ 4. Отмечено, что общепринятое статистическое толкование H-теоремы основано на предположении о равновероятности микросостояний внутри выделенной начальным макроскопическим состоянием области фазового пространства (стр. 24).

§ 5. Дано определение размешивающейся системы и доказательство необходимости размешивания для объяснения процесса релаксации. Показано, что при размешивании естественно возникает понятие времени релаксации. Для эргодической, но не размешивающейся системы невозможно ввести время релаксации (стр. 25).

§ 6. Показано, что должен быть введен механический критерий для систем, подчиняющихся законам статистической физики. Развиты аргументы § 5 о невозможности получения процесса релаксации для эргодической, но не размешивающейся системы. Эргодичность не обеспечивает наблюдающуюся на опыте быстроту стремления к пределу временных средних. Показано, что эргодичность есть следствие размешивания (стр. 34).

§ 7. Приводится развитая в § 5—7 следующая картина процесса релаксации. Пусть макроскопическое состояние характеризуется «грубой» плотностью в μ-пространстве. Это значит, что μ-пространство разбито на ячейки, и заданы числа частиц в этих ячейках. Тогда каждому макроскопическому состоянию соответствует определенный объем в Г-пространстве, а каждому разбиению μ-пространства на ячейки — свое разбиение Г-пространства на области. Различное разбиение μ-пространства на ячейки имеет смысл задания различных макроскопических характеристик. Например, ячейки в пространстве импульсов будут иметь больший размер, когда задано распределение температур и давлений по объему тела, чем в том случае, когда макроскопическое состояние определено распределением по скоростям. Энтропия состояния определяется как величина, пропорциональная логарифму объема Г-пространства, соответствующего этому состоянию.

В процессе релаксации начальная область $\Delta\Gamma_0$, размешиваясь по поверхности заданной энергии, покрывает все большее количество областей, на которые разбито Г-пространство при выбранном типе макроскопической характеристики. Вероятность осуществления того или иного состояния пропорциональна мере точек начальной области, попавших в область, соответствующую этому состоянию. В ходе размешивания растет вероятность осуществления областей с большим объемом, покуда не наступит состояние релаксации, при котором вероятность осуществления пропорциональна величине объема. Таким образом, энтропия состояний фиксирована, и с течением времени увеличивается лишь вероятность осуществления состояния с большей энтропией. Процесс, при котором энтропия возрастает, происходит с подавляющей вероятностью, но не с необходимостью, в соответствии с H-теоремой. Время релаксации определено как время, после которого вероятность осуществления той или иной области будет с определенной точностью пропорциональна ее объему. Это время будет зависеть от размера областей и, следовательно, будет различным для разных макроскопических характеристик (стр. 37).

§ 8. Указана необходимость ограничения величины и формы начальных областей для монотонности процесса релаксации и конечности времени релаксации (стр. 39).

§ 9. Сделаны критические замечания по поводу теоремы Гиббса. Этот параграф может быть опущен при первом чтении (стр. 42).

§ 10. Отмечается недостаточность точки зрения, согласно которой временные ансамбли имитируют вероятностные ряды сложных механических систем. Такая точка зрения не объясняет, в частности, того, что гиббсов ансамбль невзаимодействующих систем, находившихся в одном макросостоянии, приходит в состояние релаксации (стр. 52).

§ 11 и 12. Анализируется принцип равновероятности начальных состояний. Не может быть установлена связь этого принципа с динамической характеристикой системы. Приложимость же его ко всем системам противоречит опыту. Показано, что принцип равновероятности в мире, целиком подчиняющемся классической механике, не может быть законом природы. Всегда остается возможность такого подбора начальных микросостояний, когда следствия этого закона нарушаются (стр. 56).

§ 13—15. Рассмотрена следующая точка зрения. Предполагается, что наблюдаемые на опыте системы, находящиеся в одном и том же макроскопическом состоянии, распределены равномерно по микросостояниям. При этом предполагается, что это равномерное распределение систем не является следствием вероятностного закона, а есть эмпирический факт. Такой ансамбль назван «реальным». Пусть для какого-либо опыта требуется отобрать наудачу одну из систем. Казалось бы, отобранная система может с одинаковой вероятностью иметь любое микросостояние. Такая точка зрения неверна по следующим причинам. Для того чтобы можно было говорить о вероятности выбора той или иной системы, необходимо исключить возможность «подбора» систем, что невозможно в рамках классической механики (см. § 12). Кроме того, предположение о равнораспределении для любого макроскопического состояния приводит к равнораспределениям по всей поверхности заданной энергии. Тогда число систем, находящихся в неравновесном состоянии, было бы мало, что противоречит опыту (стр. 67).

§ 16. Резюмируются аргументы § 12—15 о невозможности обоснования статистики путем введения вероятностных представлений в классическую механику (стр. 89).

§ 17. Развиваются соображения § 8 о необходимости ограничения величины и формы областей для объяснения экспериментальных фактов статистической физики. Показана невозможность такого ограничения в рамках классической механики, что является еще одним доводом против возможности построения статистической физики на классической основе (стр. 94).

§ 18. Показано, что монотонность процесса релаксации и независимость предельного распределения от начального не обеспечивается равнораспределением в реальном ансамбле. Обсуждается возможность описания процесса релаксации с помощью цепей Маркова (стр. 104).

§ 19. Доказана необходимость равномерного, а не какого-либо другого распределения начальных микросостояний для получения флюктуационной формулы (стр. 112).

§ 20. Дана критика некоторых теорий, ставящих целью частичное решение задачи обоснования статистики. Показано, что больцмановская интерпретация H-теоремы при помощи пилообразной кривой должна быть дополнена вероятностными предположениями. Доказана несостоятельность точек зрения, согласно которым требования эргодичности (квазиэргодичности) могут быть ослаблены. Приведена критика теории, объясняющей статистические закономерности воздействием внешних систем (стр. 115).

§ 21. Дается краткий обзор результатов первой главы (стр. 130).

Глава II. Критикуются попытки обоснования статистической физики, основанные на квантовой механике (написаны только первые четыре параграфа).

§ 1 и 2. Дается обзор существующих работ по обоснованию статистической физики на основе квантовой механики (стр. 134).

§ 3. Показана несостоятельность работ, основанных на описании системы с помощью Ψ-функции. В этих работах не установлена связь полученных результатов с макроскопическими понятиями. Описание с помощью Ψ-функции незаконно, так как в статистике не производятся максимально полные опыты. Кроме того, такое описание приводит к теореме возврата, которая противоречит установлению равнораспределения при $t \to \infty$ (стр. 143).

§ 4. Дается описание свойств статистического оператора (стр. 152).

II. Об описании немаксимально полных опытов

§ 1. Критикуется часто высказываемое утверждение, что всякий немаксимально полный опыт может быть описан статистическим оператором. Показано, что такая точка зрения неявно предполагает более сильное воздействие на систему, чем то, которое производится при немаксимально полном опыте. На простом примере показано, что описание с помощью статистического оператора может привести к противоречию. Указаны случаи, когда применение статистического оператора законно (стр. 160).

§ 2. Отмечено, что по отношению к теореме возврата нет непрерывного перехода от квантового описания к классическому (стр. 165).

III. Процессы релаксации статистических систем и критерий механической неустойчивости

Введение. Указано, что статистические системы должны быть системами размешивающегося типа (стр. 168).

А. Случай идеального газа. Подробно разбирается процесс размешивания на примере идеального газа. Из картины размешивания получено время релаксации. Порядок величины времени релаксации согласуется с кинетической теорией. Время релаксации по координатам оказывается гораздо больше, чем время релаксации по скоростям (стр. 170).

Б. Размешивание в фазовом пространстве.

§ 1. Исследования по эргодичности. Дается обзор результатов некоторых математических исследований по эргодичности, необходимых для дальнейшего изложения (стр. 180).

§ 2. Максимально полный макроскопический опыт. Введено понятие максимально полного макроскопического опыта как опыта, не допускающего уточнения при измерениях, производимых над макроскопическими системами. Результат такого опыта не может быть записан в виде Ψ-функции и дает область фазового пространства объема $\Delta\Gamma \gg h^n$. Результат такого опыта не может быть также описан статистическим оператором.

Принимается следующий постулат: распределение вероятностей различных состояний в фазовом пространстве в последующие моменты времени такое, как если бы внутри начальной области было равномерное распределение вероятностей различных состояний (стр. 182).

§ 3. Размешивание в фазовом пространстве. Дается математическое определение размешивающейся системы. Задача движения точки, изображающей систему, записывается в виде задачи нахождения геодезических в римановом пространстве с определенной метрикой. Требование, чтобы система была размешивающейся, формулируется в виде условий, накладываемых на метрику. Для получения этих условий используются результаты математических исследований о расходимости геодезических (стр. 184).

§ 4. Условия размешивания в фазовом пространстве. С помощью результатов § 3 установлено, каким условиям должна удовлетворять потенциальная энергия системы для существования размешивания. Показано, что для всех практически интересных случаев взаимодействия между частицами условия размешивания выполняются. Невыполнение этих условий возможно лишь для малого числа частиц в системе (стр. 188).

§ 5. Пространство начальных состояний. Равномерность размешивания. Изучаются свойства фазового пространства, точками которого являются параллелепипеды объема A^n (A^n — наименьшая область, получающаяся при макроскопическом максимально полном опыте). Равномерность размешивания относительно выбора начальных и конечных состояний оказывается следствием свойств этого фазового пространства. Равномерность размешивания необходима для получения согласующейся с опытом картины релаксации (стр. 201).

РАБОТЫ Н. С. КРЫЛОВА ПО ОБОСНОВАНИЮ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

I. ОБОСНОВАНИЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ВВЕДЕНИЕ

Целью настоящей работы является исследование вопросов, относящихся к общим принципам релаксации статистических систем. Эти вопросы возникли вместе с задачей так называемого «обоснования статистики», т. е. установления связи физической статистики и механики. Трудности, связанные с этой задачей, сводились, как известно, к двум основным трудностям, имеющим совершенно различную природу: во-первых, это — трудности введения в механику вероятностных представлений, составляющих существенную черту статистической физики (например, ее основного утверждения: H-теоремы); во-вторых, трудности, порожденные необходимостью дать механическую характеристику тех систем, к которым применимы результаты статистической механики.

С первой группой вопросов связана проблема механического толкования необратимости, в частности все широко известные возражения против больцмановского рассмотрения H-теоремы и все до сих пор появляющиеся попытки квантово-механического решения этой проблемы. Со второй группой связаны исследования по эргодичности, в очень малой степени достигшие той цели, которая ставилась статистической механикой, а именно нахождения эффективного критерия, дающего физическую характеристику систем, которые подпадают под вводимые математические определения.

Несмотря на результаты, иногда исключительной ценности, полученные при попытках преодолеть эти две трудности, следует считать, что задача установления связи статистики и механики еще совершенно не решена. Это будет показано в двух первых (критических) главах работы.

Цель настоящей работы — дать такое решение этой задачи, которое, объединяя обе только что упомянутые группы вопросов, во-первых, явно вводило бы центральное понятие статистической физики — понятие релаксации — и давало бы (по крайней мере, принципиально) возможность количественного определения времени релаксации; во-вторых, давало бы способ судить о том, к каким механическим системам приложима статистическая механика, т. е. давало бы критерий, выраженный через свойства гамильтониана системы, и позволяющий судить (опять-таки хотя бы принципиально) о применимости к данной системе результатов физической статистики; наконец, в-третьих, представляло бы логически стройную конструкцию, во всяком случае лишенную противоречий, присущих, как будет показано, всем ранее предлагавшимся решениям задачи, взятой во всей ее общности (т. е. охватывающей проблему введения в теорию и необратимости, и эргодичности и конечного времени релаксации).

Так как сложность этой задачи в значительной части сводится к правильной ее постановке, то было бы нецелесообразным пытаться дать во введении более полное представление об объеме предлагаемой работы.

Работа состоит из шести глав. Первая глава посвящена разбору возможностей, предоставляемых классической механикой для решения названной основной задачи, и критике относящихся сюда работ, основанных на классической механике. Вторая глава посвящена аналогичному рассмотрению в квантовой механике. В третьей главе разбирается вопрос об описании немаксимально полных опытов, в частности об условиях применимости понятия статистического оператора (матрицы плотности). В четвертой главе выводятся некоторые ограничения, которые накладываются на возможности измерений, производимых над макроскопическими системами, условием сохранения их заданной макроскопической характеристики. Значительная часть вопросов, затронутых в третьей и четвертой главах, заключается в получении свойств релаксации, H-теоремы и т. д.— утверждений макроскопических, т. е., казалось бы, не связанных с вопросами о возможностях измерения. Поэтому, чтобы при решении поставленной в работе задачи не казалось странным возникновение этих вопросов, отметим сразу же, что самая суть поставленной задачи заключается в выяснении связи макроскопических утверждений с микромеханикой, а уравнениям последней можно, как известно, придать физический смысл лишь в связи с возможностями измерений. Пятая глава посвящена общим понятиям о релаксации физических систем, об H-теореме и о средних во времени значениях физических величин. В шестой главе выясняется связь между существованием релаксации и определенными свойствами гамильтониана системы. *

---

* Главы III—VI и часть главы II не написаны. Ссылки на эти главы оставлены в тексте. (*Ред.*)

Хотя решению названной основной задачи должна служить вся работа в целом, каждая из перечисленных ее частей представляет собой до известной степени независимое целое. При таком построении рассуждения, приводимые в каждой из частей, оказываются независимыми от аргументации в остальных частях и могут рассматриваться отдельно.

ГЛАВА I

§ 1. Удовлетворительным решением задачи выяснения связи принципов статистической физики и принципов микроскопической механики может быть лишь такое решение, которое исходит из единой точки зрения при ответах на главные вопросы этой задачи. В большинстве работ, посвященных этой теме, постановка вопроса охватывала только часть общей задачи: главным образом это было или установление равенства средних временных средним фазовым (так называемая проблема эргодичности) или попытки доказательства H-теоремы (проблема необратимости). Методы, применяемые для решения разных частей общей задачи, и делаемые при этом предположения были обычно совершенно различны и не связаны между собой.

Охарактеризуем здесь кратко главное содержание задач, т. е. охарактеризуем главные утверждения, лежащие в основе статистической механики; отношение этих утверждений к принципам микроскопической механики является предметом названной выше общей задачи. Эти утверждения состоят, прежде всего, в требовании равенства средних временных и средних эргодических, т. е. любая физическая величина, характеризующая рассматриваемую в статистической механике систему, имеет среднее во времени значение, равное среднему значению этой величины на поверхности заданной энергии (при усреднении по поверхности с обычной, так называемой эргодической мерой $\frac{d\Omega}{\operatorname{grad}\varepsilon}$, где $d\Omega$ — элемент поверхности заданной энергии). Выполнение этого требования составляет так называемую проблему эргодичности.

Кроме сказанного, эти утверждения включают требования того, чтобы средние за промежуток времени значения физических величин при возрастании промежутка времени достигли независимо от начального состояния системы (или во всяком случае практически независимо в подавляющем большинстве случаев) заданной степени близости к пределу. Эта близость к пределу должна достигаться за определенные, общие для всех физических величин данного типа, времена, причем времена, совпадающие с теми, которые констатируются на опыте. Точный смысл этого требования — равномерности сходимости к пределу относительно различных физических величин данной группы — выяснен в дальнейшем (см. пятую главу). Пока отметим лишь, что без указанного требования применение вычисленного среднего эргодического значения физической величины к опыту было бы лишено всякого основания. Действительно, как бы ни был продолжителен тот промежуток времени, в течение которого наблюдается изменение величины, мы не имели бы уверенности, что среднее за этот промежуток времени сколько-нибудь близко к вычисленному пределу. Опыт показывает, что при достаточно бо́льших для величины данной группы промежутках (значительно бо́льших, чем так называемые времена релаксации) такая уверенность у нас есть. И практически мы всегда можем руководствоваться этой уверенностью без какого бы то ни было дополнительного исследования начального состояния системы или каких-либо других величин. Следовательно, упомянутое требование должно выполняться по крайней мере с подавляющей вероятностью. Это требование выходит за пределы обычной формулировки проблемы эргодичности, но лишь выполнение его гарантирует приложимость математической схемы к опыту.

Наконец, к числу названных выше главных утверждений принадлежит утверждение о существовании конечного времени релаксации и о монотонном ходе процесса релаксации. Это утверждение означает, что при любом начальном состоянии данной системы через достаточно большое время — время релаксации — рассматриваемая нами система будет иметь то или иное состояние с вероятностью w_i, не зависящей от начального состояния и пропорциональной $e^{\frac{s_i}{k}}$. Здесь s_i — энтропия рассматриваемого состояния — определена (при помощи известного обобщения термодинамического понятия энтропии) как $k \ln \Delta\Gamma$, где $\Delta\Gamma$ — мера области (при эргодическом мероопределении), соответствующей в фазовом пространстве рассматриваемому состоянию. Время релаксации зависит от типа рассматриваемых состояний, т. е. может быть разным для опытов по измерению различных величин (время релаксации по температурам, по давлениям и т. д.). Однако для любого типа состояний всегда будет существовать соответствующее время релаксации, т. е. такое время, после которого формула $w_i = Ce^{\frac{s_i}{k}}$ будет справедлива. При этом с подавляющей вероятностью будет осуществлено равновесное состояние, т. е. состояние максимальной энтропии, что вместе с утверждением о монотонном ходе процесса возрастания энтропии составляет содержание H-теоремы.

Отметим здесь характерную черту приведенного описания процессов релаксации: сказанное имеет форму некоторых вероятностных утверждений. Как описание результатов измерений после времени релаксации, так и вообще описание последовательных во времени измерений различных физических величин (в частности, энтропии) может быть дано только в виде некоторой вероятностной схемы. Следует подчеркнуть, что вероятностный характер полученных рядов результатов измерений в названных вопросах — в теории флюктуаций, броуновском движении, ходе H-кривой и т. д., является абсолютно достоверным фактом опыта, не менее достоверным, чем вероятностный характер рядов испытаний, полученных при любом другом сколь угодно обоснованном приложении теории вероятности. Полученные при таких измерениях ряды результатов измерений обладают, следовательно, общим свойством всех вероятностных видов — отсутствием алгорифма, который определял бы результаты последовательных измерений. Сколь угодно сложная формула принципиально не может описать последовательный ход результатов измерений величин, подчиняющихся вероятностному закону распределения свойств (свойство Regellosigkeit вероятностного ряда).

Характеризуя основные утверждения, лежащие в основании статистической механики, т. е. те требования, которые предъявляются к конструкции статистической механики (конструкции, каким-то образом связанной с принципами микроскопической механики), мы исходим из указаний опыта. Мы оставляем здесь в стороне все представления, основанные на концепции классической механики, а также вопрос о том, как эти представления согласуются с указаниями опыта. Ограничимся только ссылкой на то, что опыт дает эти указания и что наши утверждения справедливы для всех физических величин, которые могут измеряться в системах, описываемых статистической механикой.

Физическая величина определена здесь как любая величина, измеряемая в действительности, в системах, изучаемых статистической механикой; это не теоретическое, а эмпирическое определение. Теоретическое, основанное на микромеханике определение, конечно, не может быть дано в начале исследования. Связь понятия физической величины с представлениями классической механики исчерпывается здесь указанием на то, что заданному результату измерения этой величины соответствует в фазовом пространстве системы область с мерой, отличной от нуля. Аналогично этому, связь употребленного здесь понятия начального состояния с представлениями классической механики исчерпывается тем, что начальному состоянию соответствует всегда в фазовом пространстве системы область с отличной от нуля мерой. Такое определение понятий не является необходимым следствием концепции классической механики (допускающей определения состояния как точки в фазовом пространстве). Но как уже указывалось, в этом параграфе мы говорим не о концепции классической механики, а об опыте, и можно ограничиться этим определением связи вводимых нами понятий с классической механикой. Они могут быть согласованы с классической механикой, если принять, например, следующее. практически бесспорное, предложение: каждый опыт дает нам отличный от нуля интервал измеряемой величины.

§ 2. Цель настоящей главы — исследование возможностей, представляемых классической механикой, для создания удовлетворительной (и, в частности, удовлетворяющей охарактеризованным в § 1 требованиям) конструкции статистической механики. Начиная с этого параграфа, в противоположность § 1, мы будем говорить о классической механике и будем исходить из классических представлений.

В первые же десятилетия после возникновения молекулярно-кинетической теории, ставившей себе целью механическое объяснение термодинамических и кинетических процессов, стало ясно, что чисто механические представления совершенно недостаточны для этой цели и должны быть дополнены введением предположений вероятностного характера. В то время как эргодической гипотезе с самого начала придавали чисто механический смысл, механическое толкование принципа возрастания энтропии сразу оказалось невозможным. С одной стороны, оказалось невозможным создать чисто механическую модель не только вероятностного поведения энтропии, но и модели одного лишь необратимого ее изменения, в соответствии с догматическим пониманием второго начала (вроде теории моноциклических систем Гельмгольца и других — см. резюмирующее изложение Пуанкаре в гл. XVII его «Термодинамики» [1], [2]). С другой стороны, было указано на наличие вероятностных предположений в предложенном Больцманом доказательстве H-теоремы (в известной критике положенного в основу доказательства предположения о числе соударений). Это положение было достаточно ясно охарактеризовано в известном обзоре П. и Т. Эренфестов [1]. Отметим здесь только, что вероятностные предположения возникают уже в элементарных представлениях статистики и кинетики.

Предположим, что мы многократно воспроизводим одно и то же макроскопическое состояние. Так как мы знаем, что дальнейший ход процесса в разных опытах может быть различным, то мы должны допустить, что в разных опытах мы осуществляем в пределах одного и того же макроскопического состояния различные начальные микроскопические состояния. Уже в этот момент возникает вопрос о вероятностном законе распределения различных начальных состояний.

С другой стороны, когда мы описываем определенную, как мы будем говорить, индивидуальную систему не в разных опытах, а после одного данного макроскопического опыта при помощи задания распределения в фазовом пространстве одной молекулы (в μ-пространстве, как это делается, например, при больцмановском доказательстве H-теоремы), то в самом этом описании — в использовании непрерывных функций распределения — скрыты определенные вероятностные предположения. Действительно, точное задание микроскопических состояний всех молекул системы еще не определяет какой бы то ни было непрерывной плотности. Если для плотности в данной точке M мы будем образовывать отношения * $\frac{n_i}{m(\Delta\tau_i)}$ так, чтобы M лежало внутри всех $\Delta\tau_i$, и n_i — число молекул — внутри $\Delta\tau_i$, и остановим стремление $m(\Delta\tau_i)$ к нулю в такой момент, при котором внутри $\Delta\tau_i$ еще будет много молекул, то предел, очевидно, будет определяться характером произвольно выбираемой последовательности областей $\Delta\tau_i$ [2] (т. е. тем, насколько эти области будут охватывать фиксированные точки положения молекул). Чтобы получить определенный результат, мы предполагаем,** что в подавляющем большинстве случаев эти фиксированные положения молекул распределены настолько равномерно, что при достаточно простой форме областей $\Delta\tau_i$ (например, прямоугольной) отношение $\frac{n_i}{m(\Delta\tau_i)}$, начиная с некоторого момента изменения $\Delta\tau_i$, будет близко к постоянной величине — пределу. Кроме того, мы предполагаем, что состояния системы в Γ-пространстве (фазовом пространстве системы в целом), соответствующие приблизительно тому же распределению молекул в μ-пространстве (т. е. тем же или приблизительно тем же числам молекул в заданных малых интервалах μ-пространства, равным математическому ожиданию числа молекул при заданной функции распределения), одинаково вероятны.

Легко видеть, что делаемые нами предположения о частости различных случаев и о вероятностях состояний являются пред-

---

* $m(\Delta\tau_i)$ — мера области $\Delta\tau_i$.

** В этом предположении суть перехода от «гипотезы разрывности», исходящей из задания конечного числа дискретных точек, к «гипотезе непрерывности», исходящей из непрерывных функций распределения, различие между которыми отмечал Пуанкаре в своей статье о кинетической теории газов [3].

положениями о функциях распределения, описывающих вероятность обнаружить различные микроскопические состояния внутри области Г-пространства, определяемой заданным макроскопическим состоянием. Очевидно также, что эти предположения носят характер утверждений о равномерности распределения внутри малых интервалов μ-пространства и внутри соответствующих областей Г-пространства. Только предположения такого типа позволяют нам, в частности, применять в кинетической теории обычную формулу для числа соударений.

§ 3. Вопрос о возможности механической интерпретации термодинамики и кинетики был, как известно, предметом многочисленных дискуссий. Эта возможность отрицалась в работах Лошмидта, Цермело, Барбари, Липмана, Льенара и других [1]. Включение в этот ряд имен имени Пуанкаре лишено достаточного основания: Пуанкаре не был безусловным сторонником механической интерпретации, термодинамики, но, насколько нам известно, он никогда не выдвигал против молекулярно-кинетической теории ошибочных (или легко устранимых путем несущественных изменений теории) возражений.

Дискуссии, в особенности сопровождавшие обсуждение вопроса об H-теореме, вызвали изменения и усовершенствования первоначальных точек зрения основателей молекулярно-кинетической теории. Но и после появления последних работ Больцмана и Гиббса не у всех появилось чувство полного удовлетворения. Возможно, отчасти это было вызвано тем, что многие из противников Больцмана сохранили свои первоначальные взгляды. Некоторое чувство неудовлетворенности проявилось, между прочим, в тех надеждах на улучшение положения, которые связывались многими с появлением квантовой механики, хотя никто ясно не показал, в чем заключается неудовлетворительность старой классической ситуации. Тем не менее, повидимому, подавляющее большинство физиков примкнуло к точке зрения, высказанной Эренфестами в их обзоре [1] и заключающейся в том, что измененная форма молекулярно-кинетической теории, изложенная в последних работах Больцмана, после незначительных усовершенствований становится логически удовлетворительной и лишенной противоречий. Повидимому, еще шире распространено убеждение в логической стройности статистической механики Гиббса.

Сформулируем сразу же результаты, к которым нас приведет исследование вопроса о возможности построения удовлетворительной схемы физической статистики, основанной на классической механике.

1. Вся бывшая до сих пор критика (в частности, названных выше авторов) классической точки зрения отпадает целиком

после появления последних работ Больцмана и после некоторых непринципиальных, порой почти терминологических, улучшений, внесенных некоторыми другими авторами (вроде замечаний Эренфестов об H-кривой или исследований Джинса о числе соударений; см. § 4 и 8). Это утверждение нашло свое выражение в обзоре Эренфестов [1] [новая, отличная от первоначальной форма возражения обратимости требует принятия дополнительных, чуждых классической теории постулатов (см. § 8 и 17), но принципы классической теории и их толкование при этом не изменяются]. Что касается старых возражений, то, может быть, лишь одно замечание Цермело (о котором упомянуто в § 14) сохранит свое значение и по отношению к наиболее законченной редакции больцмановских воззрений, но лишь после дополнительной аргументации, отсутствовавшей у Цермело; взятое же в своей точной форме и это замечание оказывается лишенным достаточного основания.

2. Наиболее законченная редакция, которая может быть придана больцмановским взглядам (пожалуй, наилучшим образом охарактеризованная в обзоре Эренфестов) и которая оказывается свободной от всех недостатков, приписываемых ей критиками молекулярно-кинетической теории, не удовлетворяет полному объему требований, предъявляемых к построению физической статистики; в частности, она не может быть совмещена с физически правильным понятием о релаксации. Она должна быть дополнена чужеродными ей элементами: требованием, чтобы описываемые статистической механикой системы были системами размешивающегося типа (см. § 5 и 6) и некоторыми замечаниями о характере макроскопического опыта (см. § 7). Вместе с этими дополнениями больцмановская точка зрения будет полным выражением всех тех возможностей, которые предоставляет для построения физической статистики классическая механика (см. § 8).

3. По отношению к поставленному принципиальному вопросу — о возможности исходящей из классической механики интерпретации физической статистики — работы Гиббса не представляют никакого преимущества по сравнению с только что упомянутой завершенной и дополненной больцмановской точкой зрения. В то же время предложенная Гиббсом конструкция содержит неправильное толкование некоторых важных утверждений физической статистики (см. § 9).

4. Те максимальные возможности, которые предоставляются классической механикой и о которых говорится в п. 2, совершенно недостаточны для построения статистической физики. Необходимые в статистической физике вероятностные предположения принципиально не могут быть введены в классическую механику так, чтобы не возникло противоречия с понятием

физического закона, с одной стороны, и с данными опыта — с другой (см. § 12—14).

§ 4. Дискуссия, развернувшаяся вокруг H-теоремы, имела сравнительно сложную историю и касалась многих сторон рассматриваемой проблемы. Напомним здесь один из аспектов дискуссии, чтобы потом отметить сущность того решения вопроса, которое вытекало из взглядов Больцмана.

Сначала доказанному Больцманом утверждению об убывании H-функции придавался смысл абсолютного закона,— вероятностные предпосылки вывода не были отмечены. Одним из возражений было приведенное Цермело [4] указание на применимость к вопросу об изменении H-функции возвратной теоремы Пуанкаре. Больцман, установив, что периоды возврата чрезвычайно велики, показал, что согласие с принципом монотонного изменения H-функции может быть восстановлено, если считать, что в действительности мы находимся на нисходящей ветви H-кривой. Цермело отмечал невероятность подобного предположения, так как мы наблюдаем в природе не один процесс возрастания энтропии, а огромное число таких процессов, о каждом из которых пришлось бы сделать выдвинутое Больцманом предположение.

Окончательное, вытекающее из больцмановских взглядов решение этого вопроса таково. Каждый раз, когда проведенный опыт указывает, что система находится в макроскопически определенном неравновесном состоянии, мы имеем дело с одним из микроскопических состояний выделенной опытом области фазового пространства. Подавляющее большинство этих микроскопических состояний определяет траектории, ведущие в более равновесные состояния. Если мы предположим, что *все микроскопические состояния* выделенной области *одинаково вероятны*, то мы получим так называемое статистическое выражение H-теоремы: с подавляющей вероятностью энтропия возрастает (см. обзор Эренфестов, § 14 и 15 и примечание 170; см. также изложение этого вопроса у Планка [5], [6]). По поводу предложения о равновероятности микроскопических состояний внутри выделенной опытом области сделано несколько замечаний в § 12—14.

В другом распространенном способе представления статистической H-теоремы — при помощи пилообразной H-кривой — в этом отношении положение то же самое: различные состояния, соответствующие тому же значению энтропии, считаются одинаково вероятными; подавляющее большинство из них соответствует таким состояниям, после которых энтропия возрастает. Можно сказать, что заданное макроскопическое состояние определяется здесь некоторым специальным образом — заданием значения энтропии. Другое отличие от приведенной выше общей интерпретации заключается в том, что совокупность различных микроскопических состояний, соответствующих заданной энтропии, охватывает не все микросостояния, удовлетворяющие этому условию, а лишь те, которые, кроме того, принадлежат одной, неограниченно продолжающейся в обе стороны механической траектории. Этой интерпретации H-теоремы, в отличие от общей интерпретации, несмотря на отмеченные черты сходства в основной идее, свойственны, однако, некоторые особенности, делающие ее неудовлетворительной уже в рамках самих классических представлений; об этом сказано в § 20.

Статистическое толкование H-теоремы общепризнано; общеизвестно то разрешение, которое получают на основе его разные парадоксы: парадокс Лошмидта, несовместимость предположений о числе соударений для прямого и для обращенного процесса и др.

Отметим теперь сущность статистической точки зрения — окончательного результата исследований Больцмана — наиболее завершенной формы классических представлений. Статистическая точка зрения основана на вероятностных предположениях о законе распределения микросостояний внутри выделенной макроскопическим опытом области фазового Г-пространства, т. е., можно сказать, на вероятностных предположениях о распределении начальных микроскопических состояний, совместимых с результатами исходного макроскопического опыта. Этот результат совпадает с тем, к которому привели рассуждения § 2. Но здесь ему придан более определенный вид: в статистической интерпретации исходят из равновероятности микросостояний выделенной области Г-пространства.

§ 5. В § 2 и 4 говорилось о тех вероятностных предположениях, которые необходимо сделать, если основывать физическую статистику на представлениях классической механики. Эти предположения были сделаны Больцманом. В настоящем параграфе речь будет итти о необходимости дополнить схему Больцмана некоторым общим утверждением, относящимся ко всем системам, которые подчиняются физической статистике. Это утверждение заключается в следующем: все системы, подчиняющиеся общим законам физической статистики, являются системами размешивающегося типа. Об этом условии еще много будет говориться (гл. V и VI). Пока приведем здесь не претендующее на полную точность определение введенного понятия и краткое доказательство сделанного сейчас утверждения.

Системами размешивающегося типа называются системы, обладающие следующим свойством: любая область M_0 фазового пространства системы изменяется в соответствии с уравнениями движения так, что, сохраняя свою меру (т. е. объем по теореме Лиувилля) и свою связность (в силу непрерывности уравнений движения), она деформируется таким образом, что мера той ее части, которая оказывается в любой, заранее фиксированной области заданного слоя фазового пространства, стремится при возрастании времени к тому, чтобы стать пропорциональной мере этой заранее фиксированной области. Под заданным слоем фазового пространства подразумевается здесь та часть фазового пространства, которая выделяется при задании начальной области M_0 значениями так называемых «однозначных» интегралов движения (об этом понятии, очень неточном, см. в гл. VI). Иначе говоря, в размешивающихся системах точки начальной области M_0 стремятся при возрастании времени к равномерному распределению на поверхности однозначных интегралов движения.

Известно, что необходимое для статистики «эргодическое» распределение вероятностей (см. § 1) предполагает, что существует лишь один однозначный интеграл — интеграл энергии. Не останавливаясь на вопросе о механической характеристике таких систем (в гл. VI будет показана их возможность), будем исходить в дальнейшем из определения размешивающихся систем, как таких, в которых размешивание происходит на поверхности заданной энергии (с мероопределением $\frac{d\Omega}{\operatorname{grad} \varepsilon}$, где $d\Omega$ — элемент поверхности).

В статистической физике понятие размешивания, повидимому, появилось впервые у Гиббса [7]. Но у Гиббса не было дано общего определения этого понятия и роль представления о размешивании сводилась к иллюстрации (при помощи известного примера с перемешиванием краски) взглядов Гиббса на необратимость. В дальнейшем это понятие встречалось у Пуанкаре [2, 3], особенно подчеркивавшего его важность для применения вероятностных представлений (см. § 18). В курсе Бореля [8] это понятие нашло систематическое применение. Однако до сих пор не был выяснен вопрос о связи размешивания и динамических свойств реальных объектов статистической механики, а также не было дано доказательства необходимости размешивания для применимости статистической механики. О первом вопросе говорится в гл. VI. Краткое доказательство (подробнее см. гл. V и VI) необходимости размешивания дано ниже.

а) В системах, описываемых статистической механикой, при любом начальном состоянии M_0 вероятность обнаружить некоторое состояние M_1, после достаточно большого времени (времени релаксации, зависящего, конечно, от рассматриваемых величин, т. е. от состояний M_1 и M_0) определяется, как известно, формулой $w_1 = Ce^{\frac{s_1}{k}}$, где s_1— энтропия состояния M_1, а C — постоянная, не зависящая ни от выбора M_1, ни от выбора M_0 (см. § 1). При этом энтропия s_1 состояния M_1 определяется формулой $s_1 = k \ln \Delta\Gamma_1$, где $\Delta\Gamma_1$— соответствующая состоянию M_1 область в фазовом Г-пространстве системы, точнее — соответствующая состоянию M_1 область поверхности заданной энергии, с указанным в § 1 эргодическим мероопределением.

Указанная последней формулой связь энтропии и величины области фазового пространства (т. е. вероятности состояния) устанавливается общеизвестным путем для так называемых квазиравновесных состояний системы, т. е. таких состояний, при которых система может быть разделена на части, находящиеся «сами по себе» во внутреннем равновесии. Затем эта формула может быть, как известно, обобщена и на любые неравновесные состояния систем. Получающееся при этом обобщение самого понятия энтропии проводится в полном соответствии с представлениями Больцмана (см., например, курс статистической механики Бореля [8] или изложение этого вопроса у Планка [5], [6]). Такое обобщение, в частности, может удовлетворить той части критических замечаний Фаулера [9], которая сохраняется, если с самого начала определить энтропию как $k \ln \Delta\Gamma$.

Следует особенно подчеркнуть, что основная формула для вероятности состояния (формула для вероятности флюктуаций) имеет универсальный характер и не допускает никаких ограничений — ни в отношении выбора начального состояния M_0, ни в отношении выбора последующего состояния M_1. Смысл, придаваемый этому утверждению, был объяснен в § 1. Если бы оно не было справедливо, то формула для вероятностей флюктуаций не оказывалась бы правильной во всех опытах без исключений.

Пусть рассматриваемая нами система не является системой размешивающегося типа. Тогда мы должны допустить, что в фазовом пространстве системы, вообще говоря, существуют такие две области M_0 и M_1, что точки области M_0 вообще не попадают в M_1 (во всяком случае, начиная с некоторого момента времени); тогда вероятность обнаружить состояние M_1, исходя из M_0, равна нулю, и не определяется формулой $Ce^{\frac{s_1}{k}}$. Очевидно, что эта формула не будет выполняться и в том, совершенно частном случае, если точки M_0 попадают в каждую из областей, но в пределе при возрастании времени не стремятся к равномерному распределению в фазовом пространстве [если, конечно, не предположить, вопреки обычному допущению о равномерности распределения вероятности внутри начальной области M_0 (см. § 4), что распределение неравномерно, и притом в случае каждой данной системы таково, что компенсирует неравномерность распределения точек M_0 по фазовому пространству; такое предположение совершенно нелепо]. Таким образом, р а з м е ш и в а н и е   н е о б х о д и м о   д л я   с у щ е с т в о в а н и я   р е л а к с а ц и и физических систем, т. е. для с у щ е с т в о в а н и я после времени релаксации независимого от начального состояния в е р о я т н о с т н о г о   з а к о н а распределения состояний, определяемого формулой флюктуаций.

б) В размешивающихся системах время релаксации определяется как время, в течение которого начальное состояние M_0 «размешается» в достаточной степени, т. е. в течение которого исчезнут следы начального состояния в том отношении, что новые состояния будут осуществляться с вероятностями $Ce^{\frac{s_i}{k}}$, где C не зависит от M_0.

Это время зависит и от рассматриваемой физической величины и от точности, с которой эта величина измеряется; различные возможные результаты измерения этой величины определяют разбиение фазового пространства на области M_1. Так, например, время релаксации зависит от того, рассматриваем ли мы релаксацию по температурам или по давлениям, и от того, с какой точностью будем мы, например, измерять температуру: с точностью ли в 1° или с точностью в 0.001°. Каждому определенному выбору рассматриваемой величины и типа ее измерения (например, выбору измерения температуры двух частей системы с точностью 0.001°) соответствует свое разбиение фазового Г-пространства системы на области M_1 (например, в указанном случае подавляющая часть фазового пространства будет соответствовать состоянию, при котором разность температур двух частей меньше 0.001°, т. е. при данном типе измерения — равновесному состоянию; следующая по величине часть фазового пространства будет соответствовать разности температур частей, заключенной между 0.001° и 0.002°, и т. д.). Следовательно, каждому выбору типа измерения соответствует свое время релаксации,— то время, после которого доля точек области M_0, попавшая в каждую из областей M_1, начнет достаточно мало отличаться от доли, соответствующей равномерному распределению этих точек по фазовому пространству. Время релаксации зависит, конечно, в общем случае и от выбора начального состояния M_0.

О понятии времени релаксации для размешивающихся систем говорится подробнее в гл. V. Там показано, при каких ограничениях, накладываемых на область M_0, это время согласуется по величине с временами, наблюдаемыми на опыте.

И, в частности, показано, что возможность такого согласия связана с тем, что точки начальной области M_0 чрезвычайно быстро расходятся в фазовом пространстве, так что при обычных типах взаимодействия частей системы взаимные расстояния этих точек возрастают во времени по экспоненциальному закону, иначе говоря, совпадение с опытом обусловлено тем, что время релаксации определяется движением целых областей фазового пространства, а не движением каждой отдельной точки, как в исходной форме эргодической гипотезы.

Предположим, что рассматриваемая система не является размешивающейся системой. Тогда время релаксации обычно определяется (такое определение почти неизбежно в обычной форме эргодической гипотезы) как то время, в течение которого каждая (или почти каждая) из точек поверхности заданной энергии пройдет через все состояния на этой поверхности и проведет в каждом из состояний время, пропорциональное величине области, соответствующей этому состоянию. Аналогично только что сказанному, тип состояний и соответствующих им областей фазового пространства определяется теми величинами, по отношению к которым мы рассматриваем релаксацию. Покажем на примере идеального газа, что вытекающая из такого определения величина времени релаксации совершенно не соответствует тем временам, которые наблюдаются на опыте.

Рассмотрим сначала разбиение слоя заданной энергии фазового пространства на состояния Γ_i, соответствующие областям равной величины,— таким, что каждое из состояний задается интервалом Δp изменения импульса одной молекулы и интервалом Δx изменения координаты. Скорость движения одной молекулы в среднем по фазовому пространству равна $\dot{x} = \sqrt{\frac{kT}{m}}$ и $\dot{p} = \frac{p_0}{\tau}$, где p_0— среднее значение импульса, а τ — время свободного пробега. Будем рассматривать релаксацию лишь в импульсном пространстве (аналогичная задача для систем размешивающегося типа решена ниже; см. диссертацию). Полная скорость изображающей систему точки в импульсном пространстве равна в среднем $\sqrt{\Sigma \dot{p}_i^2} \approx \sqrt{3n}\,\frac{p_0}{\tau}$ (здесь n — число молекул). Число N_p прочих различных состояний Γ_i^p в слое заданной энергии импульсного пространства равно отношению величины этого слоя к величине Γ_i, т. е. равно

$$\frac{(2\pi)^{\frac{3n}{2}} (p_0 \sqrt{3n})^{3n-1} \Delta_\varepsilon p}{(3n-2)(3n-4)\ldots 2\,(\Delta p)^{3n}},$$

где $\Delta_{\varepsilon}p$— неопределенность полного импульса системы, вызванная неопределенностью полной энергии. Как показывает простая оценка (получаемая, например, путем перехода к логарифмам и учета лишь главных членов), время T_p прохождения через все состояния Γ_i^p равно по порядку величины $\tau\left(\frac{p_0}{\Delta p}\right)^{3n}$; результат совершенно естественный, если учесть, что величина поверхности заданной энергии возрастает пропорционально $e^{\frac{s_0}{k}}$, где s_0 — равновесное значение энтропии — величины аддитивной.

Легко видеть, что полученный результат не изменится, если мы будем интересоваться лишь физически различными состояниями, т. е. будем отождествлять состояния, отличающиеся лишь перестановками частиц, но, с другой стороны, будем требовать, чтобы состояния, осуществляемые бо́льшим числом комплексий, посещались изображающей точкой в соответствующее число раз чаще (иначе временно́е распределение состояний не будет подобно микроканоническому). Также не изменится оценка для порядка величины T_p, если мы предположим, что производим не точные, а макроскопические измерения, т. е. отмечаем лишь изменения числа частиц на величину, не меньшую, чем некоторое $\Delta n = \frac{n}{k}$. В этом случае, если $k > \left(\frac{p_0}{\Delta p}\right)^3 = g$, то можно, например, показать, что во всяком случае порядок величины T_p не меньше, чем $\tau g^{n\left(1-\frac{g}{k}\right)}$.

Получаемые таким путем величины T_p настолько огромны, что превосходят все встречающиеся на опыте времена, и, очевидно, они не могут рассматриваться как времена релаксации статистических систем. Поэтому, исходя из обычной формы эргодической гипотезы, нельзя дать правильного определения времени релаксации. Как уже говорилось, такое определение может быть дано на основе представления о статистических системах как системах размешивающегося типа.

Отметим еще по этому же поводу следующее: размешивание в импульсном и в конфигурационном пространстве происходит одновременно, как бы параллельно друг другу, так что время релаксации и по координатам и по импульсам определяется просто наибольшим из двух времен релаксации, что физически совершенно естественно. Однако с точки зрения обсуждаемого здесь представления о времени релаксации $T_{p,q} \sim N_{p,q}$, т. е. пропорционально полному числу состояний в слое заданной энергии фазового пространства. В то же время $N_{p,q} \sim N_p N_q$, так что $T_{p,q} \sim N_p N_q$, что, очевидно, противоречит обычному физическому представлению о времени релаксации.

К тому же выводу, что и в п. а и б, можно притти даже без детального математического рассмотрения, исходя из факта существования распределения Гиббса для каждой из малых частей системы, если не делать слишком искусственных предположений о динамических свойствах системы. Как известно, каноническое распределение Гиббса, с одной стороны, описывает относительную длительность состояний малых частей системы за достаточно длинный по сравнению со временем релаксации промежуток времени (временной ансамбль), а с другой стороны, описывает вероятностный закон распределения состояний любой из малых частей системы в определенный момент времени, взятый по истечении времени релаксации (любой из малых частей системы, но не всех частей одновременно, так как распределения частей по энергиям не независимы). Известно также, что микроканоническое распределение для системы в целом приводит к каноническому распределению для ее малых частей.

Рассмотрим сначала временной ансамбль s системы в целом (происходящий из какой-нибудь области начальных состояний). Этот ансамбль определит, очевидно, временные ансамбли всех частей системы. Будем предполагать, что порождаемые им временные ансамбли малых частей гиббсовы. Тогда определяемая ансамблем s вероятность осуществления таких состояний системы в целом, при которых энергия i-й части $= \varepsilon^i$ заключена в любых данных пределах, равна вероятности тех же состояний, определяемой микроканоническим ансамблем (M). Иначе говоря, если рассматривать ε^i как координату в фазовом пространстве целой системы, то плотность вероятности микроканонического ансамбля и ансамбля s должны быть одинаковыми функциями координаты ε^i; т. е., говоря точнее, если обозначить через $mM(\varepsilon^i)$ меру той части микроканонического ансамбля, которая соответствует состояниям с энергией i-й части, меньшей чем ε^i, а через $ms(\varepsilon^i)$ — соответствующую величину для ансамбля s, то производные $\frac{\partial mM(\varepsilon^i)}{\partial \varepsilon^i}$ и $\frac{\partial ms(\varepsilon^i)}{\partial \varepsilon^i}$ должны быть пропорциональны при всех ε^i. Предположим, что на поверхности заданной энергии существуют некоторые области s_1, не принадлежащие ансамблю $s(s + s_1 = M)$. Тогда мы должны будем считать, что производная $\frac{\partial ms_1(\varepsilon^i)}{\partial \varepsilon^i}$ также пропорциональна $\frac{\partial mM(\varepsilon^i)}{\partial \varepsilon^i}$ [при $\varepsilon^i = 0$ величина $M(\varepsilon^i) = s(\varepsilon^i) = s_1(\varepsilon^i) = 0$]. Предположение о существовании таких областей s_1 кажется чрезвычайно искусственным. Более наглядно: мера той части этих областей, которая заключена между двумя любыми координатными гиперповерхностями $\varepsilon^i = \text{const}$, должна быть пропорциональна мере всей области поверхности заданной энергии, заключенной между этими же двумя координатными гиперповерхностями.

Но в этом направлении можно пойти еще дальше. Если не принадлежащие ансамблю s области s_1 существуют, то свойство, полученное нами для i-й части, должно относиться и к любой малой части системы: s_1 одновременно должны обладать всеми такими свойствами. Далее, так как объединение двух и даже многих малых частей системы также может быть малой частью, то аналогичные предшествующим результаты должны быть справедливы и для производных многих порядков: $\frac{\partial m s_1 (\varepsilon^i \cdots \varepsilon^k)}{\partial \varepsilon^i \cdots \varepsilon^k}$ должна быть пропорциональна $\frac{\partial m M (\varepsilon^i \cdots \varepsilon^k)}{\partial \varepsilon^i \cdots \varepsilon^k}$ и т. д. Соответственно, меры частей s_1, заключенных между любым сочетанием пар координатных линий $\varepsilon^i \ldots \varepsilon^k$, должны быть пропорциональны полной величине соответствующей «клетки» поверхности заданной энергии. Отметим еще, что все сказанное выше должно относиться не только к координатам, являющимся энергиями малых реальных частей системы (т. е., если говорить, например, об идеальном газе, для молекул или групп молекул), но и по отношению к другим формально введенным координатам, удовлетворяющим лишь требованию, что распределение вероятностей по ним гиббсово (например, введение линейных комбинаций импульсов молекул идеального газа, как новых переменных, приводит к сохранению выражения полной энергии газа в виде суммы членов, каждый из которых зависит лишь от одной переменной, т. е. к необходимой для канонического распределения аддитивности энергии).

Наконец, количество условий, налагаемых на области s_1, можно еще увеличить, если исходить из требования выполнения гиббсова распределения, рассматриваемого не только как распределение малых частей по энергиям, но и как распределение малых частей по их фазовому пространству, т. е. считать, что для каждой малой части гиббсова формула должна выполняться и в той форме, в которой она указывает вероятность осуществления каждого $d\Gamma_i$, а не только всего слоя энергии $d\varepsilon^i$.

Резюмируем сказанное выше: если мы предположим, что временно́й ансамбль s не совпадает с микроканоническим, то из факта существования гиббсова распределения мы должны будем заключить, что не входящие в s части поверхности заданной энергии образуют области s_1, обладающие в высшей степени частными свойствами. Действительно, части этих областей, заключенные внутри любой пары координатных гиперповерхностей или даже заключенные внутри любой «клетки», образованной любой совокупностью пар координатных гиперповерхностей (лишь бы сумма энергий, соответствующих этим координатам, была мала по сравнению с общей энергией), должны быть пропорциональны по мере тем частям поверхности заданной энергии, которые лежат внутри соответствующих гиперповерхностей. Кроме того, эти свойства должны сохраняться при широком произволе в выборе координатных систем. Даже если не ставить вопрос о том, могут ли вообще существовать области с такими свойствами, следует заключить, что предположение об отсутствии таких областей s_1 (и следовательно, о микроканоничности s) гораздо проще, чем предположение о том, что существуют такие области s_1. Микроканоничность временно́го ансамбля, рассматривавшаяся иногда как очень частное свойство динамических систем, оказывается гораздо более общим предположением, чем те, которые необходимо принять, если отказаться от микроканоничности.

Очевидно, что в некотором макроскопическом смысле микроканоничность s является прямым следствием сказанного выше. Действительно, при оценке вероятности областей, содержащих целиком названные выше «клетки», заведомо будет получена микроканоничность: вероятности их будут пропорциональны их мерам. Заметим, что точность всего сказанного ограничивается лишь тем, что мы пренебрегаем той ничтожно малой частью поверхности заданной энергии, где малая часть системы уже не может считаться распределенной по энергии канонически (частью, характеризуемой, грубо говоря, тем, что там уже нельзя считать энергию малой части значительно меньшей, чем полная энергия). Мы пренебрегаем также тем, что сама формула Гиббса следует из микроканонического распределения лишь асимптотически при $n \to \infty$, т. е. тем, что даже при достаточно малых отклонениях энергии малой части от ее среднего значения формула Гиббса верна лишь с точностью до членов порядка $\frac{1}{\sqrt{n}}$. Легко видеть, что эти пренебрежения вполне допустимы.

До сих пор речь шла о временно́м ансамбле системы. Сделанный вывод мы получили, исходя из утверждения, что малые части системы распределены по энергиям во времени канонически. Совершенно аналогичные рассуждения применимы к ансамблю, изображающему распределение вероятностей системы в данный, достаточно удаленный момент времени. При этом следует исходить из того, что малые части распределены в данный момент по энергиям согласно каноническому вероятностному закону. Действительно, пусть в каждый данный момент после достаточно большого времени T распределение малых частей по энергиям с заданной степенью точности будет каноническим (причем степень точности будет возрастать с возрастанием времени T). Тогда гораздо более общим типом динамических систем будут системы размешивающегося типа, а не системы, в которых будут существовать такие фиксированные области s', что при сколь угодно больших временах вероятности осуществления этих областей будут равны нулю. Об этих областях s' может быть сказано все то, что было сказано об области s_1 в случае временнóго ансамбля.

Таким образом, исходя лишь из одного факта гиббсовского распределения, совершенно независимо от основных аргументов п. а и б, можно заключить, что размешивания могло бы не быть лишь в очень частных случаях (мы оставляем сейчас в стороне вопрос о том, могут ли вообще быть такие случаи).

§ 6. Все сказанное в § 5 было доказательством необходимости размешивания. Сделаем сейчас несколько замечаний о необходимости определенных представлений о динамической природе статистических систем, а также о соотношении размешивания и эргодичности.

Заключение о размешивающемся характере статистических систем является следствием представлений о релаксации. Следует отметить, что существуют еще более общие соображения, указывающие на ошибочность одной распространенной точки зрения. Мы имеем в виду точку зрения, согласно которой для применимости физической статистики, кроме принципа равновероятности начальных микросостояний (см. § 4), достаточно самых общих свойств динамических систем вместе с единственной дополнительной характеристикой фазового пространства, состоящей в том, что подавляющее большинство траекторий, исходящих из заданной макроскопической области, приводит к более равновесному состоянию (см. § 4). Такая точка зрения позволяет объяснить возрастание энтропии в ближайшем будущем, но ничего не может дать для определения поведения системы за длинные промежутки времени, и, в частности, для определения характера временнóго ансамбля системы и асимптотического — при больших временах — состояния системы (состояния релаксации). В рамках такой точки зрения, кроме того, невозможно объяснить, почему статистика применима к одним системам и не применима к другим, т. е. *невозможно определить границы приложимости физической статистики*. Например, не может быть дан ответ на вопрос о том, почему части какого-нибудь сложного механизма (например, механического станка, очевидно целиком подпадающего под условия, на которых основана рассматриваемая точка зрения), не имеют во времени гиббсовского распределения по энергиям, или на вопрос о том, почему не устанавливается статистическое равновесие внутри неравномерно движущихся систем.

Легко видеть, что все перечисленные недостатки этой точки зрения порождаются тем, что она не содержит никаких указаний на динамический характер статистических систем (см. также § 11). В частности, по этой же причине не находит ответа и последний вопрос. Действительно, с точки зрения, основанной на размешивании, установление равновесного состояния с подавляющей вероятностью следует из возникновения равномерного распределения вероятностей на поверхности заданной энергии, связанного с равномерным размешиванием по этой поверхности. Изменение внешних условий приводит к изменению предельного распределения вероятностей, и если время релаксации больше времени заметного изменения внешних условий, то равновесие не успевает устанавливаться.

Таким образом,— это важно отметить для дальнейшего,— равномерное распределение вероятностей на поверхности заданной энергии, вообще говоря, не существует в начальный момент, а возникает (если ускорение перестает изменяться) после времени релаксации. Этот вывод целиком соответствует фактам опыта. С обсуждаемой точки зрения (мы находим ее поэтому совершенно недостаточной) нет самого понятия о зависимости предельного распределения вероятностей от внешних условий, так как нет понятия о переходе к предельному распределению вероятностей.

Наиболее распространенной формой предположения о динамическом характере статистических систем является эргодическая гипотеза. Пункты а и б § 5 (так же как и следствия, вытекающие из того факта, что в каждый данный момент после времени релаксации распределение вероятностей различных значений энергии гиббсово) показывают неудовлетворительность этого предположения: эргодическая гипотеза не может привести к правильному понятию о релаксации. Она не может дать независимости состояния, наступающего после времени релаксации от начального состояния — независимости, выражаемой существованием формулы для флюктуации: $e^{\frac{s}{k}}$ (конечно, требуется независимость лишь по отношению к определенным величинам — тем, по которым произошла релаксация). Основываясь на этой гипотезе, распределению вероятностей, наступающему после времени релаксации, можно придать смысл лишь распределения относительных длительностей соответствующих состояний за огромные, не имеющие физического смысла промежутки времени. Именно поэтому статистические системы должны быть системами размешивающегося типа.

Отметим мимоходом, что существующие математические теории эргодических систем носят обычно качественный характер и могут поэтому показать эргодический характер временно́го ансамбля, образованного лишь за неограниченно большие промежутки времени ($t \to \infty$), а не за ограниченное время $T_{p,g}$ (см. п. 6 § 5), являющееся некоторым минимальным временем, необходимым для того, чтобы временно́й ансамбль получил эргодический характер. Время $T_{p,g}$, будучи в этом смысле минимальным, будет огромным, как бы ни было выбрано начальное состояние, порождающее временно́й ансамбль. Начальное состояние может задаваться не только точкой, что обычно считается достаточным для приложимости эргодической гипотезы, но и областью, причем областью, вообще говоря, не обязательно малой. Это легко видеть, если взять пример области, приблизительно сохраняющей свою начальную простую форму. В противоположность этому, в размешивающихся системах, если начальная область не будет слишком малой, время релаксации τ будет иметь физически вполне разумную величину, в огромное число раз меньшую, чем $T_{p,g}$ (см. п. 6 § 5 и гл. V). Иначе говоря, существующие теории эргодичности не показывают быстроту того приближения к пределу, которое, согласно выводам из этих теорий, справедливо при $t \to \infty$.

Следует отметить, что системы, обладающие всеми свойствами систем размешивающегося типа (т. е. обладающие тем свойством, что любой объем фазового пространства — сколь угодно малой величины и любой формы — стремится при неограниченно возрастающем времени к равномерному распределению по поверхности заданной энергии), являются всегда эргодическими системами. Это следует, например, в общей форме из спектральной теории операторов динамических систем: для размешивания необходимо, чтобы $s = 0$ было простым и единственным собственным значением унитарного оператора преобразования фазового пространства; для эргодичности достаточно, чтобы $s = 0$ было простым собственным значением [10].

В то же время в теории, целиком основывающейся на представлениях классической механики, необходимо допустить, что статистические системы являются размешивающимися в полном смысле этого слова. Действительно, с чисто классической точки зрения результатом начального опыта может быть любая, сколь угодно малая область фазового пространства; требование релаксации приводит нас к требованию размешивания этой, сколь угодно малой области. Таким образом, в чисто классической теории наличие свойства релаксации влечет за собой требование эргодичности. То же можно видеть, если рассмотреть временно́й ансамбль, образуемый траекторией, исходящей из определенной точки фазового пространства (что в классической теории вполне законно). Этот временной ансамбль, даже образуемый за сколь угодно большое время, только в том случае будет приводить к выполнению формулы для флюктуаций, если он будет эргодическим, т. е. только в том случае, если система будет эргодической. Таким образом, введение размешивания в чисто классическую теорию влечет за собой эргодичность. Отметим здесь же, что для микроскопической интерпретации релаксации существенны те черты размешивающихся систем, которые выходят за пределы эргодичности, т. е. не содержатся в понятии эргодичности. Поэтому в теории, отказывающейся от чисто классических представлений (см. гл. V), будет возможно удовлетворить основным утверждениям статистики, удерживая лишь эти черты размешивающихся систем, а именно, исходя из требования, чтобы в статистических системах размешивались лишь достаточно большие области. Подобные представления о размешивании уже не влекут за собой эргодичности.

§ 7. В § 5 было показано, что предложенная Больцманом схема микроскопической интерпретации статистической физики должна быть дополнена некоторым общим утверждением о динамическом характере статистических систем: статистические системы должны быть системами размешивающегося типа. После этого вся основанная на классической механике схема получает полную законченность. Следует лишь еще подчеркнуть, что возникающая таким образом механическая интерпретация статистики должна включать в себя некоторое общее определение макроскопического измерения. Это понятие не было достаточно подчеркнуто в старых работах, может быть, именно из-за отсутствия представления о размешивании.

Необходимость понятия макроскопического измерения связана, например, с тем, что энтропия, определяемая как логарифм области фазового пространства, конечно, вообще не будет возрастать, если определять область, входящую в выражение энтропии, как область $\Delta\Gamma_t$, происходящую из начальной области $\Delta\Gamma_0$ через время t (и равную ей по величине, в силу теоремы Лиувилля). Легко видеть, что приведенный парадокс не возникает, если учесть, что понятие энтропии является понятием, непосредственно связанным с определенным типом макроскопического измерения. Действительно, данное макроскопическое измерение может иметь ряд возможных результатов, каждому из которых соответствует определенная «макроскопическая» область фазового пространства (это было пояснено в п. б § 5). Различные, возможные при данном макроскопическом измерении значения энтропии, равны логарифмам этих областей, и результат опыта дает возможность установить, какое из этих значений осуществляется в действительности.

В ходе размешивания «начальной» области $\Delta\Gamma_0$ все бóльшие и бóльшие «макроскопические» области становятся наиболее вероятными вплоть до установления более или менее равномерного распределения частей области $\Delta\Gamma_0$ по всей поверхности заданной энергии, при котором с подавляющей вероятностью мы получим в результате измерения наибольшую из «макроскопических» областей — равновесное состояние (см. § 5). Этот процесс соответствует возрастанию энтропии до максимума. Именно такое представление имел в виду Гиббс, когда он писал о перемешивании краски в жидкости [7] и об установлении равномерного окрашивания для наблюдателя с ограниченной «разрешающей силой». Если задать некоторый ансамбль непрерывно распределенных в фазовом пространстве систем, то, как известно, точная («тонкая» по Эренфесту [1] или, как иногда говорят, «микроскопическая») плотность в каждой данной движущейся точке не изменяется, «грубая» же («макроскопическая») плотность стремится стать равномерной.

Совершенно аналогично положение и в общем вопросе о релаксации: для каждого типа измеряемых макроскопических величин существует свое время релаксации, вообще говоря, тем большее, чем меньше будут области фазового пространства, соответствующие возможным результатам измерения этой величины. Время релаксации будет также тем больше, чем «сложнее» формы этих областей, т. е. чем менее «грубы» соответствующие измерения. С другой стороны, для каждого, сколь угодно большого времени t при данном начальном состоянии $\Delta\Gamma_0$ будут существовать такие величины, по которым релаксация еще не произошла. Например, очевидно, что для каждого данного t такими величинами будут величины, возможные результаты измерения которых разбивают фазовое пространство на область $\Delta\Gamma_t$ и на дополнительную область. В частности, при сколь угодно большом t вероятность найти систему в области $\Delta\Gamma_t$ не будет пропорциональна величине области $\Delta\Gamma_t$, как следовало бы по формуле флюктуаций, а будет равна единице, вероятность же обнаружить систему в дополнительной области будет равна нулю.

По существу, в определении макроскопического измерения важно не наличие той или иной степени «грубости» измерения, т. е. той или иной величины областей фазового пространства и той или иной простоты формы, а само условие, что тип измерения заранее ф и к с и р о в а н. Степень «грубости» определяет лишь величину времени релаксации, существование же релаксации гарантируется наличием размешивания, коль скоро точно определена та, не зависящая от времени величина, по отношению к которой рассматривается релаксация. Сказанное вполне соответствует упомянутому выше различию свойств «тонкой» и «грубой» плотности.

Следует иметь в виду, что никогда в результате одного измерения мы не можем установить ни тонкой, ни грубой плотности; мы устанавливаем лишь то, принадлежит ли состояние системы к той или иной из областей M_i. Эти области имеют меру, отличную от нуля, и потому определяемая нами при помощи многих опытов плотность вероятности оказывается «грубой» плотностью. В силу размешивания эта «грубая» плотность, начиная с достаточно удаленного момента, делается достаточно равномерной. В процессе релаксации размешивающаяся область $\Delta\Gamma_0$ захватывает, начиная с некоторого момента, все бóльшие области. Наибольшая вероятность соответствует наибольшей из захваченных областей M_i. Производимое в достаточно поздний момент измерение с подавляющей вероятностью дает область M_i большей величины, чем начальное измерение; это положение соответствует H-теореме. Об особенности его еще будем говорить (см. следующий параграф).

§ 8. Как уже говорилось выше, больцмановская схема микроскопической интерпретации статистики, соединенная с тезисом о размешивающемся характере статистических систем, получает вполне законченный вид. Возникающая таким образом теория основана на применении к динамическим системам названного типа определенных вероятностных представлений (см. § 2—4). Эта теория является наиболее полным выражением всех тех возможностей, которые предоставляются классической механикой для истолкования физической статистики. Она позволяет, исходя из ее принципов, получить все обычно употребляемые формулы физической статистики. В частности, она позволяет получить главную часть и тех основных утверждений статистической физики, которые были отмечены в § 1; принадлежащая этой теории интерпретация процесса релаксации в достаточной мере была объяснена раньше (§ 5—7); теорема о средних во времени значениях физических величин является прямым следствием эргодичности, вытекающей из размешивающего характера систем (см. § 6). Однако следует сделать несколько замечаний по поводу некоторых характерных черт, которые приобретают эти основные постулаты § 1 в рассматриваемой картине.

Возникающее здесь время релаксации зависит не только от типа измерения, устанавливающего релаксацию, но и от начального состояния системы — начальной области $\Delta\Gamma_0$ — ее величины и формы, т. е. от типа измерения, устанавливающего начальное состояние (так как это последнее измерение определяет вид областей $\Delta\Gamma_0$ фазового пространства, соответствующих возможным результатам измерения). Чем меньше $\Delta\Gamma_0$, тем больше, вообще говоря, соответствующее время релаксации (рассматриваемое для одного и того же «проверочного» измерения, констатирующего релаксацию). Легко видеть, что при заданном типе «проверочного» измерения время релаксации может быть сколь угодно большим, если взять достаточно малое $\Delta\Gamma_0$. Также легко видеть, что процесс релаксации может совершенно не быть монотонным. Если начальное $\Delta\Gamma_0$ принадлежит области M, сравнительно близкой к равновесию или вполне равновесной (все рассматривается при заданном типе проверочного измерения), то вполне возможно, что через сколь угодно большое время t все точки начального $\Delta\Gamma_0$ соберутся в область N, крайне неравновесную, и лишь после этого постепенно будут равномерно размешиваться по поверхности заданной энергии.

Для того чтобы получить такой ход релаксации, очевидно достаточно выбрать $\Delta\Gamma_0$ следующим образом. Рассмотрим область N_t, происходящую из N через время t_t; область N_t будет при всех достаточно больших t иметь часть O, принадлежащую M (это гарантируется размешиванием). В качестве $\Delta\Gamma_0$ следует взять область O_1, получаемую из этой части (или какой-нибудь доли этой части) путем обращения всех скоростей при неизменных координатах. В силу обратимости уравнений классической механики мы получим требуемый ход релаксации. В частности, отсюда вытекает, что в рассматриваемой картине H-теорема может и не выполняться: из $t_2 > t_1$ еще не вытекает с подавляющей вероятностью, что $s(t_2) > s(t_1)$. Для того чтобы в этом убедиться, достаточно принять область O_1 за начальное состояние; в этом случае через время t энтропия заведомо убудет.

Об этих особенностях классической теории еще говорится ниже (см. § 17). Сейчас мы извлечем из доказанной возможности нарушения H-теоремы следующее следствие: излагаемая теория, для того чтобы дать интерпретацию статистики, должна наложить на начальные области $\Delta\Gamma_0$ некоторые ограничения. Эти области должны иметь достаточно большую величину и достаточно простую форму, чтобы процесс размешивания, т. е. процесс релаксации, имел монотонный характер, и чтобы, следовательно, нарушения H-теоремы не могли встречаться. Действительно, примеры нарушения монотонного хода релаксации показывают, что в этих случаях мы имеем дело с начальными областями $\Delta\Gamma_0$ или очень сложной формы, или очень маленькими.

В приведенном примере именно в силу размешивающегося характера движения область N_t, произошедшая за макроскопическое время t из области N, будет иметь крайне сложную форму. Следовательно, будут иметь сложную форму также и области O и O_1, а части O_1, которые имели бы простую форму, именно в силу сложности O_1 были бы очень малы.

При сделанном ограничении, накладываемом на области начальных состояний, и при упомянутом в § 4 принципе равновероятности точек этих областей мы получаем в этой схеме, как нетрудно убедиться, удовлетворение всех физических требований, предъявляемых к релаксации и H-теореме. В частности, при этом отпадает и новая форма многократно выдвигающегося возражения обратимости (см. § 17). Это уже отмечалось в § 3, когда говорилось о возражениях против больцмановской теории. Нетрудно видеть, что без этих ограничений и допущений возражение обратимости не могло бы быть устранено. Приведенный способ устранения этого возражения точно в такой форме, как здесь, может быть нигде не был изложен. Но он является наиболее простым способом согласования возможностей классической механики и относящихся к релаксации фактов опыта и, повидимому, похожим образом понимался, например, Пуанкаре (см. § 17).

Ограничения, накладываемые на начальные области, в классической теории являются некоторыми чуждыми основам теории требованиями, необходимыми для согласования с законами физической статистики. Эти ограничения означают, что начальный опыт может лишь установить, принадлежит ли микросостояние системы к той или иной из достаточно больших областей достаточно простой формы. Иначе говоря, они означают, что начальное измерение настолько «грубо», что оно не может установить, принадлежит ли микросостояние системы к какой-либо из «аномальных» областей, осуществляющей противоречащее второму началу движение системы и, следовательно, обладающей очень малой величиной или очень сложной формой. Однако по истечении некоторого макроскопического времени τ может оказаться, что, в противоречии со вторым началом, осуществится макроскопическое состояние, менее равновесное, чем начальное. Принятое нами ограничение начальных областей не исключает такой возможности, и, следовательно, возможности после времени τ заключить, что в начальный момент осуществлялась одна из точек «аномальной» области. Но в силу принятого нами принципа равновероятности точек «начальной» области, содержащей «аномальную» область как свою очень малую часть, вероятность такого течения процесса будет совпадать с обычно определяемой вероятностью соответствующей флюктуации.

О значении в классической теории принятого нами ограничения «начальных» областей говорится еще в § 17. В дальнейшем (см. гл. V) будет показано, что подобные ограничения появятся как следствие учета возможностей измерения. Там же будут более подробно охарактеризованы те свойства размешивания в фазовом пространстве, которые существенны для явлений релаксации.

Все сказанное до сих пор в этом параграфе относилось к характеристике принципиальных возможностей, предоставляемых классической механикой для интерпретации статистики. Отметим сейчас один хорошо известный недостаток, присущий всем проводившимся до сих пор многочисленным исследованиям по эргодическим системам: отсутствие эффективного критерия, который позволил бы судить, принадлежит ли физическая система к тому или иному из математически определяемых классов динамических систем. Это, конечно, не принципиальный недостаток классической механики, а недостаток того направления, в котором до сих пор развивались такие исследования. Даже после исследований Биркгофа в 1931 г. [11] и появления многих замечательных работ, указанный недостаток продолжает сохраняться. В частности, существующие исследования не дают возможности установить не только точную, но и приближенную, качественную связь между теми или иными свойствами эргодичности динамических систем (например, свойствами спектра унитарного оператора движения) и типом гамильтониана.

§ 9. Настоящий параграф содержит некоторые замечания, относящиеся к теории Гиббса. В § 8 были указаны основные черты той, опирающейся на классическую механику теории, которая осуществляет максимальные возможности, предоставляемые классической механикой. Такая теория основана на утверждении, что статистические системы являются размешивающимися, на внесении в классическую механику вероятностных предположений и на допущении, что начальные области, получающиеся в результате начального опыта, имеют некоторую минимальную величину и достаточно простую форму (допустимые величины и формы определяются из требования монотонности процесса релаксации, гарантирующей, в частности, и свободу от всяких модификаций возражения обратимости). Цель этого параграфа — показать, что теория Гиббса по отношению к рассматриваемому вопросу о механической интерпретации статистики не представляет никаких преимуществ по сравнению с охарактеризованной в § 8 теорией, а в некоторых пунктах, отличающих эти теории, предложенная Гиббсом интерпретация статистических понятий не соответствует их физическому смыслу. Замечания этого параграфа прерывают последовательность рассуждений, но должны быть сделаны попутно ввиду важности предложенного Гиббсом метода.

Одной из руководящих идей книги Гиббса является идея обобщения полученных Больцманом для идеального газа результатов, выраженных посредством μ-пространства, на системы общего типа. Возникающие при этом понятия выражаются на языке Г-пространства. Подобно тому как энтропия идеального газа определялась у Больцмана формулой — $k\int f \ln f d\mu$ (в случае равномерного максвелл-больцмановского распределения, дающей равновесное значение энтропии), Гиббс определяет являющуюся аналогом энтропии величину $\bar{\eta}$ посредством формулы $\int \rho \ln \rho d\Gamma$, где ρ — соответствующая задаваемому состоянию функция распределения в Г-пространстве. В случае, когда ρ — каноническое распределение Гиббса, величина $-k\bar{\eta}$ оказывается равной равновесному значению энтропии. Но, как отметил Гиббс, величина $\bar{\eta}$ не может непосредственно рассматриваться как аналог энтропии, так как величина $\bar{\eta}$ не изменяется при изолированном изменении системы (или, иначе говоря, при изменении ансамбля изолированных систем, представляющего распределение вероятностей состояний этой системы).

Действительно, как уже отмечалось в § 7, точная (или «тонкая», по Эренфесту) плотность ρ ансамбля изолированных систем в Г-пространстве в каждой данной движущейся точке фазового пространства не изменяется с течением времени. Поэтому интеграл по всему фазовому пространству от любой функции плотности ρ также не будет зависеть от времени. Из-за этого обстоятельства Гиббс от рассмотрения «тонкой» плотности перешел к рассмотрению плотности «грубой» и изучению величины $\Sigma_1 P_\lambda \ln P_\lambda$, где P_λ— среднее значение «тонкой» плотности в ячейке с номером λ. Это выражение является, как легко видеть, с точностью до множителя $\Delta\Gamma_\lambda$ конечной суммой по малым и равным ячейкам $\Delta\Gamma_\lambda$, пределом которой является интеграл $\int \rho \ln \rho d\Gamma$. В то же время очевидно, что эта сумма (обозначаемая Гиббсом наряду с интегралом через $\bar{\eta}$) изменяется во времени и стремится к минимуму при стремлении к равномерному перемешиванию в фазовом пространстве (в том смысле, в каком говорилось в § 5). Эренфест вводит для $\Sigma P_\lambda \ln P_\lambda$ специальное обозначение: Σ. Следует отметить, что ячейки $\Delta\Gamma_\lambda$, по которым производится суммирование, должны быть равными по величине, и, следовательно, эти ячейки совершенно не являются теми макроскопическими областями, которые соответствуют различным возможным исходам макроскопического опыта (см. § 7). В этом случае $\Delta\Gamma_\lambda$ не были бы равны по величине, и, следовательно, сумма $\Sigma P_\lambda \ln P_\lambda$ не отличалась бы от суммы, апроксимирующей интеграл $\int \rho \ln \rho d\Gamma$, лишь постоянным множителем. Также, например, значения Σ, соответствующие наиболее равновесному макроскопическому состоянию и любому из неравновесных состояний, были бы равны друг другу, так как в обоих случаях лишь одно из P_λ было бы равно единице, а остальные были бы равны нулю.

Таковы основные черты предложенной Гиббсом интерпретации понятия энтропии и необратимости. Барбари впервые отметил [1], что данное Гиббсом доказательство того, что $\Sigma(t_2) \geq \Sigma(t_1)$ при $t_2 > t_1$ ошибочно (Гиббс, гл. XII [7]).

В доказательстве нигде не использовались специальные свойства рассматриваемых статистических систем. Как было показано Эренфестом [1], причина ошибочности доказательства заключалась в путанице величины $\bar{\eta}$, определенной при помощи «тонкой» плотности ρ, и величины Σ, определенной при помощи «грубой» плотности P_λ. Существенно, однако, что доказываемое Гиббсом утверждение само по себе не является ложным, и может быть доказано, если учесть специальные динамические свойства статистических систем. А именно, как следует из § 5 и 8, для систем размешивающегося типа (такого типа свойства систем Гиббс и имел в виду, когда в той же главе XII писал о перемешивании краски, хотя и не дал точного определения), при безгранично возрастающем времени Σ стремится к минимуму при любом начальном состоянии. Более того, что стремление может быть сделано монотонным, если ввести соответствующие ограничения (такого же типа, как и ограничения, упомянутые в § 8) начальных состояний системы. В этом отношении теория Гиббса может дать не больше и не меньше, чем та классическая теория, основные черты которой были отмечены в предшествующих параграфах и о которой, в частности, говорилось в § 8.

Теория Гиббса отличается, однако, от такой классической теории тем, что она не дает правильного представления об энтропии. Введенная Гиббсом величина $\bar{\eta}$ или, точнее, подразумеваемая им величина Σ не обладает всеми свойствами энтропии и поэтому не может рассматриваться как аналог энтропии. Действительно, энтропия обладает, очевидно, следующими свойствами: а) она является классической величиной, значение которой может быть определено при помощи макроскопического измерения, произведенного над данной системой; б) более позднее измерение с подавляющей вероятностью (но не с вероятностью, равной единице) дает большее значение энтропии; в) после времени релаксации равновесное значение энтропии осуществляется лишь с подавляющей вероятностью, но и любое другое значение энтропии может быть обнаружено с вероятностью, пропорциональной $e^{\frac{s}{k}}$.

Величина Σ определена так. что свойство п. а будет выполнено лишь при дополнительных предположениях. Макроскопический опыт указывает лишь на то, что изображающая микроскопическое состояние системы точка фазового пространства находится где-то внутри макроскопической области. Ни «тонкая», ни «грубая» плотность не получают еще при этом определенного значения. Для того чтобы после макроскопического опыта придать величине Σ определенное значение, необходимо, очевидно, сделать предположения о величине «грубой» плотности P_λ. Единственным естественным будет предположение о том, что P_λ всех ячеек, лежащих вне выделенной опытом макроскопической области, равны нулю и P_λ всех ячеек, лежащих внутри области, равны по величине и в сумме составляют единицу; при этом величина Σ оказывается пропорциональной логарифму объема макроскопической области. Также необходимы дополнительные допущения для того, чтобы сделать определенными предсказания о последующем (после макроскопического опыта) изменении состояния системы, и, в частности, о последующем изменении величины Σ. Единственным естественным допущением, достигающим этой цели, является допущение равновероятности всех точек внутри макроскопической области. Как легко видеть, при этом допущении (фундаментальное значение которого уже отмечалось в § 4) понятие вероятностей различных дальнейших изменений состояния системы приобретает точный смысл. Одновременно удовлетворяется требование п. а: величина Σ для момента после опыта получает точное значение.

В отличие от свойства п. а, свойства пп. б и в не могут принадлежать величине Σ ни при каких дополнительных предположениях. Действительно, при любой выделенной опытом начальной области изменение ее со временем, а следовательно, и изменение со временем грубой плотности P_λ и величины Σ, определяется совершенно однозначно и отнюдь не носит подчеркнутого в § 1 вероятностного характера (иначе говоря, имеет алгорифм). В частности, если начальная область удовлетворяет отмеченным в § 8 ограничениям, гарантирующим монотонность процесса релаксации, а сама система обладает отмеченными в § 5 свойствами, гарантирующими существование самой релаксации, то величина $-k\Sigma$ будет возрастать с необходимостью, т. е. с вероятностью единица, а не с подавляющей вероятностью,— в прямом противоречии со свойством п. б. Кроме того, какова бы ни была начальная область, даже если процесс релаксации не будет монотонным, после достаточно большого (зависящего от вида начальной области) времени Σ с необходимостью будет отличаться меньше чем на сколь угодно малую величину от своего минимального значения. Это свойство, очевидно, несовместимо со свойством п. в, указывающим на отличную от нуля вероятность, при сколь угодно большом времени, для любого отклонения от состояния равновесия.

Сказанное выше показывает, что введенная Гиббсом величина Σ (обозначаемая им через $\bar{\eta}$) не обладает основными свойствами энтропии и не может рассматриваться как аналог этого понятия. Однако указанное различие распространяется еще дальше. Обычное больцмановское выражение для энтропии $-k\int f \ln f d\mu$ сохраняет смысл и для неравновесных функций распределения f. Для неравновесных состояний это выражение соответствует приведенному в § 5 обобщению понятия энтропии, т. е. оно равно $k \ln \Delta\Gamma$. Гиббсово определение $\bar{\eta} = \int \rho \ln \rho d\Gamma$, давая, как известно, правильное значение равновесной энтропии при каноническом распределении ρ, как будет показано, при ρ — неканоническом перестает совпадать с обычным определением. (Два других гиббсова аналога энтропии $\ln v$ и $\ln \frac{dv}{d\varepsilon}$, где v — объем фазового пространства, заключенный внутри поверхности заданной энергии, дают значение равновесной энтропии, но, очевидно, не могут сохранить смысл для неравновесных состояний с данной энергией.)

Действительно, прежде всего следует отметить, что сама мысль распространить определение энтропии на случаи, когда энергия не имеет точного значения, а задается функцией распределения, выходит за пределы больцмановских представлений. Согласно последним, в этих случаях следовало бы говорить о распределении энтропии $s(\varepsilon)$, соответствующем распределению энергий, а не об одном определенном, соответствующем ансамблю в целом, значении энтропии. Правда, если заданное распределение по энергиям имеет достаточно резкий максимум (как, например, для канонического распределения систем с большим числом степеней свободы) и если упомянутое одно значение энтропии (сопоставляемое со всем ансамблем с заданным распределением энергии) с достаточной степенью точности определяется этим, наиболее вероятным значением энергии, то практически наиболее вероятное значение энтропии может совпасть со значением вновь определяемой энтропии, общей всему ансамблю. Это как раз будет справедливо для гиббсова определения $\bar{\eta} = \int \rho \ln \rho d\Gamma$ в случае, если ρ — каноническая функция распределения. В этом случае $-k\bar{\eta}$, как известно, с большой точностью равно значению энтропии, соответствующему равновесному состоянию системы с энергией, равной наиболее вероятной при заданной функции ρ энергии. Иначе говоря, $k\bar{\eta}$ равно тому же значению энтропии, которое получилось бы по этой же формуле для микроканонического ансамбля, для которого плотность вероятности ρ постоянна в слое приблизительно заданной энергии и равна нулю вне его, причем заданное значение энергии равно средней энергии канонического распределения.

Пусть теперь система находится в состоянии A_1, описываемом ансамблем систем M_1 с неканонической функцией распределения по энергии ρ_1 и пусть ε_1— соответствующая средняя энергия. Покажем, что в этом случае теряется согласие определения по формуле $s = -k\overline{\eta}$ (назовем его для краткости определением II) с обычным больцмановским определением энтропии (назовем его определением I). В силу установленного Гиббсом минимального свойства канонического распределения (см. Гиббс, гл. XI теор. 2), соответствующее ансамблю M_1 значение s_1 энтропии II удовлетворяет неравенству:

$$s_1 = -k\overline{\eta} = -k\int \rho_1 \ln \rho_1 \, d\Gamma < s(\varepsilon_1),$$

где $s(\varepsilon_1)$ — энтропия (и по I и по II) равновесного состояния с энергией ε_1. Рассмотрим систему в состоянии A с энергией ε_1 и значением s_1 энтропии I, т. е. находящуюся в неравновесном состоянии [так как $s_1 < s(\varepsilon_1)$]. Для того чтобы определение энтропии II совпадало с определением I, необходимо, чтобы система A_1, состояние которой описывается при помощи ансамбля M_1 (с энтропией II, равной s_1), могла бы быть обратимо переведена в состояние системы A (с энтропией I, равной той же величине s_1). Однако очевидно, что не только каждое данное измерение, произведенное над системой в состоянии A_1, даст, вообще говоря, такое значение энергии ε', что соответствующее значение энтропии I $s(\varepsilon')$ не будет равно s_1[$s(\varepsilon') = s_1$ при $\varepsilon' < \varepsilon_1$], но что и среднее значение получаемых при таких измерениях значений энтропий I в ансамбле M_1 будет отлично от s_1. Действительно, $\int s(\varepsilon)\rho_1(\varepsilon) d\Gamma \neq s_1 = -k\int \rho_1 \ln \rho_1 d\Gamma$, поскольку ρ_1— негиббсова функция и поскольку при любой возможной энергии ε' системы в состоянии A_1 энтропия I равна $s(\varepsilon')$, т. е. равновесному значению энтропии (точнее говоря, равна с подавляющей вероятностью). Это не выполняется только в том случае, если ансамбль M_1 задан специально неравновесным также по отношению к распределению систем на поверхности заданной энергии. Но, конечно, такая постановка вопроса не имела бы ничего общего с обычной, предложенной Гиббсом (очевидно также, что по отношению к рассматриваемому вопросу, поскольку вообще не рассматривается релаксация на поверхности заданной энергии, совершенно несущественна разница понятий $\overline{\eta}$ и Σ; замена $\overline{\eta}$ на Σ ничего бы не изменила).

К тому же выводу, о несоответствии гиббсова аналога энтропии $-k\overline{\eta}$ обычному понятию энтропии приводит и указание на характер изменения величины $-k\bar{\eta}$ во времени: благодаря неизменности функции распределения по энергии ρ_1 ансамбля M_1, энтропия II, т. е. величина $-k\bar{\eta}$, будет сохранять начальное значение s_1 и не будет приближаться к равновесному значению энтропии II, т. е. к $s(\varepsilon_1)$; это противоречит утверждению H-теоремы о возрастании энтропии изолированной системы. Конечно, для системы в термостате ρ_1 переходит в каноническую функцию, и $-k\bar{\eta}$ становится равным $s(\varepsilon_0)$ (хотя ε_0 может и не совпадать с ε_1). Однако, поскольку H-теорема справедлива для изолированных систем, очевидно, что энтропия II не обладает основным свойством энтропии I — свойством, выражаемым H-теоремой.

Благодаря тому, что $-k\bar{\eta}$ рассматривалась как энтропия, возникла мысль о возможности получить вывод канонического распределения из условия максимума энтропии. Сам Гиббс, показав (в теореме II, гл. XI), что из всех распределений с заданной средней энергией каноническое распределение обладает наименьшим $\bar{\eta}$, не придает своей теореме формы такого вывода. Однако рассматривая в дальнейшем $-k\bar{\eta}$ как аналог энтропии, он дает некоторое основание для такого вывода, после Гиббса многократно делавшегося, а в одном частном вопросе (об адиабатическом изменении внешних условий, см. ниже) сам делает неявно аналогичное заключение.

Из сказанного выше ясно, что подобные выводы лишены физического основания: требование максимальности величины $-k\bar{\eta}$ не может опираться на требование максимальности энтропии, так как $-k\bar{\eta}$ не является энтропией в случае произвольной функции ρ. В больцмановском же выводе максвелловского распределения величина $-k\int f \ln f d\mu$ сохраняла смысл энтропии при любом f, также и не обращающем интеграл в минимум; величина $-k\bar{\eta}$, как показано, совпадает с энтропией лишь при том ρ, которое делает $\bar{\eta}$ минимальным. Иначе говоря, само требование максимальности энтропии справедливо при заданной, а не варьируемой энергии (хотя бы и при условии заданного среднего). Поэтому лишена смысла попытка получить распределение по энергиям, исходя из условия максимальности энтропии: какова бы ни была функция распределения энергии данной системы, при любой из этих энергий система может находиться как в равновесном, так и в неравновесном состоянии, с любым значением энтропии.

Иногда предлагались также выводы гиббсова распределения частей замкнутой системы, основанные на условии максимальности энтропии этих частей при заданной их средней энергии. Такие выводы по аналогичным причинам ошибочны.

Распределение частей системы может быть получено из условия максимума энтропии не части, а системы в целом, и будет при этом иметь смысл наиболее вероятного распределения, а не распределения во времени, что, строго говоря, не одно и то же.

При установлении связи между статистической механикой и термодинамикой Гиббс предполагает (и это предположение в выводе Гиббса не может быть отброшено), что при адиабатическом изменении внешних параметров ансамбль систем все время находится в состоянии, описываемом канонической функцией распределения. Как и в некоторых названных выше пунктах, это предположение выражает тенденцию сохранить полную аналогию между общей теорией систем в Г-пространстве и больцмановской теорией идеального газа, описываемого при помощи μ-пространства: известно, при адиабатическом изменении внешних условий можно предполагать, что газ проходит через ряд состояний, в каждом из которых осуществляется распределение Максвелла-Больцмана. В противоположность этому, предположение Гиббса в общем случае ошибочно. Как уже отмечалось, если в начальный момент ансамбль изолированных систем имел по энергиям каноническое распределение, то при адиабатическом изменении внешних параметров энергия систем изменяется так, что, вообще говоря, каноническое распределение теряется.

Рассматривая адиабатические процессы, Гиббс показывает, что в течение этих процессов величина $\bar{\eta}$ (точнее говоря, величина Σ) сохраняет минимальное значение и что в этом смысле изображаемая ансамблем система проходит через состояния статистического равновесия. Само доказательство стремления Σ к минимуму при стационарных условиях (гл. XII), как уже отмечалось, ошибочно. Также не являются доказательством аргументы, приведенные Гиббсом в пользу применимости результата о минимальности Σ при адиабатическом процессе (гл. XIII).

Однако эти утверждения о минимальности Σ, как показывалось в начале этого параграфа, могут быть доказаны, если исходить из правильного представления о релаксации,— представления, основанного на размешивании. Но важно подчеркнуть, что эти утверждения справедливы лишь при заданном распределении по энергиям, и, следовательно, не могут являться доказательством установления канонического распределения. Действительно, на каждой поверхности заданной энергии Σ стремится к минимуму, но никакие процессы релаксации не могут изменить распределение по энергии ансамбля изолированных систем. Если мы установим связь между двумя последовательно делаемыми у Гиббса утверждениями — о минимальности $\bar{\eta}$ при адиабатическом процессе и о сохранении при этом процессе канонического распределения, то мы получим частный вид отмеченного выше ошибочного вывода канонического распределения из условия минимальности энтропии. Между тем, стремление Σ (по Гиббсу, $\bar{\eta}$), к минимуму при заданной энергии, рассматриваемое Гиббсом как выражение H-теоремы, не дает никакого основания для заключения о сохранении канонического распределения.

В своем обзоре Эренфесты [1, стр. 63] обращают внимание на некоторую математическую нестрогость рассуждений Гиббса: из приближения Σ к минимуму Гиббс неявно заключает об *установлении* канонического распределения с достаточной степенью точности. В то же время Эренфесты оставляют неотмеченной принципиальную ошибочность заключения: стремление Σ к минимуму выражает некоторое свойство релаксации (размешивания) при заданной энергии. Это свойство не может привести к изменению величины $\bar{\eta}$ вследствие изменения распределения по энергиям, так как вообще не может привести к изменению распределения по энергиям. Эренфесты нигде не указывают также на отмеченные выше свойства величины Σ, отличающие ее от энтропии. По этому вопросу они ограничиваются тем, что приводят замечание Планка о преимуществе больцмановского выражения для энтропии (как дающего возможность определять зависимость энтропийной константы от концентрации различных сортов молекул) и замечание Лоренца [12, стр. 83] о неясности определения ансамбля, служащего для определения энтропии неравновесного состояния.

Последнее замечание, может быть, неясно выражает приведенное выше соображение о неправильности введения представления об энтропии ансамбля с неопределенной энергией. Однако буквальный смысл сказанного Лоренцом допускает ответ, заключающийся в том, что искомый ансамбль может быть определен функцией ρ, постоянной внутри области заданного неравновесного состояния и равной нулю вне этой области. В случае, когда заданное состояние имеет определенную энергию, этот ответ согласуется, как легко видеть, и с гиббсовой формулой $s = -k\bar{\eta}$ и с обычным определением энтропии $s = k \ln \Delta\Gamma$. Кроме того, Эренфесты [1, стр. 71] пишут, что при учете указаний Планка и Лоренца изменение величины Σ может характеризовать среднее по различным микросостояниям изменение больцмановской энтропии. Не ясно, что́, по мнению Эренфестов, должен дать учет указания Лоренца для названного ими свойства Σ; наоборот, как можно показать, по существу это указание [12] означает возвращение к больцмановскому определению энтропии, при котором названное свойство, естественно, теряется. Но из сказанного выше можно видеть, что это их замечание о Σ в известном смысле правильно.

Содержание настоящего параграфа показывает, что аналогия больцмановской теории идеального газа и понятий в μ-пространстве, с одной стороны, и теории систем общего типа и понятий в Г-пространстве, с другой стороны, не может быть распространена дальше определенных границ. Переход за эти границы приводит, например, к неправильному выражению для энтропии, неправильному выводу канонического распределения, ошибочному предположению о сохранении канонического распределения при адиабатических процессах. Наличие аналогии неоднократно подчеркивалось [8]; существование границ аналогии не всегда учитывалось в достаточной мере.

Кроме приведенных выше примеров, отметим еще две ошибки, допущенные в упоминавшейся уже в § 2 статье Пуанкаре о кинетической теории газов [3], ошибки, в своей основе сходные с только что упомянутыми.

В § 6 статьи Пуанкаре, исходя из гиббсова определения энтропии как величины $-k\int \rho \ln \rho d\Gamma$, приводит доказательство возрастания энтропии, относящееся к изучаемому им одномерному газу. Его доказательство, рассматриваемое им как приложение общих рассуждений Гиббса, содержит почти ту же ошибку, что и гиббсово доказательство возрастания энтропии, приведенное в главе XII [7]. Эта ошибка делается очевидной, если учесть, что в выводе, по существу, речь идет о «тонкой» плотности, сохраняющей свою величину в любой движущейся точке. При учете этого все неравенства Пуанкаре переходят в равенства.

В § 9, в заключении статьи, Пуанкаре доказывает, что если начальная плотность вероятности была канонической функцией квадрата скорости, то при любых, как адиабатических, так и неадиабатических, изменениях внешних параметров кинетическая энергия в любой, более поздний (в частности, сколь угодно близкий) момент будет больше. В этом выводе Пуанкаре использует свойство «тонкой» энтропии сохранять свою величину. Следовательно, рассуждения Пуанкаре относятся к Г-пространству (так как только в Г-пространстве можно говорить об этом свойстве). Но в Г-пространстве величина, рассматриваемая им как кинетическая энергия системы, не имеет ничего общего с кинетической энергией данной системы, а является средней кинетической энергией ансамбля. Доказываемое же им утверждение оказывается тривиальным следствием предположения о плотности распределения ансамбля в начальный момент, не имеющим никакого отношения к изменению кинетической энергии данной «индивидуальной» системы. Начальное состояние последней при такой постановке задачи оказывается совершенно лишенным определения. Если перенести формулы Пуанкаре из Г- в μ-пространство, то получаются также совершенно тривиальные результаты (в частности, относящиеся к достаточно удаленному — на величину времени релаксации — моменту и лишь к адиабатическому изменению внешних параметров), поскольку доказательство лишается своего центрального пункта — использования свойства «тонкой» энтропии. Отметим еще, также не вдаваясь в подробности, что упомянутое в § 2 различие гипотез разрывности и непрерывности, по существу, важно лишь для μ-пространства, хотя Пуанкаре проводит это различие в терминах Г-пространства.

Все содержание настоящего параграфа представляет собой критику некоторых сторон теории Гиббса,— критику, исходящую из классической механики. Как уже говорилось в § 3, дальнейшие параграфы будут посвящены критике принципиальных недостатков всякой теории, посвященной механической интерпретации статистики и основанной на классической механике. Целью же этого параграфа было показать, что по отношению к вопросу о механической интерпретации статистики теория Гиббса не представляет никаких преимуществ по сравнению с классической теорией, основные черты которой были отмечены в § 8. В тех пунктах, в которых теория Гиббса отклонялась от этого, наиболее последовательного выражения возможностей классической механики, она лишалась непосредственной физической интерпретации.

§ 10. Параграфы 10—17 посвящены критике принципиальных особенностей интерпретации статистической физики, основанной на классической механике. Как уже было сказано, при такой интерпретации можно избежать почти всех противоречий, приписывавшихся в свое время физической статистике. Основной чертой этой интерпретации является предположение о равновероятности всех микроскопических состояний, принадлежащих выделенной опытом области (см. § 4 и 8). В дальнейшем указаны возможности расширения этого больцмановского предположения (понятно, что формулировка его является просто коротким выражением условия пропорциональности вероятности некоторого состояния мере точек, принадлежащих этому состоянию). Однако отметим, что приведенная его форма является единственной естественной и логически последовательной, а также, что для дальнейших рассуждений наиболее существен сам факт необходимости предположения о вероятностях микросостояний (см. § 2, 4 и 8).

Для механического истолкования статистики необходимо еще предположение о размешивающемся типе статистических систем, обеспечивающее существование релаксации (см. § 5), и предположение об ограничении величины и формы начальных областей, гарантирующее монотонность процесса релаксации (и, в частности, исключении новой формы возражения обратимости) (см. § 8 и 14). Но главное внимание будет сосредоточено в дальнейшем на первом из упомянутых предположений.

Сформулируем здесь же основной результат последующих параграфов: точка зрения, целиком основанная на представлениях классической механики, не может быть удовлетворительной основой для понимания связи физической статистики и микромеханики. Главным основанием этого результата является невозможность ввести в классическую механику вероятностные представления таким образом, чтобы возникло понятие закона, устанавливающего связь результата начального опыта с распределением результатов последующих опытов (§ 12 и 13). Кроме того, вводимые в классическую механику вероятностные представления не могут быть приведены в достаточное соответствие с непосредственными данными опыта (§ 14). Смысл этих утверждений будет ясен из дальнейшего.

Но до перехода к этим вопросам отметим еще одно соображение, носящее чисто качественный характер. Еще до введения вероятностных представлений в классическую теорию, до того как мы сделали какие бы то ни было вероятностные предположения, сам факт того, что мы исходим из классической механики, влечет за собой невозможность истолкования главных утверждений физической статистики, отмеченных в § 1.

Действительно, независимо от того, какой вероятностный закон распределения микросостояний мы примем внутри выделенной начальным опытом области (этот закон скажется лишь на результатах испытаний в *различных* опытах), в *данном* рассматриваемом нами опыте система исходит из вполне определенного микросостояния и движется по вполне определенной траектории фазового пространства. Не возмущая траекторию системы, будем производить последовательные измерения каких-либо относящихся к системе величин (в соответствии с классической точкой зрения, мы можем считать, что эти измерения не влияют на систему). Будем, например, производить последовательные опыты через времена, бо́льшие, чем время релаксации по измеряемым величинам. В соответствии с указанной в § 1 характеристикой процессов релаксации, результаты измерений, произведенных после времени релаксации, будут распределены согласно флюктуационной формуле $w_i = Ce^{\frac{s_i}{k}}$. Ряды результатов измерений будут, следовательно, с одной стороны, обладать всеми свойствами вероятностных рядов, в частности тем свойством, что последовательность этих результатов не поддается описанию при помощи какого бы то ни было алгорифма (свойство Regellosigkeit). Этим свойством будут, конечно, обладать и ряды близких друг к другу измерений (измерений величин, уже не являющихся независимыми в вероятностном смысле), но для удаленных друг от друга на время релаксации опытов вероятностный характер распределения результатов особенно очевиден. Отметим еще, что вероятностный характер явлений, подчиняющихся флюктуационной формуле, является одним из наиболее достоверных фактов физики и основой общепринятой теории флюктуаций. С другой стороны, поскольку рассматриваемая система, по нашему предположению, движется по определенной траектории, описываемой дифференциальными уравнениями, то *все результаты измерений*, по крайней мере принципиально, *должны иметь алгорифм*.

Таким образом, либо мы должны отказаться от основанной целиком на классической механике теории статистических систем, либо, в противоречии с возникшим из опыта убеждением в полной применимости вероятностного описания, считать, что эти явления не подчиняются никакой вероятностной схеме, имеют алгорифм, и лишь имитируют некоторые свойства вероятностных рядов (Мизес [13], стр. 530). Исходя из вероятностного характера изменения энтропии, Мизес пришел к заключению, что дифференциальные уравнения механики (в частности, эргодическая гипотеза) не могут рассматриваться как основа для построения статистической физики [8]. Мизес предложил чисто вероятностную схему описания процессов в статистических системах (схему типа цепей Маркова [14']), но совершенно не ставил вопрос о связи этой схемы с принципами микромеханики.

Изложенный в настоящем параграфе аргумент носит чисто качественный характер. Хотя наличие указанной дилеммы бесспорно, основанный лишь на ней вывод о непригодности классической механики для построения статистической физики не являлся бы достаточно обоснованным. Если бы мы не нашли дальнейших аргументов, говорящих в пользу того же вывода, то мы могли бы допустить, сколь это ни мало правдоподобно, что вероятности, возникающие в физической статистике, не являются настоящими вероятностями, не обладают всеми свойствами вероятностных рядов, а лишь имитируют некоторые из них. Кроме того, мы не имели бы возможности окончательно отвергнуть последнее допущение, если бы мы не могли найти иных — отличных от классической механики — принципов микромеханики, способных служить основой для интерпретации физической статистики. Однако приведенная дилемма может служить некоторым указанием того направления, в котором мы должны будем двигаться в дальнейшем.

Упомянем здесь же об одной, очень простой, как казалось бы с первого взгляда, точке зрения, позволяющей основать ряд результатов статистической механики на одной лишь классической механике. Кратко говоря, суть этой точки зрения заключается в том, что вследствие крайней сложности и «запутанности» фазовой траектории статистической системы поведение этой траектории хотя и описывается алгорифмом, но настолько сложно, что даже за очень большие времена (которые можно определить точнее, например при помощи сравнения с временем возврата) имитирует поведение величин, распределенных по законам случая. Казалось бы, таким путем можно получить приближенное согласие с вероятностными законами физической статистики. Мы уже указывали в этом параграфе на один из недостатков такой точки зрения: вероятностное описание явлений в статистических системах и, в частности, вероятностное описание флюктуаций и броуновского движения, является лишь приближенным и применимым для определенных интервалов времени; например, для времен, сравнимых с временем возврата, вероятностное описание заведомо привело бы к ошибкам. В противоречии с этим, опыт не дает нам никаких ограничений для возможности применения чисто вероятностных схем. Как мы уже отмечали, наличие одного лишь этого противоречия еще не может заставить нас отбросить такую точку зрения (хотя это противоречие принципиально вполне может быть разрешено чисто опытным путем; см. гл. V).

Главная же причина, по которой эта точка зрения совершенно неприемлема, заключается в том, что указываемая ею постановка опыта — определение распределения величин при наблюдении ничем не возмущаемой эволюции системы за длинные промежутки времени (на языке классической механики — эволюции системы при движении по заданной фазовой траектории) — совершенно отлична от обычной постановки опытов в статистической механике, опытов, служащих для установления и проверки ее вероятностных законов. В этих последних опытах мы неограниченно воспроизводим некоторое начальное состояние (макроскопически описанный комплекс условий), причем это состояние каждый раз воспроизводится нам «заново», т. е. рассматриваемое начальное состояние в наших опытах отнюдь не обязано возникать в течение одной и той же невозмущенной эволюции системы (т. е., не обязано лежать на одной и той же фазовой траектории). Для возможности установления вероятностного закона достаточно, разумеется, возможности неограниченного воспроизведения соответствующего комплекса условий. При этом, конечно, отсутствуют какие бы то ни было ограничения, связанные с тем, что состояния, соответствующие комплексу условий, осуществляются в процессе одной и той же невозмущенной эволюции системы (что требовало бы, в частности, огромных, практически неосуществимых времен наблюдения). В этом заключается суть самого определения вероятности, самого понятия вероятностного закона.

На существовании вероятностного закона, связанного с возможностью неограниченного воспроизведения одного и того же комплекса условий в независимых опытах, основано и субъективное чувство уверенности, с которым мы в единичном данном опыте ожидаем осуществления события, имеющего вероятность, достаточно близкую к единице (например, ожидаем, что процесс пойдет в соответствии с H-теоремой).

Всякое обоснование статистики должно, прежде всего, дать интерпретацию вероятностных законов статистики (в частности, законов кинетики и законов флюктуаций) в их обычной форме — при независимых воспроизведениях начального комплекса условий (относительно всех этих вопросов см. дальше, в частности, § 12 и 13). Рассматриваемая точка зрения даже не дает возможности поставить такую задачу. Относительные частости какого-либо явления вдоль данной фазовой траектории, вообще говоря, никак не связаны с вероятностями этого явления до тех пор, пока мы не постулировали вероятностный закон распределения точек самой траектории. Такой постулат сам нуждался бы в обосновании, которое, как будет видно дальше, не может быть дано в классической теории (см., в частности, § 20, а).

Сейчас же, чтобы полностью отказаться от рассматриваемой точки зрения, достаточно сказать, что при новом воспроизведении начального состояния, благодаря произошедшему возмущению, система может оказаться на фазовой траектории вообще отличной от той, которая была в предшествующем опыте. Само собой разумеется, что при обосновании статистики соответствующую интерпретацию должен получить и опыт, заключающийся в длительном (включающем большое количество времен релаксации) наблюдении системы, не подверженной никаким возмущениям. Именно к такому опыту относится приведенный в начале настоящего параграфа аргумент, являющийся некоторым доводом против возможности обоснования физической статистики при помощи классической механики.

§ 11. Цель, которая ставится перед механическим обоснованием статистики, заключается в том, чтобы, исходя из определенного начального состояния (с соответствующей областью фазового пространства $\Delta\Gamma_0$), получить согласующиеся с опытом вероятностные утверждения о возможных результатах будущих измерений (например, через время релаксации). Но в классической механике утверждения о будущем связаны однозначной связью с утверждениями о настоящем (а также и о прошлом).

Если в момент времени t функция распределения f_t, то в момент $t = 0$ она была $f_0 = U_{-t} f_t$, где U — унитарный оператор преобразования фазового пространства. Можно сказать, что в этом смысле классическая механика не знает разницы между сколь угодно далеким и сколь угодно близким будущим (или настоящим). Поэтому совершенно бессмысленны часто произносимые фразы вроде следующей: «благодаря большому числу молекул макроскопической системы, большому числу молекулярных столкновений и т. д. можно считать, что через сравнительно короткое время возникнет состояние, независимое от начального, что дает основание для применимости к таким системам теории вероятностей». Таким образом, предположения о функции распределения f_t в момент времени t однозначно преобразуются в предположения о функции распределения f_{t_0} в начальный момент времени t_0. Поэтому вероятностные утверждения в классической механике — это утверждения о распределении начальных микроскопических состояний внутри выделенной начальным опытом области фазового пространства $\Delta\Gamma_0$.

Мы видели, что эти утверждения имеют форму утверждений о равновероятности микроскопических состояний (см. § 4). Обычно при математических изложениях статистической механики ограничивались тем, что констатировали эту равновероятность микроскопических состояний внутри $\Delta\Gamma_0$ и изучали следствия этого предположения. Между тем, задача настоящего обоснования статистики не разрешается этим предположением о равновероятности, а возникает именно в этом пункте. Если бы это предположение было правильным (в дальнейших параграфах мы покажем, что оно совершенно неправильно), то задача обоснования статистики заключалась бы, прежде всего, в том, чтобы обосновать законность этого предположения — отнюдь не очевидного, а, как будет видно из дальнейшего, даже не поддающегося обоснованию (§ 12 и 13) и противоречащего опыту (§ 14).

Отметим здесь же, что точка зрения, согласно которой применимость статистики основывается на универсальной справедливости предположения о равновероятности (рассматриваемого как некоторый постулат, относящийся к начальным состояниям, встречаемым в природе), сразу же наталкивается на трудность совершенно принципиального характера: такая точка зрения не дает возможности определять *границы приложимости физической статистики*. Это замечание, которое сейчас будет пояснено, не имеет характера окончательного вывода, сохраняющегося в дальнейшем без изменения, в такой же форме (оно будет дальше как бы включено в более общие соображения). Это замечание является некоторым предварительным заключением, и уже на настоящей стадии наших рассуждений указывает на те недостатки рассматриваемой точки зрения, из-за которых она не может быть признана удовлетворительной.

Как мы видели в § 6, объяснение того, что совокупность результатов физической статистики приложима не ко всем, а лишь к некоторым динамическим системам, заключается в том, что лишь некоторые динамические системы являются размешивающимися, и лишь последние могут быть статистическими системами. Но, дополнив постулат равновероятности начальных состояний требованием размешивания, мы еще не получаем никаких оснований ограничить область справедливости самого постулата равновероятности одними лишь размешивающимися системами.

Действительно, постулат равновероятности относится к начальным состояниям динамических систем, и поэтому нет никаких логических оснований применять его к одному типу динамических систем и не применять к другому. Иначе говоря, проведение различия между разными типами систем по отношению к постулату равновероятности было бы совершенно необъяснимым нарушением стройности теории. Нетрудно видеть, что любая классическая теория не может содержать теорем, показывающих, что равновероятность микросостояний заданной области может быть получена (хотя бы для определенных типов систем) как следствие эволюции системы за предшествующее время при любых распределениях начальных состояний. Все равно возникает неизбежный в классической механике вопрос о том или ином распределении состояний, предшествующих эволюции, и о причинах, которые позволили бы провести в этом отношении различие между системами разных типов (см. § 12 и 13). Но, приняв постулат равновероятности начальных микросостояний по отношению ко всем динамическим системам, мы неизбежно придем к следствиям, с самого начала стоящим в прямом противоречии с опытом. Например, если начальный опыт дал определенное значение энергии, то равновероятность микросостояний выделенной поверхности равной энергии приводит к гиббсовскому распределению малых частей по энергиям. Если такой результат с первого взгляда и может показаться правдоподобным для систем, к которым мы применяем статистику, например для идеального газа (мы увидим в § 14, что на самом деле этот результат и для таких систем несправедлив), то для систем, к которым статистика неприменима, например для системы частей сложного механического станка или для системы молекул газа, движущегося как целое неравномерно, этот результат заведомо ложен.

Таким образом, постулат равновероятности начальных микросостояний, если мы его допускаем без дополнительных ограничений, лишенных всяких логических и физических оснований, т. е. если мы его допускаем по отношению ко всем динамическим системам, а не только размешивающимся, позволяет нам получить ряд выводов физической статистики как по отношению к системам, к которым в действительности статистика применима, так и по отношению к системам, к которым статистика заведомо неприменима. Иначе говоря, исходя из точки зрения, основанной на этом постулате, мы не можем дать логически удовлетворительного и одновременно согласующегося с опытом определения типов тех систем, на которые должно распространяться действие этого постулата. Это является косвенным указанием на то, что данный постулат вообще ложен, т. е. на то, что он противоречит опыту (см. § 14, а также § 12 и 13). В следующих параграфах показано, что отсутствие удовлетворительного согласия логической и физической сторон теории — следствие самых глубоких свойств классической интерпретации статистики, следствие принципиальной порочности такой интерпретации.

§ 12. Основную мысль изложенной в § 8 теории — теории, дающей максимум того, что может дать классическая точка зрения,— можно сформулировать следующим образом: законы статистики и термодинамики существуют потому, что для статистических систем (являющихся системами размешивающегося типа) справедлив равномерный закон распределения начальных микроскопических состояний внутри выделенной опытом области фазового пространства $\Delta\Gamma_0$. Только при этом условии мы получим, в частности, после времени релаксации равномерное распределение вероятностей на поверхности заданной энергии. Иначе говоря, существование законов статистики и термодинамики (известным образом вытекающих из результатов теории § 8) основано на существовании определенного закона распределения начальных микросостояний внутри области $\Delta\Gamma_0$, а именно — равномерного закона.

Что означает существование равномерного или близкого к равномерному (для определенности будем говорить о равномерном) закона распределения начальных микросостояний внутри области $\Delta\Gamma_0$? Это означает, что при безграничном продолжении ряда опытов, заключающихся в определении положения системы в фазовом пространстве, при выделении тех случаев, когда система оказалась внутри $\Delta\Gamma_0$, и при доуточнении положения системы до максимального, допускаемого классической механикой предела, т. е. до точки фазового пространства, мы будем приближаться к равномерному распределению микросостояний внутри $\Delta\Gamma_0$. По закону больших чисел это значит, например, что определенная обычным образом эмпирическая функция распределения будет отличаться от функции, описывающей равномерное распределение, меньше, чем на любую, сколь угодно малую величину (за разность функций, можно принять, например, верхнюю границу разности функций в соответствующих точках) с вероятностью, сколь угодно близкой к единице, если число опытов больше соответствующего. достаточно большого числа. Используя усиленный закон больших чисел, можно сказать, что при возрастании ряда опытов, приводящих к осуществлению области $\Delta\Gamma_0$, эмпирическая функция распределения будет стремиться к равномерной функции распределения, т. е. с вероятностью, сколь угодно близкой к единице, разность функций сделается и будет оставаться (при возрастании числа опытов) меньше любой, сколь угодно малой величины, если только число опытов сделается бо́льшим некоторого достаточно большого числа.

Сформулируем сразу же вопрос, являющийся центральным во всем анализе рассматриваемой классической теории: может ли быть допущено в теории, целиком опирающейся на классическую механику, существование указанного выше вероятного закона распределения начальных микросостояний (равномерного или даже л ю б о г о о п р е д е л е н н о г о закона распределения)? Иначе говоря, может ли в мире, целиком описываемом классической механикой, существовать такой закон? Всякий физический закон устанавливает связь двух утверждений. При выполнении комплекса условий A с необходимостью будут осуществляться устанавливаемые законом следствия B. Например, при выполнении условия A — изолированности системы — будет осуществляться устанавливаемое законом сохранения импульса следствие B — постоянство полного количества движения системы. Или — пример совершенно иного характера: при условии A — наличии максимально полного опыта над водородным атомом, установившим квантовые числа n, l и m, законы квантовой механики влекут следствие B—плотность вероятности координаты определяется функцией $|\Psi_{n,l,m}|^2$.

В случае максимально полного опыта в квантовой механике, выполнение условий A с необходимостью влечет за собой следствие B: вероятностный закон, указываемый функцией $|\Psi_{n,l,m}|^2$, и, в частности, те выводы, которые из этого закона могут быть сделаны при помощи закона больших чисел. Напротив, в рассматриваемой нами классической теории н е о б х о д и м а я с в я з ь м е ж д у у с л о в и е м A — установлением того, что система находится в области $\Delta\Gamma_0$,— и следствием B — наличием какого-либо определенного (например, равномерного) закона распределения микросостояний внутри $\Delta\Gamma_0$ — не может существовать. Классическая механика позволяет, каков бы ни был закон распределения B, представить себе сколь угодно далеко продолжающийся ряд случаев, когда опыт, заключающийся в определении положения системы, укажет на осуществление области $\Delta\Gamma_0$ (т. е. на выполнение условия A), тогда как определяемая этим рядом эмпирическая функция распределения не будет приближаться к функции распределения B (т. е. следствие B не будет выполняться). Только что упомянутая возможность представить себе такие ряды означает в классической механике возможность их создать, т. е. подобрать такие микроскопические определенные состояния системы, которые образовали бы ряд с указанными свойствами.

Искусственный подбор случаев, которые привели бы к таким рядам, основан на подборе микроскопических состояний внутри области $\Delta\Gamma_0$, т. е. на соответствующем подборе некоторого дополнительного условия a, характеризующего систему и существующего наряду с основным условием A, требующим только того, чтобы система находилась в области $\Delta\Gamma_0$. Существенно подчеркнуть, что в классической механике подбор дополнительного условия a (в частности, такой подбор микросостояний, который приводит к рядам с вероятностью, сколь угодно близкой к единице, противоречащим предположению о существовании закона, выражаемого связью $A \rightarrow B$) может быть осуществлен так, что во всех случаях, принадлежащих к подобранному ряду, основное условие A (условие того, что система находится в $\Delta\Gamma_0$) не будет нарушено. В противоположность этому, в квантовой механике при условии A — наличии максимально полного опыта — подобный подбор невозможен. Если, например, мы будем искусственно подбирать случаи, когда измерения координаты электрона в водородном атоме будут давать заранее предопределенные результаты, приводящие к функциям распределения, отличным от $|\Psi_{n,l,m}|^2$, то присутствие дополнительного условия a, обеспечивающего такое распределение результатов измерения координаты, очевидно, несовместимо с наличием во всех случаях основного условия A (т. е. условия существования Ψ-функции $\Psi_{n,l,m}$, которая будет дополнительным условием a уничтожена — «возмущена»). В противоположность рассмотренной ситуации, существующей в классической теории, в приведенном примере максимально полного измерения в квантовой теории между условием A (существованием Ψ-функции) и следствием B (существованием закона распределения координаты $|\Psi|^2$) существует необходимая связь, которая не может быть нарушена искусственным подбором. Отметим, что приведенный квантовый пример интересует нас сейчас, конечно, не сам по себе, а только как иллюстрация положения, противоположного рассмотренной классической ситуации, иллюстрация, цель которой — пояснить некоторые черты этой ситуации.

Таким образом, в классической теории совершенно очевидная, тривиальная истина отсутствия какой-либо необходимой связи между условием A, того, что система находится в области $\Delta\Gamma_0$, и существованием определенного закона B распределения микросостояний внутри $\Delta\Gamma_0$, в частности, дает возможность заключить, что *равномерный закон распределения* начальных *микросостояний* внутри выделенной опытом начальной области $\Delta\Gamma_0$ *не может быть законом природы*. Это значит, что не может быть законом природы такое распределение вероятностей для последующего во времени хода процесса, которое вытекает из равномерного распределения начальных микросостояний, т. е. *не может быть законом природы* такое *распределение вероятностей* для последующего во времени хода процесса, *которое согласуется с законами кинетики* — вторым началом и т. д. или, говоря более общо, такое распределение, которое согласуется *с законами физической статистики* (см. начало данного параграфа).

Это заключение может вызвать следующее возражение: приведенная выше аргументация доказывает лишь, что необходимая связь между условиями A и B не устанавливается законами классической механики; однако эта связь, не являясь логически и с точки зрения классической механики необходимой, может существовать как закон иной *специфической* природы. Так и всякий закон природы не является логическим следствием входящих в него понятий, а существует как некоторое общее утверждение специфического характера, не являющееся следствием других законов. Например, закон классической механики, гласящий, что область фазового пространства M через время t для изолированной системы переходит в M_t, не является логическим следствием входящих в него понятий фазового пространства, изолированности и т. д., а существует как утверждение специфической природы, как выражение самого закона классической механики.

Но легко видеть, что это возражение ошибочно. Действительно, мы можем представить себе, что между условием A осуществления области $\Delta\Gamma_0$ и наличием равномерного распределения микросостояний внутри $\Delta\Gamma_0$ с необходимостью существует связь, выражаемая специфическим законом, не выводимым из классической механики. Но полученное выше основное наше утверждение о невозможности закона, устанавливающего связь A и B, является утверждением не невозможности представить себе эту связь, а невозможности существования ее как закона природы. В самом деле, закон природы гарантирует нам, что в будущих опытах выполнение условия A всегда влечет за собой следствие B. Например, законом природы является всегда существующая гарантия того, что всякий раз вслед за осуществлением состояния M изолированной системы через время t осуществится состояние M_t или гарантия того, что после проведения максимально полного опыта, дающего квантовые числа n, l и m, плотность вероятности для координаты всегда будет определяться функцией $|\Psi_{n,l,m}|^2$. В то же время, как было показано, в рассматриваемой классической теории подобной гарантии ни в какой мере нет: всегда могут быть созданы такие ряды случаев (которые в действительности осуществлены, а не только представлены мысленно без логического противоречия), т. е. подобраны такие, принадлежащие $\Delta\Gamma_0$, микросостояния, что закон распределения ни в какой степени не будет приближаться к заранее определенному закону распределения B (число произведенных опытов может возрастать неограниченно, так что закон больших чисел гарантировал бы совпадение с законами распределения B, если бы последний существовал). Укажем, что возможность осуществить в действительности ряды случаев, противоречащие предположению о существовании заранее определенного закона распределения микросостояний внутри $\Delta\Gamma_0$, основана лишь на справедливости классической механики, так как лишь на представлениях классической механики основана возможность подбирать или, что в данном случае то же самое, приготавливать системы в заданном микроскопическом состоянии.

Резюмируем данный нами на приведенное возражение ответ: хотя и можно представить себе без логического противоречия закон равномерного распределения начальных микросостояний, этот закон не может существовать как настоящий закон природы, как закон, дающий гарантии определенных исходов будущих испытаний; при этом соображения, доказывающие невозможность существования такого закона, покоятся лишь на принципах классической механики.

То же самое можно выразить в другой форме следующим образом: доказательством того, что рассматриваемый нами закон равномерного распределения начальных микросостояний не может существовать, является невозможность дать этому закону корректную — точную и правильную по своей форме —

формулировку: условия, при которых этот закон справедлив в классической механике, не являются определенными. При характеристике как условий применимости вероятностного закона, так и утверждаемых им следствий в классической теории можно пользоваться, конечно, лишь классическими понятиями, т. е., по существу говоря, терминами Г-пространства. Но, как уже говорилось, очевидно, что условие осуществления области $\Delta\Gamma_0$ не дает гарантий справедливости закона равномерного распределения для микросостояний внутри $\Delta\Gamma_0$. Можно сказать, что этот закон не только не имеет точного смысла, но физически вообще бессмыслен, так как условия, при которых он делался бы справедливым, границы его применимости, принципиально не могут быть определены внутри картины, описываемой классической механикой.

Действительно, понятие вероятности вообще может быть введено в картину классической механики чисто внешним образом, в том смысле, что хотя и можно, например, предположить, что микросостояния в фазовом пространстве распределены по определенному вероятному закону, но нельзя в терминах классической механики определить те физические условия, при которых этот закон распределения будет проявляться на опыте. Иначе говоря, в классической механике не может быть определена соответствующая данному понятию вероятности категория испытаний, не могут быть определены соответствующие условия опыта. Все применения теории вероятностей характеризуются некоторой принципиальной однородностью условий испытаний, приводящих, вообще говоря, к различным результатам. Эта однородность выражает то общее свойство испытаний, которое характеризуется одинаковым для всех испытаний распределением вероятностей. В случае максимально полного опыта в квантовой механике эта принципиальная однородность выражается полной принципиальной тождественностью условий опытов, производимых с одинаковыми Ψ-функциями. Наоборот, в классической механике, в силу отмеченной в § 11 однозначности уравнений, результаты испытания и условия опыта содержат одно и то же. Если, например, испытание заключается в определении положения системы в фазовом пространстве в момент $t = t_1$, то очевидно, что результаты испытания однозначно определяются условиями опыта при $t = t_0$, так как в терминах классической механики эти условия могут задаваться лишь при помощи точного или приближенного задания положения системы в этот момент t_0. Результаты испытаний целиком определяются подбором условий опытов и содержат ровно столько же, сколько и эти условия. Очевидно, что тождество условий испытаний и результатов испытаний, выполняющееся с точностью до однозначного преобразования (от момента t_0 к моменту t_1), делается полным тождеством, если моменты t_0 и t_1 совпадают.

Мизес в посвященной физической статистике части своей книги [13, стр. 519—520] останавливается на вопросе об условиях опытов, служащих для определения различных вероятностей в физических системах. Он пишет, что эти опыты должны проводиться после «надлежащих приготовлений», цель которых заключается в том, чтобы установить для всех измерений по возможности «одинаковые состояния» физической системы. Эти «приготовления» могут, по Мизесу, приближенно достигаться при помощи «сильного внешнего воздействия», вроде «сильного перемешивания частей системы», предшествующего измерению. Такие представления кажутся вполне естественными (они согласуются с представлениями о возникновении условий равновероятности при тасовании карт, встряхивании игральных костей и т. п.) и очень распространены, хотя и не всегда ясно формулируются. Но следует отметить, что такие представления, рассматриваемые как представления теоретические, образующие часть решения принципиального вопроса о построении статистической физики и ее вероятностных законов на основании классической механики, совершенно неудовлетворительны.

В классической механике, для того чтобы охарактеризовать «надлежащее приготовление», т. е. способ, которым производится сильное воздействие, необходимо указать действие некоторой вспомогательной системы на рассматриваемую нами систему, находящуюся после предшествующего испытания в определенном микросостоянии, иными словами — указать, точно или приближенно, состояние вспомогательной системы, вид взаимодействия и т. д. Короче говоря, следует указать, независимо от способа, при помощи которого это достигается, в какое новое микросостояние или в какую область микросостояний переводится рассматриваемая система в результате «приготовления». (Следует иметь в виду, что речь идет не о макроскопических операциях «приготовления», отношение которых к микроскопическим понятиям остается совершенно неопределенным, а об операциях, которые, в соответствии с принятой классической точкой зрения, целиком описываются в терминах классической микромеханики.) Но в таком случае в результате испытания мы получим точно то, что было нами «приготовлено». Ряды результатов испытаний целиком определяются подбором условий испытаний — «приготовлением» условий испытаний. В частности, если «приготавливаются» в точности одинаковые состояния, то результаты испытаний также будут совершенно одинаковыми, и все дисперсии обращаются в нуль. Если «приготавливается» не точно определенное состояние, а обеспечивается только то, что система находится внутри заданной области, то, очевидно, можно с достоверностью предсказать лишь то, что испытание даст одну из точек этой области, а закон распределения внутри этой области останется совершенно неопределенным, и т. д. Как уже говорилось, здесь не определена сама категория испытаний, порождающих понятие вероятности.

Может быть, следует еще отметить, что сделанное выше утверждение о невозможности в классической теории существования закона равномерного распределения микросостояний как закона природы совершенно не зависит от характера причин, влияющих на распределение микросостояний данной системы, т. е. от характера влияния внешней среды — от того, с какими системами и как взаимодействует данная система. Каковы бы ни были причины, влияющие на распределение микросостояний данной системы, названный закон не может существовать: условие того, что система находится в определенной области фазового пространства, во всяком случае не может повлечь за собой общего, заранее определенного закона распределения микросостояний внутри этой области. Мы, конечно, можем представить себе различные макроскопически охарактеризованные способы «приготовления», в которых некоторые классические величины были бы распределены по законам вероятности. Но, как уже говорилось по поводу предложенного Мизесом «надлежащего приготовления», эти способы «приготовления» принципиально не могут быть описаны в терминах классической микромеханики. И можно сказать, что по тем же причинам вероятностные законы распределения микросостояний не могут получить удовлетворительную интерпретацию в теории, основанной исключительно на классической механике.

Резюмируем сказанное выше. Приведенные в этом параграфе рассуждения имеют несколько необычный в рассматриваемых вопросах вид. Но сама высказанная мысль очень проста. Невозможность дать в классической теории интерпретацию вероятностных законов статистической механики основана, по существу, на отсутствии необходимой связи между условием того, что система находится в заданной области фазового пространства (например, находится в заданном макроскопическом состоянии) и определенным законом распределения микросостояний внутри этой области, иначе говоря — на отсутствии необходимой связи между условием того, что система находится в заданном макроскопическом состоянии и определенным, соответствующим законам статистики и кинетики, распределением вероятностей дальнейшего течения процесса.

Мы остановились на различных аспектах этих простых соображений так подробно для того, чтобы сделать по возможности очевидным окончательный вывод: в теории, основанной на классической механике, принципиально не может возникнуть представление о *вероятностных* законах распределения, *с необходимостью* сопровождающих осуществление данного макроскопического состояния, т. е. принципиально не может возникнуть представление о статистическом и, в частности, термодинамическом законе.

Какой бы простой закон распределения микросостояний внутри заданной области мы ни предположили, в классической теории отношение этого закона к результатам будущих испытаний остается совершенно неопределенным. Классическая теория не может дать никаких гарантий того или иного закона распределения микросостояний в последующих испытаниях. Теория, основанная на классической механике, не только не может объяснить предпочтительность одного из таких законов перед другими, но и вообще не может объяснить факта существования какого бы то ни было вероятностного закона, т. е. не дает нам возможности понять *самого факта существования* законов статистики и термодинамики. В то же время мы констатируем эти законы на опыте, констатируем существование вероятностных законов распределения результатов наших опытов. Следовательно, источник этих законов — их объяснение — надо искать в иных, отличных от классической механики, принципах описания природы.

§ 13. Как было показано в предыдущем параграфе, в основанной на классической механике теории закон равномерного распределения микросостояний внутри данной, выделенной опытом области $\Delta\Gamma_0$ не может существовать. Это, однако, не значит, что в классической теории вообще не может возникнуть понятие о равномерном распределении микросостояний, или, иначе говоря, понятие о соответствующем ансамбле систем Гиббса. В классической теории возможна следующая точка зрения: ансамбль систем Гиббса, сопоставляемый с названным выше законом равнораспределения (т. е. ансамбль, образованный континуумом систем в таких состояниях, которые соответствуют возможным результатам испытаний в предположении, что имеет место данный вероятностный закон распределения),— назовем его «идеальным» ансамблем,— не имеет физического смысла, так как сам закон распределения не существует. Но физический смысл может быть приписан ансамблю, образованному конечным числом систем в тех состояниях, в которых системы находятся в реальных условиях опыта; назовем этот ансамбль «реальным». В классической теории без противоречия с утверждениями предыдущего параграфа может быть сделано предположение о том, что «реальный» ансамбль является некоторой — осуществленной при помощи конечного числа систем — апроксимацией «идеального» ансамбля, иначе говоря — предположение о том, что в условиях действительного опыта системы, обнаруженные в области $\Delta\Gamma_0$, имеют приблизительно равномерное распределение. Это предположение имеет здесь, в классической теории, смысл констатации чисто эмпирического факта, и ни в малейшей степени не опирается на существование закона равнораспределения. Отметим, что с формальной точки зрения вынужденный соображениями § 12 переход от «идеального» ансамбля к ансамблю «реальному» является в терминах введенного Пуанкаре различия переходом от гипотезы непрерывности к гипотезе разрывности (см. § 2).

Критика классической точки зрения, опирающейся на понятие «реального» ансамбля, будет дана в § 14 и 15. Сделаем сейчас несколько замечаний о соотношении этого понятия с результатами предшествующего параграфа.

Поскольку «реальный» ансамбль является исключительно средством характеристики нашего опыта, т. е. понятием эмпирическим, и не опирается на существование соответствующего закона распределения микросостояний, то тот факт, что на основании предшествующего опыта он имеет какой-нибудь определенный вид, не может нам дать никаких гарантий относительно законов распределения последующих опытов. Действительно, в классической теории мы всегда можем предположить, что исходы серии последующих опытов определяются специальным подбором. В этом месте может быть приведено следующее возражение: «никто не занимается специальным подбором условий опытов, наши опыты относятся к природе». Но это возражение неправильно: мы не знаем, не будут ли последующие опыты в силу какого-нибудь специального стечения обстоятельств приводить к каким-либо специальным законам распределения. Наоборот, мы знаем с достоверностью, что у нас нет никаких гарантий того или иного, заранее определенного, универсального (в частности, совпадающего с «реальным» ансамблем) распределения результатов последующих опытов, нет закона распределения.

Легко видеть, что частость в данном рассматриваемом нами ряде новых опытов, вообще говоря, не должна совпадать с частостью в «реальном» ансамбле, построенном на основании предшествующих опытов. Для такого совпадения необходима некоторая однородность условий старых и новых испытаний. Например, частость какого-нибудь физического явления на земле еще не предопределяет частость его на другой планете. Для того чтобы выделенному из серии опытов (из всего «реального» ансамбля) одному определенному данному опыту (точнее, ряду испытаний, полученному многократным повторением этого опыта) можно было приписать вероятность, совпадающую с частостью во всем «реальном» ансамбле, необходимо потребовать еще большего. Мы не можем объяснить это совпадение наиболее простым путем, потребовав, чтобы в каждом опыте серии вероятность была одинаковой и совпадающей с вероятностью в данном опыте. В самом деле, мы говорим о «реальном» ансамбле, возникновение каждого из членов которого не может рассматриваться как следствие испытания с вероятностным законом распределения результатов; члены «реального» ансамбля существуют как бы «сами по себе», независимо от нашего опыта. Грубо говоря, необходимо потребовать, чтобы каждая из систем «реального» ансамбля имела одинаковую вероятность оказаться как раз системой, исследуемой нами в данном опыте (подобная равновероятность обеспечивается перемешиванием колоды карт: после перемешивания вероятность того, что каждая карта колоды окажется верхней,— одинакова; в то же время продолжая сравнение, можно сказать, что каждый из членов «реального» ансамбля — каждая из карт колоды — не возникает в результате испытания с вероятностным законом распределения, а существует «сам по себе»). Только при выполнении этого требования само понятие вероятности приобретает смысл, и величина вероятности будет совпадать с частостью в «реальном» ансамбле.

Однако обычно мы не можем ссылаться на существование вероятностного закона распределения в каждом из опытов, приводящих к возникновению одного из членов ансамбля (как, например, при максимально полном измерении в квантовой механике), а имеем дело лишь с «реальным» ансамблем статистических систем, т. е. чисто эмпирическим описанием проведенных над статистическими системами опытов. Поэтому нет никакого физического смысла в предположении, что существует какой-то «механизм», обеспечивающий как бы равномерное перемешивание систем «реального» ансамбля перед измерением. Понятие вероятности всегда связано с представлением об определенной категории испытаний, служащих для измерения вероятности. В данном случае с указанной равновероятностью не может быть сопоставлена никакая физически определенная категория опытов. Например, очевидно, что физически бессмысленно говорить о таких опытах, в которых с равной вероятностью могли бы быть обнаружены различные системы, образованные граммолекулами какого-нибудь газа и исследованные нами в различных опытах, послуживших для образования «реального» ансамбля. Таким образом, частости в «реальном» ансамбле не могут рассматриваться как вероятности, определяющие распределение результатов в последующих опытах. В классической теории устанавливаемая при помощи «реального» ансамбля связь условий опыта (например, условия того, что система находится в объеме $\Delta\Gamma_0$) с распределением результатов опыта является не законом, позволяющим предсказывать распределения в будущих опытах, а чисто эмпирическим фактом, характеризующим лишь произведенные опыты.

По поводу сказанного выше может быть сделано следующее серьезное возражение: «Как показывает опыт, для того чтобы можно было пользоваться понятием вероятности, вовсе нет необходимости в том, чтобы существовал вероятностный закон в том смысле, в каком он был охарактеризован в § 12. Иначе говоря, нет необходимости в существовании закона, выражающего н е о б х о д и м у ю связь условий закона и его следствий, имеющих вид определенного распределения вероятностей (т. е. такую связь, которая не могла бы быть нарушена ни при каком, совместимом с принципами микромеханики, подборе условий опытов). Мы всегда пользуемся понятием вероятности на основании индукции определенных свойств распределения (в частности, индукции понятия эмпирической частости) в соответствующем «реальном» ансамбле». Хотя указываемое в этом возражении обстоятельство действительно существует, само возражение, как можно убедиться, ни в малейшей степени не изменяет нашего главного тезиса о невозможности интерпретации и построения вероятностного физического закона на основе классической микромеханики.

Отметим сначала, что приводящая к установлению понятия вероятности индукция из опыта совсем не всегда оставляет открытым вопрос об отношении к принципам микромеханики. Сущность этого вопроса состоит в том, допускают ли принципы микромеханики в заданных, макроскопически охарактеризованных условиях опыта возможность такого подбора микроскопических определенных состояний, при котором ряды результатов испытаний будут противоречить предписаниям вероятностного закона. Уже часто приводившийся пример максимально полного опыта в квантовой механике показывает, что могут быть случаи, когда на последний вопрос следует дать отрицательный ответ. Действительно, если произведен максимально полный опыт, давший определенные результаты, указанный выше подбор невозможен; попытка осуществления подбора приведет к уничтожению условий максимально полного опыта.

Как будет показано (см. гл. V), аналогичными в этом отношении чертами обладают вероятностные законы статистической физики. Например, каков бы ни был подбор начальных состояний статистической системы, после достаточно большого времени закон распределения вероятностей будет один и тот же, а именно эргодический. (Мы подразумеваем, конечно, под начальными состояниями не микросостояния в классическом смысле, не точки фазового пространства, а такие состояния, которые могут осуществляться и подбираться в действительности, см. гл. V.) Осуществление макроскопически заданных условий гарантирует нам — независимо от всяких возможностей подбора (совместимого с заданными макроскопическими условиями) осуществление после времени релаксации заранее определенного распределения результатов измерений. Последняя фраза выражает тот бесспорный факт, что вероятностные законы, описывающие статистические системы, действительно существуют. И, кроме того, поскольку эти законы гарантируют нам определенные исходы испытаний и освобождают нас от необходимости проверять, нет ли какого-нибудь специального подбора начальных состояний «внутри» заданных макроскопических условий, то эта фраза означает, что статистические законы действительно таковы, какими по § 12 должны быть законы природы Выяснение того, каким образом возможно существование подобных, не поддающихся интерпретации в классической теории законов статистической физики, должно быть целью так называемого обоснования статистики (см. гл. V).

Однако в приведенном на стр. 71 возражении правильно указывается, что при многих приложениях теории вероятностей — именно при нефизических приложениях — вопрос о возможности «подбора», т. е. вопрос о соотношении с микромеханикой вообще не возникал. Ввиду этого у нас нет достаточных оснований заключить, что между условиями приложимости закона и делаемым в законе вероятностным утверждением есть необходимая связь. При исследовании вопроса о существовании такой связи тогда, когда вопрос удается решить, могут представиться два случая — отрицательного и положительного ответа.

В первом случае исследование покажет возможность такого подбора микроскопически определенных состояний «внутри» макроскопически определенных условий A, при котором результаты испытаний будут противоречить заранее указанному распределению вероятностей B. Отметим, что эти подбираемые состояния могут быть определены не только микроскопически, но также и макроскопически, лишь бы это макроскопическое определение настолько уточняло исходное задание условий, чтобы был возможен подбор результатов испытаний. Следовательно, в этом случае вероятностное утверждение не является настоящим вероятностным законом. (О наличии последнего мы говорим тогда, когда существует охарактеризованная в § 12 необходимая связь условий закона A и его следствий B и когда ряды результатов испытаний, проведенных в условиях A, обладают всеми свойствами вероятностных рядов, а не только некоторыми из них; см. § 10.) В данном случае выполнение указанных условий A не дает гарантий определенного распределения (распределения B) результатов будущих опытов, так как не исключает возможностей подбора.

Такое вероятностное утверждение в противоположность настоящему закону является выражением как бы некоторой корреляции (условий испытания A и распределения результатов испытания B), не имеющей точного определения, так как физически не определены (в установленном в § 12 смысле) вероятности того, что A повлечет за собой B, и вероятность того, что A не будет сопровождаться B (т. е. вероятности того или иного подбора состояний «внутри» условий A). Так, например, статистическое исследование образцов какого-нибудь материала, подвергнутого определенной обработке, может нам позволить установить вероятности того или иного значения прочности этого материала на разрыв. Но очевидно, что более детальное, хотя бы и макроскопическое, предварительное — до испытания прочности — исследование образцов даст нам возможность подобрать такие экземпляры образцов этого материала, которые будут обладать каким-нибудь приблизительно выделенным, например особенно большим, значением прочности (и следовательно, иным распределением вероятностей для испытания на прочность), несмотря на то, что эти экземпляры подвергнуты совершенно одинаковой обработке.

Обычно говорят, что распределение вероятностей, найденное при помощи этих экземпляров, получено для другого коллектива или для другой категории испытаний. С физической же точки зрения между условием, что данный материал подвергнут указанной обработке, и наличием определенного статистическим путем распределения прочности нет необходимой связи. Иначе говоря, полученная статистически связь между условием, что взят данный материал с данной обработкой, и распределением прочности не является настоящим вероятностным законом.

Условия, приводящие к данному распределению прочности, с физической точки зрения не получили достаточного определения: «внутри» указанных макроскопических условий возможен подбор, приводящий к иному — и в широких пределах произвольному — распределению прочности. Здесь нет закона (в физическом смысле этого слова), так как закон устанавливал бы гарантии определенного распределения прочности в будущих опытах и в случае закона подбор «внутри» указываемых им условий был бы невозможен. Очевидно, что и упомянутое выше более детальное исследование образцов не даст нам возможности получить такое определение категории испытаний, которое сделало бы понятие вероятности физически определенным, т. е. исключило бы возможности подбора.

Подобные вероятностные или, лучше сказать, статистические (так как в физическом смысле фигурирующее в них понятие вероятности не определено, поскольку не определена категория опытов, служащих для измерения вероятности и допускающих возможность безграничного воспроизведения) утверждения носят эмпирический характер (и основаны всегда на некотором ограниченном числе опытов). Не определено их отношение к микромеханике, так как не определены и, как следует из всего сказанного выше, физически не могут быть определены вероятности такого выбора последовательности микроскопически определенных состояний, при котором эти утверждения будут удовлетворены, или, наоборот, нарушены. Поэтому такие утверждения не могут входить в теории дедуктивно построенные, опирающиеся на настоящие (см. § 12) законы физики, в частности, не могут входить в теории, возникшие в результате обоснования какого-нибудь отдела физики.

Если же мы имеем дело со вторым случаем, т. е. при исследовании вопроса о существовании необходимой связи условий A и вероятностного следствия B можно установить невозможность подбора, то мы должны будем констатировать наличие настоящего вероятностного закона. Существование таких случаев, также подразумеваемых в приведенном выше возражении, ничем не противоречит нашему основному тезису о невозможности интерпретации вероятностных законов на основе представлений классической механики. Действительно, мы говорим только о том, что наличие свойств вероятностных рядов у эмпирического ряда результатов испытаний (и, в частности, макроскопических испытаний), с точки зрения физики, требует объяснений, а именно: возникает вопрос о соотношении этих свойств с принципами микромеханики, о том, как микроскопически описать те условия, которые заданы макроскопически, и о том, вытекают ли из этих микроскопических условий на основании уравнений микромеханики следствия, требуемые законом вероятности. Если бы мы должны были физически обосновать наличие в рассматриваемых испытаниях настоящего вероятностного закона, то, может быть, мы могли бы искать основу его в элементарных законах квантовой механики (где «подбор» был бы запрещен в силу «дополнительности»), а также в вероятностных законах физической статистики (являющихся, как будет показано в гл. V, «настоящими» вероятностными законами).

Но во всяком случае,— и в этом суть нашего тезиса — обращение к классической механике ничего не могло бы нам объяснить. Классическая механика не только не дает возможности «вывести» вероятностный закон, но, более того, не может дать возможности его интерпретировать, т. е. установить такое соответствие понятий, входящих в формулировку закона, и понятий классической механики, при котором взаимная связь понятий, указываемая законом, совпадала бы с связью, вытекающей из принципов классической механики. В частности, в терминах классической механики не может быть определено само понятие «условий испытания», т. е. понятие «надлежащего приготовления» исследуемой системы (см. § 12). По отношению к рассматриваемому нами вопросу о физической статистике эта общая мысль может быть детализирована. В статистической физике, пока мы основываемся лишь на классической механике, как показано, мы можем исходить только из представления о «реальном» ансамбле. Но, как подчеркивалось в настоящем параграфе, из понятия эмпирического распределения, т. е. из понятия распределения систем в «реальном» ансамбле, ни в какой мере не может быть выведено понятие вероятности; также из существования «реального» ансамбля не может быть сделано заключение о существовании «настоящего» вероятностного закона. Следовательно, вероятностные законы статистической физики не могут интерпретироваться при помощи классических представлений.

Поясним это еще раз примером. Сопоставим входящие в статистический закон понятия о макроскопических областях с классическими понятиями об областях фазового пространства. Из классического представления об осуществлении некоторой начальной области на основании классической механики ни в какой степени не вытекает представление об установлении после времени релаксации такого распределения вероятностей, при котором вероятность области пропорциональна ее величине. В то же время статистические законы требуют осуществления именно такой связи входящих в закон и подлежащих классической интерпретации понятий. Иначе говоря, этот закон требует того, чтобы при любом начальном макроскопическом состоянии после времени релаксации устанавливалось распределение вероятностей макроскопических состояний, описываемое флюктуационной формулой.

Заключение, которое можно сделать из всего сказанного в настоящем параграфе, подтверждает полученный в конце § 12 результат: статистическая физика не может быть построена на основе классической микромеханики.

§ 14. В § 8 были сформулированы положения наиболее последовательной классической интерпретации статистической физики. Уже отмечалось, что главной идеей этой интерпретации является предположение о равновероятности всех микросостояний внутри выделенной начальным опытом области фазового пространства $\Delta\Gamma_0$. В § 12 и 13 было показано, что такое предположение, как и предположение любого, заранее определенного распределения, в классической теории не может выражать собой закона природы и потому не может служить основой для интерпретации законов статистической физики. Мы показали, что, поскольку в классической теории равновероятность микросостояний внутри области $\Delta\Gamma_0$ не может существовать как закон природы, положение о равновероятности в лучшем случае может рассматриваться как чисто эмпирическое положение, как характеристика результатов произведенных опытов, т. е. как выражение свойств «реального» ансамбля.

В настоящем параграфе мы ставим вопрос о том, действительно ли опыт указывает на существование равномерного распределения в рассматриваемых нами «реальных» ансамблях (опыт может выделять всевозможные области $\Delta\Gamma_0$ и в соответствии с этим мы можем рассматривать различные «реальные» ансамбли). Укажем сразу же результат, к которому мы придем: опыт не только не подтверждает предположения о равномерном распределении в «реальных» ансамблях, а, наоборот, дает возможность показать, что равномерное распределение, так же как и близкие к нему распределения («близкие» в определенном ниже смысле) заведомо не осуществляются в природе. Прежде чем перейти к доказательству, отметим еще раз, что полученный в настоящем параграфе результат, так же как и результат § 12 и 13, представляет собой аргумент, направленный против классической теории § 8. Эти два результата совершенно независимы друг от друга.

Доказательство легко может быть получено на основании того, что, согласно предположениям классической теории, выделяемые опытом области $\Delta\Gamma_0$ в очень широких пределах могут быть любыми (см. § 1 и 8). Произвольным может быть их взаимное расположение, области могут не иметь общих точек, могут иметь общую часть или могут целиком покрывать друг друга; в частности, при помощи изменения характера определяемых в опыте (и приводящих к выделению областей $\Delta\Gamma_0$) параметров и изменения точности их определения всегда можно получить такую совокупность областей $\Delta\Gamma_0$, при которой любая пара областей может быть соединена цепью попарно пересекающихся областей. Легко видеть, что, ввиду сказанного, предположения о равномерных распределениях в «реальных» ансамблях, соответствующих областям $\Delta\Gamma_0$, совместимы лишь при наличии равномерного распределения на всей поверхности заданной энергии. Действительно, для пересекающейся пары областей M и N плотность вероятности «реального» ансамбля, образованного системами, находящимися в общей части этих областей M и N, с одной стороны, должна быть равна плотности вероятности в M, а с другой стороны,— плотности вероятности в N (мы предполагаем, что плотность вероятности нормирована всегда в полном «реальном» ансамбле). Следовательно, плотности вероятности в M и N равны друг другу, а следовательно, равны и во всех областях $\Delta\Gamma_0$. Таким образом, предположение о равномерном распределении в «реальных» ансамблях, соответствующих различным выделяемым начальным опытом областям $\Delta\Gamma_0$, приводит к заключению о равномерном распределении в полном «реальном» ансамбле, соответствующем всей поверхности заданной энергии.

Последнее заключение уже может быть непосредственно сопоставлено с опытом. Чтобы представить себе результат сравнения, достаточно учесть, что именно установление равномерного распределения на поверхности заданной энергии (при эргодическом мероопределении) характеризует произошедшую в системе релаксацию. Если бы в действительности — в полном «реальном» ансамбле — системы были бы равномерно распределены на поверхности заданной энергии, то практически возможность встретить систему в неравновесном состоянии была бы совершенно исключена: это было бы столь же мало вероятно, как и возможность встретить систему в неравновесном состоянии после времени релаксации. (Мы говорим здесь о вероятностном распределении систем в «реальном» ансамбле, забывая о том, что, согласно § 13, это незаконно; указанный вероятностный закон следует себе представить, например, подобно вероятностному закону в «реальном» ансамбле, образованном колодой карт, в примере § 13; в настоящем параграфе мы ставим себе целью, следуя за обычным ходом рассуждений в классической теории, выяснить возможности, предоставляемые использованием понятия «реального» ансамбля, независимо от аргументации § 12 и 13.) В действительности мы находим сколько угодно систем, не находящихся в состоянии равновесия: констатируем наличие разностей температур частей тела или различных тел, наличие разностей давлений и концентраций и т. д., одним словом,— наличие всевозможных кинетических процессов, свидетельствующих об отсутствии термодинамического равновесия в тех системах, в которых они происходят. Таким образом, сделанные нами предположения приводят нас к выводу о практической невозможности (ничтожно малой вероятности) явлений, наблюдаемых в действительности. Следовательно, наши предположения должны быть отвергнуты.

Если бы мы проверяли правильность сделанных предположений на одной лишь статистической системе и она оказалась бы в неравновесном состоянии, то этого было бы уже достаточно, чтобы притти к только что сделанному заключению. Если же мы можем наблюдать большое количество систем, то мы получаем еще возможность приложения закона больших чисел. Если число систем достаточно велико, то сколь угодно близка к нулю вероятность того, что доля систем, находящихся в неравновесных состояниях, на заранее фиксированную величину больше той доли, которая соответствовала бы математическому ожиданию числа неравновесных систем при равномерном законе распределения. В частности, при достаточно большом числе систем эта вероятность может стать несравненно меньше, чем вероятность неравновесного состояния одной системы. Если окажется, что в действительности доля систем, находящихся в неравновесных состояниях, достаточно велика, чтобы быть практически вполне заметной, то основания в пользу сделанного выше заключения станут еще несравненно больше, чем при опыте над одной системой. Опыт дает нам для нашего заключения и эти дополнительные основания. Имея в виду содержание следующего параграфа, отметим, что для использования закона больших чисел нет необходимости в существовании большого числа тождественных систем. Достаточно, чтобы существовало большое число разных систем, для каждой из которых ничтожно мала вероятность осуществления неравновесного состояния при равномерном законе распределения на поверхности заданной энергии. При этом следует пользоваться законом больших чисел в форме, обобщенной на случайные величины с разными законами распределения и разными математическими ожиданиями (теорема Маркова [14]).

Нетрудно видеть, что степень достоверности нашего заключения о необходимости отказа от предположений равновероятности определяется пренебрежением как раз теми же малыми вероятностями, которыми мы пренебрегаем, когда на основании опыта заключаем о виде существующего после релаксации вероятностного закона распределения состояний. Эта степень достоверности определяется пренебрежением теми ничтожно малыми вероятностями, которые указываются законом больших чисел для сколько-нибудь заметных отклонений от распределения равновесных и неравновесных состояний, задаваемого существующим, по предположению, вероятностным законом. Пренебрегая этими вероятностями, мы считали, что соответствующие этим вероятностям события практически невозможны; эта уверенность была основой обоих упомянутых выше заключений. В этом смысле можно сказать, что степень достоверности нашего заключения о несуществовании закона равномерного распределения микросостояний столь же велика, как и степень достоверности заключения о существовании законов релаксации, т. е. законов, образующих главное содержание физической статистики.

Часто утверждается, что наш мир эволюционирует, исходя из некоторого неравновесного состояния. Очевидно, что делаемое при этом утверждение не только не совместно с предположением о равномерном законе распределения микросостояний на поверхности заданной энергии, но, наоборот, является прямым выражением того, что в настоящий момент равномерное распределение микросостояний не существует.

Предположение о равновероятности микросостояний поверхности заданной энергии (так называемое эргодическое распределение) было отвергнуто нами на основании непосредственного сопоставления его с опытом и, в частности, на основании сравнения с опытом определяемой этим предположением вероятности обнаружить неравновесное состояние. Сопоставление с опытом может быть проведено и несколько иным путем. Равномерное на поверхности заданной энергии распределение вероятностей, как известно, стационарно. Следовательно, математическое ожидание любой, относящейся к рассматриваемой системе величины, являющейся функцией состояния, не изменяется со временем. Между тем, H-теорема указывает на возрастание энтропии. Именно этот аргумент был выдвинут в свое время Цермело [4], рассматривавшим его как доказательство невозможности молекулярно-кинетического истолкования второго начала (аналогично предыдущему этот аргумент может быть усилен при помощи соединения его с законом больших чисел). Об этом доводе Цермело мы упоминали в § 3. Мы отметили там также, что рассуждения Цермело должны быть дополнены совершенно новыми аргументами.

Действительно, Цермело исходит из предположения, что существует некоторое безусловное (в противоположность условному, возникающему при условии, что предварительный опыт выделил область $\Delta\Gamma_0$) и инвариантное относительно движения, т. е. стационарное, распределение вероятностей. Приняв, несколько произвольно, за меру вероятности меру по Лиувиллю (т. е. на поверхности заданной энергии эргодическую меру), Цермело пришел к равномерному распределению вероятностей на поверхности заданной энергии. Между тем, ни предположение безусловных вероятностей, ни предположение стационарности закона распределения вероятностей не являются в классической теории непосредственно необходимыми. Поэтому ответ, который, по существу, давался в статистической физике на аргументы Цермело, заключался в том, что, отказываясь от этих предположений, принимали существование условных вероятностей и нестационарного распределения вероятностей; принимали существование вероятностей в условиях того, что опыт выделил область $\Delta\Gamma_0$, и принимали, что функция распределения равна нулю вне $\Delta\Gamma_0$ и постоянна внутри $\Delta\Gamma_0$ (см. § 4). Очевидно, что такое распределение вероятностей нестационарно, а также физически очевидно, что нестационарность распределения вероятностей в таких условиях (в противоположность распределениям, возникающим после времени релаксации) совершенно естественна: распределение вероятностей должно изменяться в соответствии с движением области $(\Delta\Gamma_0)_t$. Последнее обстоятельство,— то, что в классической теории непосредственное требование стационарности распределения вероятностей в общем случае не является обоснованным и не должно ставиться,— обычно не отмечалось достаточно ясно. (См., например, обзор Эренфестов, примечание 170 и, в частности, п. е, где стационарность распределения вероятностей подразумевается как очевидное требование.) Только при помощи промежуточного звена соображений начала этого параграфа можно перейти от характерной для классической теории постановки задачи (§ 4) к предположению о равномерном распределении вероятностей на всей поверхности заданной энергии.

Сделаем несколько замечаний о соотношении содержания настоящего параграфа и некоторых пунктов той критики классической теории, которая была дана в предшествующих параграфах.

В начале § 13 мы рассматривали возражение, направленное против нашего основного тезиса (о возможности в классической механике «подбора» начальных микросостояний и о порождаемой этим невозможности вероятностного закона равнораспределения). Смысл этого возражения заключается в том, что «никто не занимается искусственным «подбором» начальных микросостояний; наши опыты относятся к тем микросостояниям, которые существуют в природе». В § 13 мы ответили на это возражение, указав, что каковы бы ни были результаты наших прошлых опытов, проведенных над объектами природы, в классической механике, исходя из условия, что нам задана область $\Delta\Gamma_0$, мы не имеем никаких гарантий на будущее; поэтому при помощи ссылки на «реальный» ансамбль,— на то, что «так в природе»,— мы ни в какой мере не можем обосновать вероятностный закон распределения. Сейчас мы можем дополнить этот ответ другим соображением: опыт показывает, что в «реальном» ансамбле — в природе — нет равномерного распределения. Таким образом, ссылка на «существующие в природе состояния» не достигает цели, т. е. обоснования закона равномерного распределения микросостояний, в силу двух, логически независимых причин.

Отметим, что последнему утверждению — об отсутствии равномерного распределения в «реальном» ансамбле — не следует придавать смысла «космологического» аргумента. Он ни в какой мере не опирается на какие-либо предположения об эволюции мира как целого из неравновесного состояния в равновесное и другие подобные гипотезы; он только констатирует существующее положение вещей: отсутствие на поверхности энергии равномерного распределения вероятностей для различных существующих в природе статистических систем — частей атмосферы, частей земной поверхности, различных твердых тел и т. д.

Теперь мы можем также сделать несколько более общим заключение о приведенных в § 11 примерах механического станка и неравномерно движущегося тела: вопреки классической теории (см. § 4 и 8) у нас нет никаких оснований ждать в общем случае равномерного закона распределения начальных микросостояний (как в силу причины, охарактеризованной в § 12 и 13, так и причины § 14). Законом статистической механики является не наличие равномерного закона распределения в начальный момент, а *появление* равномерного закона распределения *после времени релаксации*. Поэтому в начальный момент распределение вероятностей не должно быть равномерным, в частности, и для механического станка или для неравномерно движущегося как целое газа. Распределение становится равномерным после времени релаксации, если ускорение перестает изменяться, или если ускорение изменяется настолько медленно, что за время релаксации вид предельного распределения вероятностей (определяемый видом поверхности постоянной энергии, на которой происходит размешивание) изменяется незначительно. Но способностью к релаксации обладают лишь системы размешивающегося типа. Как можно убедиться, механический станок не является размешивающейся системой (см. гл. VI). В объяснении релаксации статистических систем, т. е. установления равномерного распределения вероятностей после времени релаксации, заключается главная задача микроскопической интерпретации статистики.

Рассмотрим еще одну сторону вопроса о равновероятности микросостояний выделенной опытом области $\Delta\Gamma_0$. Пусть проведенный микроскопический опыт установил наличие состояния A_1. В соответствии с классической теорией § 8, предположим, что все микросостояния области A_1 одинаково вероятны. Если, в соответствии с макроскопическими уравнениями, через время Δt макроскопическое состояние A_1 перешло в состояние A_2, то в состоянии A_2 предположение равновероятности, очевидно, уже не может выполняться: вероятность отлична от нуля в тех частях A_2, которые произошли из A_1, и равна нулю в остальных частях (как обычно, мы предполагаем, что подавляющая часть области A_1 перешла в область A_2, но составляет ничтожно малую часть A_2, так как A_2 — более равновесное состояние). В этом смысле предположение равномерного распределения вероятностей внутри макроскопической области (соответствующей имеющемуся макроскопическому состоянию), будучи сделано в начальный момент, не сохраняется во времени.

Отметим, что для макроскопических выводов, относящихся к будущему течению процесса, как легко себе представить, это «несохранение предположения о равновероятности» не может привести к противоречию вследствие наличия размешивания. Если сделать предположение о равновероятности микросостояний A_2, не учитывая того, что A_2 произошло из A_1, то макроскопические предсказания не будут отличаться от тех, которые были бы сделаны, если бы происхождение имеющегося состояния было учтено: части области A_1 будут в достаточной мере равномерно размещены по области A_2 (см. гл. V и VI). В противоположность этому, макроскопические заключения о прошлом течении процесса, которые были бы сделаны, исходя из предположения, что в состоянии A_2 также имеется равновероятность, противоречили бы заключениям, сделанным исходя из A_1, и были бы ложны. Предположив равновероятность точек A_2, мы должны были бы заключить, что состояние A_2 с подавляющей вероятностью произошло из еще более равновесного состояния A_3, так как подавляющее большинство точек макроскопической области не только входит в более равновесную область, но и выходит из нее; в действительности же состояние A_2 произошло из менее равновесного состояния A_1.

Определим категорию испытаний, приводящих к вероятностному закону равнораспределения микросостояний, надлежащим образом, т. е. допустим, что из условия осуществления области $\Delta\Gamma_0$ следует существование равномерного распределения для микросостояний этой области. Тогда, опираясь на это допущение и забывая о возможности подбора начальных состояний, можно было бы представить, что взятое само по себе «несохранение предположения о равновероятности» логически не означало бы еще никакого внутреннего противоречия теории. В частности, приведенное выше противоречие заключений о прошлом течении процесса объяснялось бы следующим образом: знание того, что до состояния A_2 система была в состоянии A_1, образует дополнительный признак, выделяющий из совокупности микросостояний области A_2 некоторую подсовокупность, обладающую иными законами распределения. Можно, однако, учесть возможность макроскопического подбора начальных состояний (возможность, требующую еще меньшего, чем возможность подбора микроскопических состояний, о которой главным образом говорилось до сих пор). Тогда «несохранение предположения о равновероятности» будет свидетельствовать о принципиальной прочности теории, построенной на этом предположении, т. е. о неопределенности категории испытаний, соответствующих этому предположению, или, иначе говоря, будет являться частным выражением главного, направленного против классической теории, аргумента § 12 о возможности такого подбора начальных состояний, при котором закон распределения микросостояний не будет равномерным. Действительно, благодаря совершенно очевидной возможности подбора определенных макроскопических состояний (возможности очевидной, даже если не опираться на представления классической механики), мы можем создать сколь угодно длинный ряд опытов, в каждом из которых начальным макроскопическим состоянием будет A_1. Если мы предположим, что в состоянии A_1 закон равномерного распределения микросостояний выполнен, то благодаря несохранению предположения о равновероятности во времени, через время Δt в состоянии A_2 равновероятности микросостояний уже не будет. Мы получили частное выражение аргумента § 12: сколь угодно длинный ряд опытов, в которых реализуется макроскопическое состояние A_2 и заведомо нет равновероятности микросостояний внутри A_2. Отметим, что «несохранение предположения о равновероятности» дает возможность установить противоречивость предположений о равновероятности микросостояний, исходя из возможности подбора макроскопических состояний.

Аналогично этому, если учесть не макроскопическую возможность подбора, а некоторый макроскопический факт, характеризующий «реальный» ансамбль, то «несохранение предположения о равновероятности» будет являться частным выражением главного, направленного против классической теории, аргумента (настоящего параграфа), указывающего на отсутствие равномерного распределения микросостояний в «реальном» ансамбле. В самом деле, учтем, что в действительности неравновесное макроскопическое состояние A_2 практически никогда не является наивысшей точкой флюктуации и не происходит из более равновесного состояния A_3, а, наоборот, практически всегда происходит из менее равновесного состояния A_1, и предположим, что в A_1 микросостояния равновероятны. Тогда мы получим, что в состоянии A_2 «реального» ансамбля равновероятности микросостояний практически никогда не бывает (напомним, что под последней мы подразумеваем условие того, что вероятность любой части области A_2 пропорциональна ее мере). Так же, как и выше, «несохранение предположения о равновероятности» показывает противоречивость предположений о равновероятности микросостояний «реального» ансамбля, если исходить из некоторого макроскопического факта.

Цермело в своей критике теории Больцмана особенно подчеркивал необходимость доказательства сохранения вероятностных предположений во времени, точнее говоря, доказательства того, что вероятностные предположения без противоречия могут быть отнесены ко всем моментам времени. Главным образом он имел в виду предположение о числе соударений («гипотезу молекулярного беспорядка»).

Как известно, при статистическом понимании молекулярно-кинетической теории это предположение может быть принято без противоречия [1]. Когда Цермело [4] писал о невозможности, исходя из незнания начального микросостояния (на самом деле, вполне определенного), заключить о «гипотезе молекулярного беспорядка», то он имел в виду, во-первых, что неизвестное нам микросостояние может не удовлетворять этой гипотезе, а во-вторых, что эта гипотеза может не сохраняться во времени. Статистическое толкование молекулярно-кинетической теории дает вполне удовлетворительные объяснения обоих пунктов. Математические трудности, связанные с первым из них, в большой степени были устранены Джинсом [15]. Цермело ни в какой мере не имел в виду вопроса возможности существования в классической механике вероятностного закона в том смысле, в каком этот вопрос поставлен в § 12. Он считал очевидной возможность делать в начальный момент вероятностные утверждения о распределении микросостояний и подчеркивал лишь отсутствие доказательства того, что сделанные утверждения сохраняются во времени.

Отметим возможность некоторого расширения основного результата этого параграфа. Мы доказали, что в «реальном» ансамбле нет равномерного закона распределения. Покажем, что в «реальном» ансамбле не может быть распределений, близких к равномерному. Под распределениями, «близкими к равномерному», будем понимать следующие: области, соответствующие последовательным, переходящим друг в друга по макроскопическим уравнениям состояниям, изменяются по величине в огромное число раз (порядка $e^{\frac{\Delta s}{k}}$, где Δs — разность энтропий последовательных макроскопических состояний). Если функция распределения такова, что отношение максимального и минимального значений плотности вероятности ничтожно мало по сравнению с величиной $e^{\frac{\Delta s}{k}}$, то мы будем называть распределение близким к равномерному; очевидно, что это понятие соотносительно с типом макроскопического определения состояний. Легко видеть, что если распределение «близко к равномерному», то указываемая им вероятность неравновесных состояний ничтожна. Следовательно, наше рассуждение (доказывающее, что распределение в полном «реальном» ансамбле не является равномерным) переносится и на этот случай. А отсюда (из того факта, что распределение в полном «реальном» ансамбле не может быть «близким к равномерному») легко можно сделать некоторые заключения о распределениях в выделяемых опытом областях $\Delta\Gamma_0$ «реального» ансамбля. Мы можем, в частности, получить некоторые условия, гарантирующие, что распределения также не внутри области $\Delta\Gamma_0$ (в частности, внутри макроскопических областей) не могут все одновременно быть слишком близкими к равномерным. Распространение нашего рассуждения на распределения, близкие к равномерным, имеет некоторое значение в связи с содержанием § 19.

В качестве примечания к настоящему параграфу отметим следующее: приведенное в этом параграфе доказательство того, что предположение о равномерном законе распределения внутри выделенной опытом области $\Delta\Gamma_0$ противоречит опыту, относится к «реальному» ансамблю. В противоположность понятию «идеального» ансамбля, соответствующего настящему вероятностному закону, понятие «реального» ансамбля имеет в классической теории определенный физический смысл (см. § 13). В упомянутом доказательстве § 14 мы, забывая на время о результатах § 13, говорили о в е р о я т н о с т и обнаружить в опыте те или иные системы «реального» ансамбля, но, как тогда же было пояснено, считали при этом, что «реальный» ансамбль существует «сам по себе», независимо от того, какие его части выделены предварительным опытом, определившим область $\Delta\Gamma_0$. Иными словами, мы говорили о вероятности того, что перед нашим измерительным прибором окажется та или иная система «реального» ансамбля. Эта вероятность подобна той, что возникает при перемешивании колоды карт, или той, что возникает, когда вращающаяся стрелка рулетки может остановиться против той или иной из цифр, стоящих на окружности стола и образующих «реальный» ансамбль. Но хотя мы и говорили там о в е р о я т н о с т я х, соответствующий им ансамбль, как видно из сказанного, оставался «р е а л ь н ы м», в противоположность «идеальному» ансамблю, соответствующему настоящему вероятностному закону (подобному законам квантовой механики, см. § 13).

Можно было бы поставить вопрос о доказательстве утверждения, аналогичного доказанному в начале этого параграфа, по отношению к «идеальному» ансамблю. Такое доказательство в классической механике не имело бы физического смысла, но могло бы быть сделано, если не накладывать на области $\Delta\Gamma_0$ никаких ограничений. Оно отличалось бы от приведенного выше доказательства следующим: нельзя было бы считать плотность вероятности в области MN, являющейся общей частью областей M и N, всегда равной и плотности в M, и плотности в N, так как случаи, когда область MN реализуется в условиях опыта, указавшего, что осуществляется область M, отличны от случаев, когда MN реализуется как часть N; эти случаи несовместны, и плотности вероятностей, возникающие в этих случаях, могут быть разными. Иначе говоря, нельзя считать, что плотность в области MN существует «сама по себе», как было в случае «реального» ансамбля. Черты, характеризующие в этом отношении «идеальный» ансамбль, могут быть пояснены простыми примерами из квантовой механики, а также простыми соображениями, относящимися к статистической механике (см. гл. V). Для того чтобы получить требуемое доказательство для «идеального» ансамбля, надо взять настолько большую область $\Delta\Gamma_0$, чтобы неравновесные состояния составляли ее ничтожную часть, и сравнивать с опытом полученное таким образом (равномерное внутри $\Delta\Gamma_0$) распределение вероятностей.

§ 15. В § 12 и 13 было показано, что классическая механика не может служить основой для построения вероятностных законов; в частности было показано, что, исходя из классической механики, нелья получить удовлетворительную интерпретацию закона равномерного распределения начальных микросостояний внутри выделенной опытом области $\Delta\Gamma_0$— закона, лежащего в основе классической теории (§ 4 и 8). В теории, основанной на классических представлениях, понятие «идеального» ансамбля, соответствующего возможным результатам измерений, которые были бы при наличии вероятностного закона распределения, лишено физического смысла. Физический смысл может быть приписан лишь представлению о «реальном» ансамбле. Это представление не может служить точкой опоры для применения к опыту вероятностных законов, но служит некоторой эмпирической характеристикой опыта. В § 14 было показано, что распределение в «реальном» ансамбле (соответствующем области $\Delta\Gamma_0$) не является равномерным, т. е. в классической механике мы не только не можем получить вероятностного закона, но даже не имеем эмпирического распределения, согласующегося с этим законом. В настоящем параграфе мы продвинемся еще несколько дальше в этом же направлении: мы покажем (что почти очевидно), что в классической механике вообще нельзя говорить о точном понятии функции распределения «реального» ансамбля, т. е. о точной эмпирической функции распределения в фазовом пространстве системы. Это связано с тем, что само понятие «реального» ансамбля несколько условно и лишено точного физического смысла. Кроме того, мы покажем, что то условное понятие реального ансамбля, которое может быть создано, совершенно непригодно для целей интерпретации законов изменения функций распределения какой-нибудь данной рассматриваемой системы.

Действительно, когда мы говорим о повторении опытов, служащих для проверки вероятностного закона распределения, то мы говорим всегда о некоторых идеализированных условиях, в частности — о некотором идеализированном описании системы ансамбля, и всегда считаем, что во всех опытах мы имеем дело с точно такой же (идеализированной) системой. В квантовой механике эти идеализированные условия опыта принципиально однородны (см. § 12). В классической механике совершенно однородные условия опыта привели бы к совершенно тождественным результатам испытания; поэтому, в соответствии с Гиббсом, считают, что закон распределения результатов испытаний заранее заключен в законе распределения начальных условий,— даже тождественным образом совпадает с ним (с точностью до однозначного преобразования, производимого уравнениями динамики). О недопустимости — с физической точки зрения — предположения о том, что в классической теории законы статистической физики могут основываться на существовании определенных законов распределения начальных микросостояний, уже много говорилось раньше. Здесь отметим лишь, что и в классической теории представление об «идеальном» ансамбле основано, в соответствии с точкой зрения Гиббса, на представлении совершенно тождественных (по гамильтониану) систем, находящихся в различных микроскопических состояниях.

Идеализация «тождественных систем» вполне допустима в представлении об «идеальном» ансамбле, но очевидно, что в действительности совершенно тождественных систем нет. Поэтому «реальный» ансамбль может быть представлен только как совокупность не вполне тождественных систем (отличающихся как внутренними свойствами — числом и взаимодействием частиц и т. д., так и значениями внешних параметров), находящихся в несколько различных начальных микросостояниях. При этом, если составляющие ансамбль системы отличаются достаточно мало, то состояния всех систем могут быть изображены в фазовом пространстве одной данной системы так, что при указанном отображении метрические отношения будут искажены достаточно мало. Например, отображая состояние какой-либо системы на фазовое пространство данной системы, мы можем пренебречь различием числа частиц этих двух систем, если эта разность достаточно мала по сравнению с общим числом частиц, т. е. если связанный с этими избыточными частицами вклад в расстояния, измеряемые в $2n$-мерном фазовом пространстве, в подавляющем большинстве случаев ничтожно мал по сравнению с общей величиной расстояния, и т. д. Не останавливаясь на этом простом вопросе отметим, что указанное обстоятельство дает возможность сопоставить начальное, неполно определенное состояние (отвечающее области $\Delta\Gamma_0$) данной системы с некоторым «реальным» ансамблем систем, несколько отличающихся от данной и находящихся в микроскопических состояниях, отображаемых на точки области $\Delta\Gamma_0$. Следует только иметь в виду, что понятие этого «реального» ансамбля несколько условно, так как до известной степени произвольны границы, определяющие, какие из существующих систем считаются достаточно мало отличающимися от данной системы, чтобы послужить для образования ансамбля. Поэтому же несколько условна эмпирическая функция распределения «реального» ансамбля. Однако это не противоречит тому, что даже при совершенно различных системах, для которых эмпирическая функция распределения теряет всякий смысл (так как теряет всякий смысл понятие «реального» ансамбля), предположение равномерного распределения вероятностей для каждой из систем совершенно безусловно отвергается опытом (см. § 14).

Но нетрудно видеть, что полученный таким образом «реальный» ансамбль совершенно непригоден для интерпретации распределений результатов будущих опытов, производимых над данной системой. В самом деле, понятие ансамбля служит в классической теории (в частности, в теории Гиббса) для того, чтобы из распределения систем ансамбля, в некоторый момент времени, заключать о распределении вероятностей для данной, соответствующей ансамблю системы, исходящей из неточно определенного начального состояния с областью $\Delta\Gamma_0$. Но в рассматриваемом нами «реальном» ансамбле уже через ничтожно малое время t после момента начального опыта распределение систем ансамбля (точнее говоря, распределение «отображений» их состояний на фазовое пространство данной системы) не будет иметь ничего общего с распределением для данной системы, получающимся через время t после начального опыта при том или ином распределении ее микросостояний в начальный момент (в частности, при том распределении, которое совпадает с распределением «отображений» начальных состояний систем «реального» ансамбля). Иначе говоря, траектории, проходимые в фазовом пространстве данной системы «отображениями» состояний систем «реального» ансамбля (движущихся по своим собственным механическим траекториям), чрезвычайно быстро расходятся с механическими траекториями данной системы, исходящими из тех же начальных микросостояний, что и «отображения». Происходит это потому, что уже ничтожно малые отклонения в силах, действующих на части системы (так же как и ничтожно малые отклонения в начальных микросостояниях), приводят к очень большим отклонениям конечного состояния уже через очень малые (макроскопически ничтожно малые) времена.

Указанное свойство статистических систем, тесно связанное с их принадлежностью к системам размешивающегося типа, определяется тем, что их механические траектории в фазовом пространстве обладают сильной неустойчивостью; поэтому отклонение двух траекторий, как можно показать для примера идеального газа, возрастает со временем по экспоненциальному закону (см. диссертацию). Это свойство фазовых траекторий отмечалось Борелем. Например, как показывает простой расчет, аналогичный расчету, приведенному в диссертации, присутствие в системе, образованной атомами граммолекулы идеального газа (находящегося, допустим, в нормальных условиях), одного лишнего атома, или наличие внешнего (хотя бы только гравитационного) поля, происходящего от одного находящегося рядом с рассматриваемой системой атома, совершенно изменяет траекторию системы. Уже через время порядка десяти времен свободного пробега распределение скоростей молекул будет независимым от того, которое было бы без возмущения. Распределение будет независимым в том смысле, что при определенном, получающемся без возмущения, векторе полной скорости системы в 3 n-мерном импульсном пространстве, этот вектор при наличии возмущения может быть направлен в импульсном пространстве под любым углом к невозмущенному вектору в зависимости от того или иного действия возмущения (действие возмущения определяется тем или иным сочетанием микросостояния системы и параметров, задающих возмущение, в данном случае — положение возмущающего атома).

Поэтому «реальный» ансамбль не может служить для той цели, для которой служит идеальный ансамбль в классической теории (в частности, в теории Гиббса): распределение систем «реального» ансамбля изменяется со временем так, что за интересующие физическую статистику промежутки времени оно делается совершенно иным, чем распределение для данной системы при том же самом, как в «реальном» ансамбле, начальном распределении. Если мы предположим, что системы, исходящие из начальных положений, отмеченных «отображениями» «реальных» систем на фазовое пространство данной системы, движутся по *механической* траектории *данной* системы, то мы потеряем самую идею «*реаль-*

н о г о» ансамбля: потеряем возможность судить о распределении результатов будущих опытов, производимых над данной системой, по распределению в некотором э м п и р и ч е с к о м ряду (т. е. по распределению результатов измерений, производимых в соответствующий «будущий» момент над надлежащим образом выбранным ансамблем «р е а л ь н ы х» систем).

Таким образом, помимо всех изложенных раньше (в § 12 и 13) соображений, показывающих, что в классической теории не может быть построен вероятностный закон и что поэтому распределение результатов старых опытов не может давать какую-либо гарантию распределения результатов новых опытов, мы можем выдвинуть новые веские аргументы против классической теории. Сущность этих аргументов состоит в том, что старые испытания, заключающиеся в определении состояния в начальный и в «будущий» момент, образуют эмпирический ряд, который (при сколько-нибудь значительном интервале времени между начальным и «будущим» моментом, например даже при любом макроскопически малом интервале) вообще не может характеризовать д а н н у ю систему, так как эти испытания проводятся в «реальном» ансамбле н е в п о л н е о д и н а к о в ы х (и, вообще говоря, сильно неустойчивых в фазовом пространстве) систем.

§ 16. Резюмируем содержание § 12—15. Мы показали, что лежащее в основании классической теории предположение о равновероятности микросостояний области $\Delta\Gamma_0$, выделенной начальным неполным опытом, н е м о ж е т о б ъ я с н и т ь с у щ е с т в о в а н и я з а к о н о в статистической физики, так как само это предположение не может рассматриваться как закон природы, дающий нам всегда определенные г а р а н т и и, относящиеся к результатам будущих опытов. В чисто классической теории гарантии, которые выражались бы этим предположением, т. е. предположением, что такой закон справедлив, принципиально не могут существовать. Более того, в силу тех же соображений в классической теории принципиально не может быть дана удовлетворительная интерпретация любого вероятностного закона (§ 12 и 13).

Мы показали, что упомянутое главное предположение классической теории не только не может быть обосновано в рамках классических представлений, но что оно даже н е с о г л а с у е т с я с д а н н ы м и о п ы т а: опыт показывает, что равномерное распределение вероятности внутри области $\Delta\Gamma_0$, как и «близкие» к нему распределения, в действительности не осуществляется (§ 14). Опыт не дает нам также возможности, хотя бы о т к а з а в ш и с ь о т о б о с н о в а н и я вероятностных законов, получить простую иллюстрацию закона изменения вероятностей со временем при помощи ансамбля р е а л ь н о с у щ е с т в у ю щ и х систем. В самом деле, изменения распределений в «реальном» ансамбле за интересующие статистическую физику времена, в силу особых свойств фазовых траекторий статистических систем, не имеют ничего общего с изменениями распределений в фазовом пространстве данной рассматриваемой статистической системы (§ 15).

Мы уже писали в § 12, что суть главного аргумента, направленного против классической теории (аргумента, указывающего на невозможность дать на основе классических представлений интерпретацию настоящего вероятностного закона), может быть выражена в виде утверждения о невозможности в классической теории определять категорию испытаний, служащих для измерения вероятностей (например, испытаний, служащих для установления вероятностного закона распределения микросостояний внутри заданной макроскопической области). Классические представления не дают возможности определять такие однородные условия испытаний, которые позволяли бы все испытания данного ряда характеризовать общим для всех них распределением вероятностей. Для применения понятия вероятности необходимо, чтобы была принципиальная возможность безграничного воспроизведения этих однородных условий испытания. Так как классические представления не дают возможности определять такие однородные условия, то для интерпретации вероятностных законов мы должны дать ответ на вопрос, чем определяется в классической теории выбор условий испытаний, который однозначно определяет в этой теории результаты испытаний. Когда мы говорим, что применение понятия вероятности, бессмысленное по отношению к одному опыту, требует возможности безграничного повторения испытаний, и, следовательно, безграничного воспроизведения условий опыта, то, очевидно, мы не можем предполагать, что эти условия опыта искусственно приготавливаются нами. Такое предположение сделало бы результаты испытаний и закон их распределения совершенно произвольными, зависящими от нашего подбора, и лишило бы всякого основания применение полученных законов распределения к будущим опытам, относящимся к природе (§ 12). Остается лишь возможность предположить, что наши опыты относятся к системам, существующим в природе независимо от искусственного «приготовления», т. е. к системам «реального» ансамбля.

Мы отметили главные причины, делающие понятие «реального» ансамбля непригодным для интерпретации законов физической статистики: «реальный» ансамбль является к о н е ч н о й совокупностью, и уже поэтому его свойства не могут выражать сущность закона, предполагающую сохранение силы закона при соблюдении условий его применимости, т. е. в *бесконечном* ряду мысленно возможных опытов (в бесконечном «идеальном» ансамбле). Кроме того, свойства «реального» ансамбля выражают эмпирические факты, и пока мы опираемся на классическую теорию, не могут дать нам никаких гарантий определенных распределений результатов будущих опытов (§ 13). С другой стороны, мы отметили, что даже отказавшись от обоснования закона и от претензий получить уверенность в его применимости к будущим опытам, мы не можем ни установить согласования распределений в уже произведенных опытах с предполагаемым в классической теории равномерным распределением (§ 14), ни использовать системы «реального» ансамбля для иллюстрации изменения во времени распределений в фазовом пространстве какой-либо фиксированной данной системы (§ 15); последнее — потому, что системы «реального» ансамбля в противоположность системам, искусственно нами «приготовляемым», не могут считаться вполне тождественными.

Опыт показывает, что понятия вероятности и вероятностного закона в полной мере применимы к ряду физических явлений. Мы можем просто ответить на вопрос, при каких физических условиях возможен настоящий вероятностный закон: вероятностный закон возможен тогда, когда (как при максимально полном опыте в квантовой механике) возможно воспроизведение условий опыта, совершенно однородных с условиями данного опыта,— условий, допускающих, однако, иные результаты испытаний (при этом подразумевается, конечно, возможность брать или воспроизводить системы, совершенно тождественные по гамильтониану с системой данного опыта). Под «совершенно однородными» условиями мы подразумеваем условия, не допускающие такого доуточнения, которое дало бы возможность при выполнении этих условий «подбирать» тот или иной результат испытания. При совершенно однородных условиях опытов распределения, получающиеся в рядах результатов испытаний, являются проявлением того же вероятностного закона распределения, которым описывается как данный (безгранично воспроизводимый) опыт, так и последующие (воспроизводящие данный опыт) опыты ряда. Указанный вероятностный закон является общим как для всех испытаний рассматриваемого ряда, так и для всех будущих опытов, производимых в совершенно однородных условиях; это дает возможность сделать заключение о распределениях в будущих опытах на основании распределений в рассматриваемом ряду испытаний. Допуская возможность безграничного воспроизведения совершенно однородных условий, мы приходим к представлению об «идеальном» ансамбле, соответствующем данному вероятностному закону.

Понятие «реального» ансамбля может законным образом войти в вероятностную теорию только как апроксимация понятия «идеального» ансамбля (получаемая при помощи конечного числа испытаний над не вполне тождественными системами, т. е. не при совершенно однородных условиях опытов). Существование вероятностных законов статистической механики (см. § 1) возможно потому, что физические условия, в которых они справедливы, обладают описанным выше характером (см. гл. V). Мы ставим себе целью показать в дальнейшем, что положение в статистической механике, хотя и совершенно иной природы, чем в квантовой механике, в этом отношении аналогично положению, имеющемуся в квантовой механике при максимально полном опыте.

Отметим еще раз соотношение наших, направленных против классической теории, аргументов § 12 и 13, § 14 и § 15: эти аргументы независимы друг от друга. Главный принципиальный аргумент § 12 и 13 является некоторым теоретическим и логическим утверждением о соотношении понятий — понятия вероятностного закона и понятий классической механики; аргументы § 14 и 15 основаны на сопоставлении теоретических и опытных фактов. Эти аргументы привели нас к выводу, заключающемуся в том, что классическая механика не может быть основой для построения статистической физики. Этому выводу, конечно, должен быть придан не тот смысл, что классическая механика не может дать нам всего необходимого для обоснования статистики и должна быть дополнена элементами вероятностных представлений. Такое заключение было бы совершенно очевидным (см. § 2 и 4) и в настоящее время является общепризнанным (см., например, обзор Эренфестов [1]). Сделанный вывод означает значительно большее: при любом логически допустимом соединении вероятностных представлений и классической механики * не может быть достигнута цель обоснования физической статистики; иначе говоря, классическая механика не может служить той микромеханикой, на основе которой может быть построена статистическая физика. Действительно, наш главный аргумент, изложенный в § 12 и 13 (как и соображения § 10), основан на одной лишь главной черте классической механики — на отсутствии в уравнениях вероятностного элемента. Эта черта может быть принята за определение классической механики, и поэтому отказ от каких-либо

* Физически допустима лишь та форма соединения, которая выражается вероятностными предположениями о распределении начальных микросостояний, что было доказано Больцманом при его статистическом толковании молекулярно-кинетической теории; см. § 4.

частных свойств классической механики не может изменить сделанного нами вывода.

Именно потому, что в сделанном выводе речь идет о непригодности классической механики как микромеханики в качестве основы для построения физической статистики, изложенные выше соображения о невозможности интерпретации вероятностных законов на ее основе (§ 10—15) едва ли могли бы возникнуть во времена Больцмана и современных ему дискуссий об обосновании термодинамики. С одной стороны, тогда было очевидно, что существуют настоящие вероятностные законы физики (не просто эмпирические частости, а законы, дающие нам гарантии определенных распределений результатов в будущих опытах), а с другой стороны, не было и мысли о возможности иной, отличной от классической микромеханики. В настоящее время, после появления квантовой механики, независимо от убедительности этих соображений по существу, возможность таких выводов, как сделанные нами, уже не кажется заранее исключенной.

Мы изложили критические аргументы § 12—16, может быть, слишком подробно потому, что они выражают главное в решении вопроса о возможности построения физической статистики на основе классической механики. Мы уже отмечали, что некоторые из изложенных соображений (в особенности § 12 и 13) кажутся необычными для физических рассуждений. Это объясняется тем, что сам поставленный вопрос о возможности обоснования физической статистики совершенно специфичен и во многих отношениях носит скорее логический, чем конкретно физический характер. В особенности некоторые части рассуждений § 12 и 13, после того как мы ясно представим себе их результат, кажутся очевидными и почти тривиальными. Такой характер этих рассуждений определяется тем, что речь идет в них не об опытных фактах, а о логическом соотношении понятий. Однако в своей совокупности наши рассуждения позволяют нам притти к выводу, звучащему значительно менее тривиально, выводу, противоречащему широко распространенным взглядам и, в частности, классической точке зрения. Мы приходим к утверждению, что построение статистической механики на основе классических представлений принципиально невозможно. Отмеченные в § 12—16 соотношения понятий и данные опыта выражают не только наиболее простые, но и наиболее глубокие свойства существующего положения вещей. Признав наличие этих свойств, мы не можем не притти к окончательному заключению, являющемуся прямым их логическим следствием: на основе классической механики невозможна удовлетворительная интерпретация статистической физики, иначе говоря, невозможно построение статистической физики, так как невозможна интерпретация ее законов. Можно сказать, что на основе классической теории мы не можем объяснить существования законов статистической механики,— не можем понять возможность существования этих законов.

В § 12—16 мы получили также некоторое указание, по какому пути мы должны двигаться в дальнейшем. Опыт не дает нам равномерного распределения *начальных* состояний. Опыт указывает на существование определенных вероятностных законов изменения состояний *во времени* и, в частности, показывает, что при постоянных (или достаточно медленно изменяющихся) внешних параметрах *при любом начальном состоянии установление состояний после времени релаксации* определяется *равномерным* распределением вероятностей на поверхности заданной энергии. В последней фразе понятие «состояния» не имеет, конечно, классического смысла: это — эмпирическое, не опирающееся ни на какую теоретическую схему понятие (под «состояниями» подразумеваются состояния, которые могут быть получены или воспроизведены в действительности при помощи всех возможных в действительности измерений). Эти вероятностные законы справедливы при любом возможном «подборе» начальных состояний, лишь бы выбор начальных состояний согласовался с указанными в формулировке закона условиями его применимости. Мы должны будем искать обоснования таких законов; говоря точнее, мы должны будем определить их отношение к принципам микромеханики, т. е. мы должны будем получить возможность их интерпретации, опирающейся на представления существенно неклассической природы.

§ 17. В предыдущем параграфе мы сделали обзор изложенных в § 12—15 главных аргументов, направленных против классического обоснования физической статистики. Параграфы 10 и 11 также содержали критику классической точки зрения, но имели как бы предварительный характер и взятые сами по себе были бы недостаточны, чтобы полностью отказаться от этой точки зрения. В настоящем параграфе мы укажем еще на один простой довод, говорящий против классической теории. Взятый изолированно от остального, этот довод также не мог бы быть решающим, но он должен быть добавлен ко всему сказанному раньше, чтобы получить законченную систему аргументов.

Мы будем исходить из той формы, опирающейся на классическую механику теории, которая была охарактеризована в § 4 и 8. Уже не раз мы подчеркивали, что эта форма классической теории осуществляет максимум возможностей интерпретации тех черт статистики, которые вообще поддаются интерпретации на основе классической механики. В § 4—8 мы охарактеризовали главные черты этой схемы истолкования статистики (в частности, более подробно остановились на отсутствовавшем в больцмановской схеме общем требовании того, чтобы статистические системы были системами размешивающегося типа) и подчеркивали ее центральную идею — предположение о равновероятности *начальных* микросостояний (или, говоря более точно, предположение распределений равномерных или близких к равномерным). Эта идея является совершенно *необходимой основой* всякой попытки истолкования статистической физики при помощи *классической механики*; она была основой больцмановского статистического толкования термодинамики и, *поскольку* больцмановское толкование *исходило из классической механики*, была *доказана* этим толкованием.

Идея статистического толкования термодинамики, как известно, возникла потому, что отнюдь не все микроскопические начальные состояния приводят к соответствующему H-теореме течению процесса. H-теореме (как и другим макроскопическим законам) можно придать поэтому лишь статистический смысл, опираясь на утверждение, состоящее в том, что подавляющее большинство микросостояний данной, выделенной начальным опытом области $\Delta\Gamma_0$ приводит к течению процесса, согласующемуся с H-теоремой. Однако это утверждение справедливо лишь при известных ограничениях величины и формы «начальных» областей $\Delta\Gamma_0$ (см. также § 8). Так, например, если подавляющее большинство микросостояний области $\Delta\Gamma_0$ через время t приводит к возрастанию энтропии, то подавляющее большинство микросостояний области $(\Delta\Gamma_0)_t^-$ приводит через время t к убыванию энтропии [$(\Delta\Gamma_0)_t^-$ — область, полученная обращением скоростей во всех микросостояниях области $\Delta\Gamma_t$, полученной из $\Delta\Gamma_0$ через время t]. Если бы мы пытались, формулируя H-теорему, избежать упомянутого ограничения величины или формы областей $\Delta\Gamma_0$, то мы не смогли бы избежать модифицированной формы возражения обратимости, заключающейся в указании на существование таких областей $(\Delta\Gamma_0)_t^-$. Первоначальная, принадлежащая Лошмидту, форма возражения обратимости устранялась больцмановским статистическим толкованием термодинамики (см., например, обзор Эренфестов [1]). Однако модифицированная форма, исходящая из представления о начальном состоянии, как об области, а не о точке фазового пространства, может быть устранена лишь указанным в § 8 ограничением величины и формы начальных областей. Процесс релаксации будет монотонным и будет удовлетворять всем макроскопическим уравнениям кинетики только в том случае, если такие области, как $(\Delta\Gamma_0)_t^-$, будут исключены как возможные «начальные» области (т. е. как области, соответствующие результатам начального опыта). Только в этом случае указанный в § 4 больцмановский принцип равновероятности микросостояний «начальной» области обеспечивает желаемый результат: выполнение H-теоремы и других законов кинетики.

Область $(\Delta\Gamma_0)_t^-$ равна по мере области $\Delta\Gamma_0$ и поэтому не может быть исключена на основании каких-либо требований, предъявляемых только к величине областей. Но вследствие размешивающегося характера движения, если область $\Delta\Gamma_0$ имела простую форму, то область $(\Delta\Gamma_0)_t^-$ будет иметь крайне сложную, паутинообразную форму. Поэтому ее можно исключить из числа возможных «начальных» областей, потребовав, чтобы все возможные «начальные» области были достаточно просты по форме (это можно, например, выразить в виде условия, чтобы отношение поверхности области к ее объему было не слишком велико). Мы не будем останавливаться здесь на количественной стороне дела, достаточно ясной, если учесть свойства размешивающегося движения и общие представления об описании релаксации в фазовом пространстве (см. § 5 настоящей главы). Укажем прямо достаточно очевидный результат: для систем размешивающегося типа можно получить гарантию монотонности процесса релаксации, т. е. того, что законы кинетики — H-теорема и др.— будут выполняться с подавляющей вероятностью, если потребовать, чтобы начальные области были не слишком малы и обладали достаточно простой формой. Первая половина указанного требования — условие, что начальные области не должны быть слишком малы,— необходима потому, что всегда можно выбрать такую часть $(\Delta\Gamma_0)_t^-$, что эта часть будет простой формы и будет приводить к нарушению законов кинетики с подавляющей вероятностью или даже с вероятностью, равной единице. Однако из-за крайне сложной формы $(\Delta\Gamma_0)_t^-$, т. е., в конечном счете, вследствие размешивающегося типа движения, эта часть будет крайне мала. В то же время, совершенно очевидно, что если отказаться от указанного требования, то не будет никаких гарантий соблюдения H-теоремы и других законов кинетики; при соответствующих $\Delta\Gamma_0$ эти законы будут нарушаться с подавляющей вероятностью (если принять принцип равновероятности микросостояний), а при некоторых $\Delta\Gamma_0$— с вероятностью, равной единице.

Отметим также, что если мы, следуя чисто классическим идеям, не будем налагать на «начальные» области никаких ограничений их величины, то, беря все меньшие и меньшие области $\Delta\Gamma_0$, мы будем получать неограниченно возрастающие значения времени релаксации (см. § 5). Такое возрастание, вполне понятное с классической точки зрения, находится, однако, так же как и немонотонный, противоречащий H-теореме ход релаксации, в противоречии с опытом: мы никогда не наблюдаем слишком больших времен релаксации, т. е., говоря более точно, никогда не наблюдаем ряда опытов с безгранично возрастающим временем релаксации данной системы. Это совершенно естественно, так как уменьшение областей $\Delta\Gamma_0$ ограничено в действительности квантовыми эффектами. Наличие таких эффектов ограничивает время релаксации и, как будет видно дальше, в силу быстрого размешивания (в частности, экспоненциальной расходимости траекторий системы) ограничивает довольно сильно (см. диссертацию). Таким образом, для того чтобы при классическом истолковании физической статистики не возникло прямого противоречия с законами статистики, необходимо с самого начала принять указанные условия, накладываемые на «начальные» области $\Delta\Gamma_0$ (т. е. области, к которым, как показывает начальный опыт, заведомо принадлежат микросостояния системы, осуществляющиеся в начальный момент времени). Как будет показано дальше, некоторые условия, подобные данному, возникнут как результат учета влияния измерения (см. гл. V). Но в чисто классической теории такие условия никак не могут быть обоснованы, они являются некоторым чужеродным элементом и лишают теорию последовательности. Именно об этом, направленном против классической теории доводе мы упоминали в начале настоящего параграфа.

Для того чтобы установить соотношение этого довода с нашими главными аргументами (§ 12 и 13), следует отметить, что последние имели своим непосредственным предметом не вид областей $\Delta\Gamma_0$, а существование вероятностного закона распределения микросостояний внутри этих областей и возможность «подбора» микросостояний. Даже если выделяемые начальным опытом области $\Delta\Gamma_0$ удовлетворяют указанным выше условиям, возможен «подбор» определенных микросостояний внутри этих областей, в частности — подбор «аномальных» (осуществляющих противоречащее статистике поведение системы) частей этих областей. Именно возможность такого «подбора» является выражением аргументов § 12 и 13.

Однако более точное определение смысла ограничений, накладываемых на «начальные» области, показывает, что эти ограничения оказываются в классической теории незаконными в силу тех же основных аргументов (§ 12—14), которые делали незаконным также и представление о равновероятности начальных состояний.

Заметим сначала, что введенные в § 8 ограничения «начальных» областей были бы понятны только в том случае, если бы они распространялись на все измерения, а не только на начальные: ведь любое измерение можно рассматривать как начальное для дальнейших опытов. Но такие ограничения всех измерений совершенно несовместимы с принципами классической теории, допускающей любую точность определения состояния системы и возможность «приготовления» системы в любом состоянии, и поэтому в классической теории не могут быть приняты. В § 8 отмечалось, что «аномальные» области (определяющие поведение системы, противоречащее второму началу) при принятом там ограничении не могут быть констатированы в начальных опытах. Тем не менее наличие «аномальных» областей в начальный момент может быть установлено через макроскопическое время τ после начального момента в тех случаях, когда система оказывается в макроскопическом состоянии, менее равновесном, чем начальное (при этом части «аномальной» области, имеющей паутинообразную форму, собираются в область той же величины, но сравнительно простой формы). Вероятность такого течения процесса, в силу принятого принципа равновероятности, равна той доле полной «начальной» области, которую образует «аномальная» область, т. е. определяется соответствующей флюктуационной формулой.

Поэтому естественна попытка заменить введенное в § 8 ограничение «начальных» областей следующим постулатом: начальное измерение может быть сколь угодно точным, но всякое более «тонкое» измерение, приводящее к областям малой величины и сложной формы, следует представлять как уточнение более грубого измерения, приводящего к областям простой формы и достаточно большой величины. В соответствии с принципом равновероятности вероятность возникновения аномальной области будет столь же мала, как и вероятность, определяемая флюктуационной формулой. (Следует иметь в виду, что из-за очень быстрого хода размешивания всякая область, содержащаяся в области простой формы и переходящая через некоторое макроскопическое время в менее равновесное макроскопическое состояние, составляет всегда ничтожную часть этой области простой формы.) Этим постулатом мы обеспечили бы и выполнение законов кинетики и учет флюктуаций, т. е. то согласование, которое давалось ограничением начальных областей.

Но легко видеть, что, принимая такой постулат, мы требуем, во-первых, чтобы при наших измерениях — при уточнении «грубых» измерений — существовал вероятностный закон, (т. е. отсутствовала бы возможность «подбора», приводящего к тому, что «приготовленные» системы могли бы образовать ряд систем в таких начальных состояниях, при которых частость «аномальной» области в этом ряду была бы произвольной и не равнялась бы величине, определяемой формулой флюктуаций); во-вторых, когда мы обращаемся к «реальному» ансамблю, то, принимая такой постулат, мы требуем, чтобы в «реальном» ансамбле существовал закон распределения, обеспечивающий для осуществления «аномальных» областей выполнение формулы флюктуаций, т. е. равномерный закон.

Первое из требований противоречит указанной в § 12 и 13 возможности «подбора», при которой понятие вероятности вообще не определено. Второе требование противоречит соображениям § 14. Таким образом, когда мы уточняем тот смысл, который в классической теории может быть придан ограничению «начальных» областей, мы встречаемся с принципиальными возражениями того же характера, что и аргументы § 12—14.

Объединяя наши главные аргументы с аргументом настоящего параграфа, можно, резюмируя, сказать, что причина невозможности обоснования физической статистики при помощи классической механики заключается в том, что классическая теория п р и н ц и п и а л ь н о не содержит ограничений возможных результатов начальных опытов. Эта причина определяет невозможность обоснования понятия статистического закона (§ 12 и 13) и обоснования понятия «допустимых» «начальных» областей, которые в противоположность «аномальным» областям обеспечивали бы монотонность процесса релаксации (§ 17).

Отметим еще раз (см. § 7), что трудность классического обоснования физической статистики заключается отнюдь не в постоянстве во времени меры области, выделенной начальным опытом, а в отсутствии ограничений возможных результатов начальных опытов. Трудность, связанная с теоремой Луивилля, как известно, устраняется, в соответствии с теорией Гиббса, тем, что п р и р а з м е ш и в а н и и, для любого з а д а н н о г о наперед т и п а м а к р о с к о п и ч е с к о г о и з м е р е н и я, распределение на поверхности заданной энергии приближается к равномерному. Трудность же, связанная с отсутствием ограничений возможных результатов начальных опытов, является принципиальным пороком классической теории. (То, что последняя трудность не устраняется введением понятия определенного макроскопического измерения, видно из следующего: со всякой областью $\Delta\Gamma_0$, приводящей с подавляющей вероятностью к возрастанию энтропии, можно сопоставить область $(\Delta\Gamma_0)_{\bar{t}}$ т о й ж е м е р ы, приводящую к убыванию энтропии, причем обе области определяются одним и тем же фиксированным т и п о м макроскопического и з м е р е н и я.) Эта трудность была бы устранена, если бы мы могли не только наложить ограничения на величину и форму «начальных» областей (или ввести упомянутый выше постулат), но и обосновать равновероятность микросостояний этих областей. Действительно, необходимым условием классической интерпретации законов статистической физики является не только предположение об ограничениях, накладываемых на «начальные» области $\Delta\Gamma_0$, но и, главное, предположение о существовании вероятностного закона распределения внутри областей $\Delta\Gamma_0$, в частности — равномерного распределения (или распределения, близкого к равномерному).

В самом деле, с одной стороны, если бы предположение о существовании вероятностных законов распределения внутри $\Delta\Gamma_0$ не выполнялось (даже если бы мы, пренебрегая всяким обоснованием, допустили, что форма и величина $\Delta\Gamma_0$ удовлетворяют указанным ограничениям), то сами вероятностные законы статистики не существовали бы; если бы даже вероятностные законы распределения внутри $\Delta\Gamma_0$ существовали, но не были бы равномерными или «близкими» к равномерным, то законы течения процессов во времени противоречили бы принципам статистики и кинетики. С другой стороны, если бы предположение о существовании закона равномерного распределения внутри $\Delta\Gamma_0$ было справедливо, то при добавочном предположении, что «тонкие» измерения получаются как уточнения «грубых», мы получили бы, как уже отмечалось в этом параграфе, согласование с законами статистической физики.

Таким образом, трудность классического обоснования статистики, сводящаяся к отсутствию ограничений возможных результатов начальных измерений, связана с нашими основными принципиальными аргументами.

Сделаем несколько замечаний о соотношении содержания настоящего параграфа и изложения рассматриваемого в нем вопроса в некоторых старых классических работах.

Первоначальная формулировка возражения обратимости Лошмидта, состоящая в том, что с каждой траекторией в фазовом пространстве можно сопоставить «обратную», должна быть, как уже говорилось, заменена новой, если учесть, что каждый опыт выделяет не точку, а область фазового пространства. Модифицированное возражение обратимости опирается на характерное для классической теории отсутствие ограничений возможных результатов начальных опытов и может быть устранено лишь в том случае, если такие ограничения будут приняты в качестве дополнительных постулатов. Как было показано в § 8, принятие этих постулатов необходимо для того, чтобы избежать прямого противоречия с законами физической статистики. Принимая эти постулаты, мы придаем классической теории насколько возможно последовательную форму, охарактеризованную в § 8.

В главе XIII своей книги Гиббс [7] устанавливает несколько неравенств, которые интерпретируются им как выражения термодинамических законов, определяющих необратимое изменение статистических систем. В частности, он доказывает результат, который интерпретируется как закон перехода тепла от более нагретого тела к более холодному (см. уравнения 464—469, [7]), и результат, который интерпретируется как возрастание энтропии при взаимодействии двух тел (см. уравнения 461—463). Однако нетрудно видеть, что, по существу, результаты Гиббса ни в какой степени не содержат доказательства необратимости. Действительно, предположим, что в обоих ансамблях ε_1 и ε_2, полученных после взаимодействия, все скорости во всех системах изменены на обратные, и процессы сближения систем ансамблей проведены в обратном порядке. Тогда возникающие состояния систем будут отличаться от начальных состояний в прямом процессе лишь обращением всех скоростей. Очевидно, что при обращении скоростей значения всех рассматриваемых Гиббсом величин не изменяются. Поэтому все неравенства сохраняются также и для обратного процесса с той лишь разницей, что величины с двумя штрихами будут относиться к моменту до взаимодействия, а величины с одним штрихом — к моменту после взаимодействия. При этом полученные Гиббсом результаты заменяются на обратные, а именно: для первого доказательства мы получим, что возникшие после взаимодействия ансамбли будут распределены канонически, причем в течение взаимодействия энергия будет теряться тем ансамблем, который окажется в состоянии канонического распределения с меньшей температурой; для второго доказательства мы получим: сумма энтропий взаимодействующих ансамблей после взаимодействия будет меньше, чем до взаимодействия.

Нетрудно установить причину того, что рассматриваемые выводы Гиббса не являются доказательством существования законов необратимого изменения статистических систем, т. е. не являются выводом соответствующих термодинамических принципов. Легко видеть, что выводы Гиббса целиком сохраняются, если под $\bar{\eta}$ понимать не макроскопическую величину, введенную в главе XII и изменяющуюся во времени, а микроскопическую, являющуюся средним значением точной (или, по Эренфесту, «тонкой»; см. § 7) плотности. Следовательно, эти выводы основаны исключительно на общих свойствах механических систем, а именно на законе сохранения энергии и на справедливости теоремы Лиувилля. Они ни в какой степени не используют существования релаксации статистических систем, связанной, как было показано (см. § 5 и 7), с размешиванием исходной неравновесной области (эта область соответствует неравновесному состоянию полной системы, состоящей из двух взаимодействующих частей, по поверхности заданной энергии полной системы). Не останавливаясь здесь на этом вопросе подробнее, отметим лишь окончательный результат: указанные выводы Гиббса не устанавливают никаких свойств необратимости статистических систем. Первый вывод выражает лишь некоторое экстремальное свойство канонического распределения. Второй вывод выражает лишь некоторые математические свойства функции $\overline{\eta}$: возрастание $\overline{\eta}_1 + \overline{\eta}_2$ при взаимодействии систем связано лишь с нарушением аддитивности, т. е. с тем, что $\overline{\eta}_{1,2}$ полной системы перестает быть равным $\overline{\eta}_1 + \overline{\eta}_2$— сумме значений $\overline{\eta}$ для составляющих систем. Следовательно, возрастание $\overline{\eta}_1 + \overline{\eta}_2$ связано как раз с тем свойством величины $\overline{\eta}$, которое отсутствует у обычной физической энтропии; последняя, как известно, и при наличии взаимодействия с достаточной степенью точности (а после прекращения взаимодействия — совершенно точно) может считаться аддитивной и в то же время обладает свойством монотонного возрастания.

Уже поэтому видно, что второй из рассматриваемых нами выводов не может выражать свойство возрастания обычной физической энтропии. В частности, отметим также, что вследствие неаддитивности $\overline{\eta}$ величина, сопоставляемая с энтропией полной системы, теряет однозначность. В самом деле, сопоставим с энтропией полной системы не величину $\overline{\eta}_{1,2}$ (сохраняющуюся при взаимодействии; напомним еще раз, что рассматриваемый вывод может быть проведен и для точной микроскопической функции η), а сумму $\overline{\eta}_1 + \overline{\eta}_2$, в общем случае не равную $\overline{\eta}_{1,2}$ (и убывающую при взаимодействии). Тогда нет никаких оснований каждую из составляющих систем не считать в свою очередь состоящей из частей и их энтропии считать равными $\overline{\eta}_1$ и $\overline{\eta}_2$, а не соответствующим, отличающимся от $\overline{\eta}_1$ и $\overline{\eta}_2$ суммам, и т. д. Другие соображения, по которым $\overline{\eta}$ для неканонически распределенных ансамблей не должно сопоставляться с обычной физической энтропией, были приведены раньше (см. § 9). Аналогичные замечания могут быть сделаны и по поводу остальных выводов 13-й главы книги Гиббса, относящихся к понятию термодинамической необратимости.

Можно сказать, что рассматриваемые в настоящем параграфе условия, накладываемые на величину и форму «начальных» областей $\Delta\Gamma_0$, являются как бы «условиями достаточной макроскопичности», «грубости» измерений, выделяющих эти «начальные» области. Можно думать, что когда Пуанкаре писал [2], [16], [17], что в теории Максвелла—Больцмана—Гиббса второе начало термодинамики является принципом несовершенным — выражением слабости и несовершенства наших органов чувств и наших приборов, то он имел в виду не только «грубость» измерений, констатирующих релаксацию (точнее, ограниченную точность такого, заранее фиксированного измерения, что уже отмечалось Гиббсом), но и «грубость» начальных измерений — невозможность выделить «начальные» области слишком малой величины или слишком сложной «извилистой» формы. Насколько можно судить, Пуанкаре никогда не был в числе таких, как Цермело, противников больцмановского молекулярно-кинетического толкования второго начала, но в то же время не принадлежал и к безусловным сторонникам больцмановской теории. Он, с одной стороны, понимал все возможности, заложенные в принципиальной стороне молекулярно-кинетической теории, и, повидимому, считал почти все возражения противников больцмановской теории ошибочными. С другой стороны, он сам был автором упомянутых замечаний, являющихся не только характеристикой классической статистической теории, но и ее критикой, наиболее глубокой, быть может, из всех когда-либо предлагавшихся. Из этих замечаний вытекает мысль о том, что в классической теории второе начало термодинамики (как и другие законы кинетики) является не принципиальным законом, а следствием макроскопичности наших измерений, не носящей в классической теории принципиального характера. Правда, эта мысль, взятая сама по себе, недостаточно ясна и убедительна, чтобы нас удовлетворить. Она не может быть также признана истиной, исчерпывающей вопрос. Как уже отмечалось выше, при той же степени «грубости» измерений, которая достаточна для того, чтобы наблюдать прямой, протекающий в согласии со вторым началом процесс, мы не наблюдаем в действительности процессов, противоречащих второму началу. Уже одно это обстоятельство показывает нам, что второе начало связано не только с макроскопичностью измерений, а также, можно сказать (если пользоваться понятиями классической теории), и с каким-то существующим в действительности распределением начальных состояний. На основании сказанного выше можно заключить, что причина, по которой статистическая физика не может быть обоснована при помощи классической механики, заключается не столько в том, что предположение о невозможности сколь угодно точных и «тонких» «начальных» измерений чуждо самому духу классической теории, сколько в принципиальной невозможности обосновать понятие статистического закона (§ 12 и 13). Как следует из настоящего параграфа, это предположение незаконно в классической теории в силу тех же принципиальных аргументов, которые были развиты в § 12—14.

Отметим еще, что когда мы пытаемся вводить ограничения, запрещающие слишком «тонкие» измерения, то мы говорим о понятиях, близких к представлению о максвелловском «демоне». Но пока речь идет о классической теории, между ними есть одно существенное различие: в классической теории измерение не оказывает никакого воздействия на систему, тогда как максвелловский «демон» изменяет движение системы (см. также гл. IV).

В заключение настоящего параграфа мы можем придать общим рассуждениям о введении понятия вероятности в классическую теорию следующую форму: так как, с одной стороны, в классической теории необходимо делать предположения о распределении вероятностей внутри $\Delta\Gamma_0$, а с другой стороны, измерения (в частности, измерения, определяющие, что система находится в $\Delta\Gamma_0$) никак не воздействуют на систему, то, следовательно, и вид распределения внутри $\Delta\Gamma_0$ и само существование закона распределения никак не связаны с измерением. Так как выбор той или иной величины областей $\Delta\Gamma_0$ (той или иной точности измерений) определяется произвольным выбором типа измерения, то, предполагая распределение вероятностей определенным внутри данной области $\Delta\Gamma_0$, необходимо предположить, что вероятность определена и вне этой области $\Delta\Gamma_0$. Благодаря этому возникает понятие о вероятности найти систему в той или иной области $\Delta\Gamma_0$, т. е. понятие о вероятностях различных исходов *начального* опыта. Как мы увидим в дальнейшем (гл. V), предметом статистической физики является лишь изучение связи исхода начального опыта с вероятностями различных исходов последующих опытов; понятие вероятности исхода начального опыта стоит вне статистической физики. Последнее утверждение выражается также в том, что единственное определение вероятности, совместимое с той равновероятностью, которая должна быть внутри каждого $\Delta\Gamma_0$ (каждого из возможных — при том произвольном выборе типа измерения, которым мы вольны распоряжаться), сводится к равновероятности всех точек поверхности заданной энергии; а это находится в прямом противоречии с опытом (см. § 14).

§ 18. В настоящем параграфе мы сделаем несколько замечаний о некоторых, наиболее важных вероятностных схемах, применявшихся для описания процесса релаксации: а) об условиях, при которых предельное распределение до известной степени не зависит от распределения начального; б) о возможности пользоваться для описания процессов в статистических системах схемой цепей Маркова. При изложении этих вопросов мы ни в какой степени не стремимся к полноте, а ставим себе целью лишь определить отношение связанных с ними точек зрения к точке зрения, излагаемой нами, и пояснить таким образом некоторые стороны последней.

а) Пуанкаре принадлежит не только ряд тонких критических замечаний, относящихся к классической теории и упомянутых в предыдущем параграфе, но и глубокая идея об условиях, характеризующих применения понятия вероятности к статистической физике [19, 3]. Эти условия в своей общей форме заключаются в *независимости окончательного распределения* вероятностей *от частной формы начального распределения*, лишь бы начальное распределение обладало некоторыми общими свойствами, например непрерывностью. Выполнение этих условий в статистической механике обеспечивается, как мы увидим (см. гл. V), свойствами размешивания статистических систем. В п. а настоящего параграфа мы сделаем несколько замечаний о соотношении этих условий и охарактеризованных нами выше общих свойств всякой теории, основанной на классической механике, в частности свойств, отмеченных в § 12 и 13.

К существенным результатам Пуанкаре пришел, изучая задачу «малых планет»— точек, вращающихся с постоянной скоростью по окружности данного радиуса,— или задачу «одномерного газа», в основных чертах эквивалентную первой. Он показал, что для любого начального распределения вероятностей для положений планет на окружности при неограниченном возрастании времени распределение стремится к равномерному, если распределение вероятностей для скоростей планет задано любой непрерывной функцией. Это свойство — независимость предельного распределения от свойств начального— прямо следует из свойств коэффициентов Фурье функции распределения. Если положение планет определяется координатой l, а их скорости обозначены через v, то коэффициенты Фурье распределения в конфигурационном пространстве будут равны $\int f_0(l-vt,\ v)\cos kl\,dl\,dv$, где $f_0(l,v)$ — функция распределения в фазовом пространстве в начальный момент. Интегрируя по частям и пользуясь конечностью производных $\frac{\partial f_0}{\partial v}$, получим, что функция распределения в конфигурационном пространстве сходится в среднем к постоянной. В фазовом пространстве функция распределения в каждой данной движущейся точке не изменяется (см. § 7). Следовательно, никакой сходимости в среднем не может быть, но установленное свойство указывает на размешивание в фазовом пространстве (в данном случае поверхность заданной энергии совпадает с конфигурационным пространством).

Размешивание всегда обеспечивает выполнение указанного выше условия независимости предельного распределения в фазовом пространстве от начального распределения (что можно прямо видеть из определения размешивания), в частности от выбора «начальной» области (если мы, конечно, говорим о предельном распределении по отношению к заранее *фиксиро-*

ванным областям, см. § 5 и 7). Поэтому могла бы показаться естественной мысль о том, что при любом начальном распределении достаточно большого количества дискретных точек при неограниченном возрастании времени их распределение по поверхности заданной энергии фазового пространства стремится к равномерному. Эта мысль основывалась бы на том, что всякое распределение достаточно большого количества дискретных точек может рассматриваться как апроксимация некоторого непрерывного распределения; при этом дискретные точки могут рассматриваться как возникшие при испытаниях, проходящих при наличии этого непрерывного вероятностного закона распределения. Условия, при которых это непрерывное распределение определяется более или менее однозначно, включают в себя, очевидно, во-первых, требование сглаженности самой определяемой функции (т. е. требование, чтобы она изменялась заметно лишь при смещении точки пространства на такие расстояния, при которых области пространства соответствующих линейных размеров содержали очень большое число частиц) и, во-вторых, требования достаточной равномерности распределения самих дискретных точек, вроде упомянутых в § 2.

Пуанкаре подчеркивал, что для применения понятия вероятности к опыту всегда необходимо делать предположение, аналогичное допущению, делаемому, например, при изучении малых планет. Это предположение состоит в следующем: дискретные, констатируемые на опыте положения малых планет будут при неограниченном возрастании времени изменять свое распределение так, как будто они были распределены в начальный момент в фазовом пространстве (и, в частности, в импульсном пространстве) по любому, но непрерывному закону. Данное предположение, никак не доказываемое, является, по Пуанкаре, просто выражением принципа достаточного основания: было бы невероятно предположение, что действующие на них причины распределили планеты в начальный момент так, что следствия, извлекаемые из столь общего принципа как принцип непрерывности, не оправдались бы. Из этого предположения вытекает, в частности, что характеризующие неоднородность распределения малых планет величины будут при неограниченном возрастании времени стремиться к нулю так же, как для непрерывного распределения стремились к нулю коэффициенты Фурье $\int f_t(l,v) \cos kl \, dl \, dv$. Такими величинами будут, очевидно, суммы $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \cos kl_i$, распространенные на все n планет. Пуанкаре отмечает, что если число планет n очень велико, то сумма будет близка к интегралу от соответствующей непрерывной функции, и что «все сказанное относительно интеграла будет справедливо и по отношению к самой сумме»; в частности, и то, что при достаточно большом t эта сумма будет очень мала.

Однако нетрудно видеть, что это заключение, вообще говоря, не является правильным; из близости суммы к интегралу в начальный момент еще не следует близость их через достаточно большое время t. Для того чтобы представить себе это достаточно ясно, перейдем от рассмотрения фазового пространства одной малой планеты — μ-пространства — к рассмотрению фазового пространства Γ всей системы n невзаимодействующих малых планет. Заметим при этом, что n достаточно велико, чтобы обеспечить упоминаемые ниже применения закона больших чисел. Допустим, эти n точек распределены в фазовом μ-пространстве так, что они апроксимируют некоторый непрерывный закон распределения, т. е. так, как если бы каждая из данных точек помещалась по этому вероятностному закону. Тогда в соответствии с законом больших чисел, количество этих точек, попавших на всякий, достаточно большой интервал (настолько большой, что математическое ожидание числа точек на нем достаточно велико), пропорционально интегралу функции распределения по этому интервалу. Этому, условно вводимому нами непрерывному распределению в μ-пространстве соответствует определенное непрерывное распределение в Γ-пространстве. Рассмотрим в Γ-пространстве область M, точки которой изображают такие положения n малых планет в μ-пространстве, для которых, в соответствии с законом больших чисел, количества планет, приходящихся на все достаточно большие интервалы μ-пространства, на ничтожно малую долю отличаются от математического ожидания, вычисленного в предположении существования условно нами введенного вероятностного закона. (Очевидно, что интеграл от введенной нами плотности вероятности в Γ-пространстве по такой области M очень мало отличается от единицы, а если, например, плотность вероятности постоянна в той области, где она отлична от нуля, то область M составляет подавляющую часть этой области.) Эта область M будет с течением времени переходить в другие области фазового пространства. В частности, в силу размешивания, можно утверждать, что для любой области N можно найти такое, достаточно большое время t_1, что для любого $t>t_1$ область M будет содержать части, принадлежащие области N. Допустим, что в качестве области N выбрана область O таких состояний системы малых планет, при которых они распределены в конфигурационном μ-пространстве весьма неравномерно (т. е. как бы область неравновесного состояния всей системы n планет). Тогда легко видеть, что при всех достаточно больших t существует конечная часть MO_t области M, все точки которой соответствуют состояниям, переходящим через время t в состояния неравномерного распределения в конфигурационном μ-пространстве. Отношение меры этой части MO_t к мере области M стремится при неограниченно возрастающем времени к отношению мер области O и всего пространства, в котором происходит размешивание. Следует учесть, что все точки области M соответствуют распределениям планет, апроксимирующим в начальный момент один и тот же условно введенный нами непрерывный вероятностный закон. Ввиду всего этого общее заключение о том, что рассматривавшиеся выше суммы будут близки к интегралам, определяющим коэффициенты Фурье, и, следовательно, будут, начиная с достаточно большого времени, очень малы, ошибочно. Действительно, в силу непрерывности введенного нами закона распределения в фазовом μ-пространстве (в частности, непрерывности распределения скоростей), распределение в конфигурационном μ-пространстве при неограниченном возрастании времени стремится к равномерному, и его коэффициенты Фурье стремятся к нулю; суммы же, образованные для дискретного распределения, апроксимирующего в начальный момент непрерывное распределение, при сколь угодно больших t достигают величины, близкой к единице, если начальные состояния принадлежат к соответствующей области MO_{-t}.

Таким образом, в силу тех же причин, которые определяют независимость предельного распределения от вида начального непрерывного распределения, т. е. в силу размешивания, перенесение результатов, полученных для предельного непрерывного распределения, на распределение дискретных точек (фазового пространства), с которым мы только и имеем дело на опыте, в классической теории в общем случае невозможно. Когда Пуанкаре делал заключение о близости рассмотренных выше сумм к интегралам и о вытекающей отсюда малой величине сумм при больших временах, то он исходил из возможности исключить некоторые начальные состояния системы,— возможности, основанной на принципе, называемом им принципом достаточного основания. Согласно Пуанкаре, этот принцип выражает наше право исключить как невероятные такие начальные состояния, при которых отсутствовали бы свойства настолько общие, что они могут быть получены из одного лишь предположения непрерывности закона распределения в начальный момент. Иначе говоря, согласно этому принципу можно исключить, по Пуанкаре, такие начальные состояния, для которых распределения очень большого числа дискретных точек при больших временах не обладали бы свойствами равномерности, общими всем распределениям, непрерывным в начальный момент.

Из сказанного выше следует, что в действительности заключение о близости сумм к интегралам предполагает для каждого t исключение множества MO_t конечной меры (если состояния области M сами неравновесны, то в это множество включаются также состояния, испытывающие в момент t возврат). Нетрудно видеть, что такое исключение совершенно незаконно. Оно привело бы к исключению флюктуаций (состояний области O) и никак не может быть обосновано тем, что мера области MO_t очень мала сравнительно с мерой M, и поэтому вероятность состояний области MO_t может считаться пренебрежимо малой. Мы видели в § 14, что по отношению к начальным состояниям нельзя устанавливать вероятности состояний, руководствуясь величиной меры, так как в противном случае мы никогда не находили бы на опыте неравновесных состояний (а отношение мер областей MO_t и M равно как раз в пределе отношению мер области O и всей поверхности заданной энергии).

Мы можем вернуться к обсуждению упомянутой выше мысли о том, что при любом, апроксимирующем непрерывный закон начальном распределении очень большого (или неограниченно возрастающего) количества дискретных точек при неограниченном возрастании времени их распределение на поверхности заданной энергии стремится к равномерному. При этом мы не будем пользоваться каким-либо принципом, позволяющим исключить состояния области MO_{-t}. Мы видели, что в статистической механике такой принцип недопустим. Кроме того, мы можем обратиться к общему представлению о размешивающихся системах вместо того, чтобы говорить о системе малых планет. Тогда мы будем иметь результат, несколько отличающийся от только что полученного, но сохраняющий основные его черты, а именно: любое непрерывное распределение при неограниченно возрастающем времени стремится на поверхности заданной энергии к равномерному (для заданных заранее областей). Но из того обстоятельства, что очень большое число дискретных точек (соответствующих состоянию системы в наших опытах) апроксимирует в начальный момент какой-либо непрерывный закон распределения, ни в какой мере не следует, что эти точки, начиная с некоторого момента, будут распределены более или менее равномерно. Они могут быть, например, подобраны в начальный момент так, что при апроксимации с любой желаемой точностью данного непрерывного закона будут в то же время принадлежать области O_{-t} (возможность такого подбора основана на том, что при достаточно большом t область O_{-t} будет достаточно «мелко» размешана в области, в которой определен данный непрерывный закон), т. е. в любой заданный, достаточно удаленный момент t соберутся в одну и ту же область O. Поэтому в классической теории независимость предельного распределения от непрерывного начального распределения ничего не может нам дать для обоснования свойств релаксации, наблюдаемых на опыте.

В настоящем параграфе, не говоря ничего нового, мы хотели лишь проиллюстрировать одну сторону сказанного раньше. Наше утверждение мы можем выразить также иначе: если бы мы допустили, что результаты начального опыта действительно определяются некоторым непрерывным вероятностным законом, то через достаточно большое время мы с достоверностью получили бы более или менее равномерное распределение вероятностей на поверхности заданной энергии, и с подавляющей вероятностью получили бы равновесное состояние. Но в классической теории вероятностный закон распределения начальных состояний не может получить обоснования, и в каждом данном ряду опытов мы имеем дело с фиксированными точками начальных состояний, не дающими никаких гарантий определенного распределения начальных состояний в последующих независимых опытах (§ 12 и 13). Кроме того, невозможность удовлетворительного во всех отношениях введения понятия вероятности в классическую теорию выражается, как уже неоднократно говорилось, также в том, что начальные распределения, которые могли бы быть допущены в силу одних соображений (см. также § 19), т. е. распределения равномерные или «близкие к равномерным», должны быть отвергнуты по другим соображениям (см. § 14).

б) Мы говорим, что последовательность результатов опытов образует простую цепь Маркова, если вероятности различных возможных исходов данного опыта целиком определены, если известен результат непосредственно предшествующего опыта, независимо от результатов всех остальных предыдущих опытов. Описывая процесс установления статистического равновесия, мы считаем, что вероятности исхода макроскопического опыта, проведенного в данный момент, целиком определяются макроскопическим состоянием в некоторый, более ранний момент. Действительно, не только наиболее вероятный макроскопический ход процесса определяется хотя бы принципиально при помощи уравнений кинетики макроскопически заданным начальным состоянием, но и вероятности отклонений могут быть определены, также хотя бы при помощи теории флюктуаций, через макроскопические величины, характеризующие начальное состояние. Естественно было бы поэтому пытаться применить к описанию процессов в статистических системах схему цепей Маркова.

Мы можем попытаться дать интерпретацию этой схемы при помощи представлений классической механики, вводя в качестве состояний ячейки фазового пространства и определяя вероятности перехода между ячейками в соответствии с основными принципами классической статистической механики (т. е. как отношение меры множества точек, осуществляющих переход из одной ячейки в другую, к мере множества всех точек исходной ячейки; см. § 4—19). Однако при этом мы столкнемся сразу со следующим препятствием: определенная таким образом вероятностная схема, вообще говоря, не является цепью Маркова. Как показал Адамар [18], указание на то, из какой ячейки перешла система в данную ячейку, вообще говоря, изменяет значение вероятностей перехода, установленные до этого указания. Этот результат означает, таким образом, что то определение вероятности, которое может быть дано на основе классической механики математически непротиворечивым образом и в согласии с общими принципами классической статистической механики (равновероятностью начальных состояний), не более чем в некоторых частных случаях может привести к описанию процессов движения фазового пространства динамических систем при помощи цепей Маркова. Для определенных динамических систем,— а именно, статистических систем — и при определенном выборе ячеек фазового пространства,— а именно, «макроскопических» областей фазового пространства — схема марковских цепей действительно оказывается применимой с достаточной степенью точности. Но следует напомнить, что и в этих частных случаях, и в общем случае, пока мы основываемся на классической механике, мы можем говорить лишь о математически непротиворечивом определении вероятности. При этом мы целиком отказываемся от возможности рассматривать законы вероятностных распределений классически определенных начальных микросостояний как законы физические, так как (и на это мы уже указывали) последние характеризуются необходимой связью предпосылок применения закона и следствий, вытекающих из закона, в то время как в классической теории такая связь не может быть установлена. Но, оставляя в стороне аргументы § 12—14, мы можем утверждать, что в размешивающихся системах, при вполне естественных и тесно примыкающих к свойствам размешивания дополнительных динамических предположениях, процесс релаксации с практически достаточной степенью точности будет описываться с помощью цепей Маркова. Действительно, в процессе размешивания область O_1 фазового пространства, соответствующая любому из макроскопических состояний, за время макроскопического изменения t_1 (т. е. за такое время, в течение которого произойдет минимальное микроскопически заметное изменение состояний) будет происходить из ряда других «макроскопических» областей O', O'', O''' и т. д. Будем исходить из предположения, что точки каждой из областей

O', O'', O''' и т. д. за время макроскопического изменения t_1 перемешаются по области O_1 приблизительно равномерно (точное определение этого дополнительного свойства размешивающихся систем см. в гл. V). Тогда естественно предположить, что если некоторое состояние O_2 происходит из состояния O_1 с некоторой вероятностью $p_{1.2}$ за такое же как t_1 по порядку величины время t_2 (это значит, что доля точек O_1, попадающая в O_2, равна $p_{1,2}$, т. е. равна, по определению, вероятности перехода), то доля точек каждого из множеств $O_1O'_{t_1}$, $O_1O''_{t_1}$, $O_1O'''_{t_1}$ и т. д. (т. е. множеств, образованных теми частями O_1, которые за время t_1 произошли из O', O'', O''' и т. д.), попавшая за время t_2 в O_2, также приблизительно равна $p_{1,2}$. При этом условии, как легко видеть, схема цепей Маркова делается приблизительно применимой. Следует лишь отметить, что макроскопические области, соответствующие различным значениям макроскопических параметров, никак не могут считаться приблизительно равными по величине, а возрастают по мере приближения к равновесию в огромное число раз. Поэтому (как видно из соображений обратимости уравнений механики и инвариантности значений макроскопических параметров по отношению к обращению микроскопических скоростей) даже приблизительно нельзя говорить о соблюдении условия симметрии вероятностей переходов $p_{ik} = p_{ki}$.

§ 19. В § 2 и 4 было показано, что в классической теории для микроскопической интерпретации статистики необходимо предположить, что после начального опыта, выделившего область $\Delta\Gamma_0$, осуществление того или иного из микросостояний этой области определяется некоторой функцией, описывающей закон распределения вероятностей. В настоящем параграфе мы резюмируем основные утверждения, которые на основании предыдущего могут быть сделаны относительно этой функции.

Для размешивающихся систем предельное, при $t \to \infty$, распределение вероятностей любых, заранее фиксированных областей, очевидно, не зависит от вида начального распределения, лишь бы последнее было непрерывным (см. предыдущий параграф). Поэтому, естественно, может возникнуть мысль о возможности обоснования статистики и, в частности, возможности получения всех свойств релаксации, исходя из одного лишь предположения, что начальный закон распределения вероятностей является абсолютно непрерывным (но при этом условии, т. е. условии, что определяемая им вероятность любой области стремится к нулю вместе с мерой этой области, он совершенно произволен). Укажем прежде всего, почему такое предположение не может привести к цели.

Требование одной лишь абсолютной непрерывности неудовлетворительно хотя бы потому, что абсолютно непрерывный закон может обладать чрезвычайно резкими максимумами в точках «аномальных» областей (т. е. областей, точки которых определяют не удовлетворяющий законам кинетики ход процесса; см. § 17). Если эти максимумы будут достаточно резкими, то с вероятностью, близкой к единице (или просто с вероятностью, равной единице, если вне «аномальной» области функция распределения обращается в нуль), процесс релаксации будет противоречить законам кинетики.

Можно определить класс допустимых начальных функций распределения более точно. Пусть начальный опыт выделил какую-либо «допустимую», в смысле условий § 8 и 17, область $\Delta\Gamma_0$. Мера точек данного макроскопического состояния $(\Delta\Gamma_0)$, приводящих к переходу в менее равновесное состояние, равна мере точек этого менее равновесного состояния. Поэтому отношение мер точек исходной макроскопической области $\Delta\Gamma_0$, приводящих к течению процесса по уравнениям кинетики, к мере точек, приводящих к течению процесса, нарушающему эти уравнения, равно $e^{\frac{\Delta s}{k}}$, где Δs — разность энтропий данного макроскопического состояния и менее равновесного состояния. Следовательно, для того чтобы с подавляющей вероятностью законы кинетики были удовлетворены, распределение вероятности внутри $\Delta\Gamma_0$ должно быть «близким к равномерному» (см. конец § 14). Говоря точнее, если бы распределение внутри $\Delta\Gamma_0$ не было близким к равномерному, то законы кинетики могли бы быть нарушены. Можно еще сузить класс функций распределения, если исходить из необходимости удовлетворить не только законам кинетики, но и законам флюктуаций. Энтропия состояния пропорциональна логарифму объема соответствующей области (см. § 5); поэтому величина, устанавливаемая теорией флюктуаций для вероятности возникновения менее равновесного состояния O_2 из данного макроскопического состояния O_1, равна $e^{-\frac{\Delta s}{k}}=e^{\frac{s_2-s_1}{k}}=\frac{m(O_2)}{m(O_1)}$. Следовательно, функции распределения, дающие правильные величины вероятностей флюктуаций, для *каждой* из частей заданной области должны дать вероятность, пропорциональную мере этой части, т. е. должны быть равномерными. Именно эти соображения (в отличие от неприменимых к данному случаю соображений инвариантности меры вероятности относительно движения, см. § 14) определяют в классической теории равномерность функции распределения в $\Delta\Gamma_0$. Отклонения от равномерности могли бы быть допущены лишь постольку, поскольку допускается возможность того, что флюктуационная формула не совсем точна; для такого допущения у нас нет никаких оснований. Таким образом, согласующиеся с законами кинетики и флюктуаций функции распределения должны быть отличны от нуля лишь внутри областей определенного типа — областей, допустимых в смысле § 17, и должны быть внутри этих областей постоянны.

Мы говорили уже, в силу каких причин в классической теории постулат существования таких функций распределения не может служить для построения физической статистики на микроскопической основе. Кроме принципиальных аргументов § 12 и 13, показывающих, что в классической теории не может быть обосновано существование любого, в том числе и абсолютно непрерывного, вероятностного закона, мы показали в § 15, что системы «реального» ансамбля (о которых мы только и можем говорить в классической теории, если учесть § 12 и 13) не могут быть использованы для интерпретации законов статистики. Кроме того, мы видели в § 14, что распределения, способные удовлетворить законам кинетики и законам флюктуаций (т. е. «близкие к равномерным» и равномерные), противоречат опыту в других отношениях. В самом деле, строго говоря, можно допустить, что распределения в «реальном» ансамбле, «близкие к равномерному» в каждом макроскопическом состоянии, не являются «близкими к равномерному» в целом — на поверхности заданной энергии (что противоречило бы опыту, ср. § 14); но допущение распределений, равномерных внутри любого макроскопического состояния, во всяком случае приводит к распределениям, равномерным в целом, на всей поверхности заданной энергии.

Это последнее противоречие с опытом можно было бы устранить, приняв, что распределение в «реальном» ансамбле является равномерным лишь внутри каждой из макроскопических областей з а д а н н о г о типа макроскопических состояний и не является равномерным внутри областей других типов макроскопических состояний, следовательно, не является равномерным в целом. Такое предположение, даже если забыть обо всех остальных возражениях, было бы физически крайне странным, так как означало бы, что для других возможных макроскопических опытов законы кинетики и флюктуаций не были бы справедливы. Кроме того, и при таком предположении аргументы § 12, 13 и § 15 целиком сохраняют свою силу (причем последние делаются особенно наглядными, так как в этом случае приходится говорить о «реальном» нестационарном ансамбле — ансамбле систем, взятых в данный момент; даже результаты опыта над данной системой в р а з н ы е моменты ее эволюции не могут быть использованы для образования такого ансамбля).

Сделаем еще одно замечание, совершенно очевидное после всего сказанного: для интерпретации статистики, в частности для удовлетворения законов кинетики в классической теории, недостаточно предположения о распределениях, «равномерных в макроскопическом смысле», т. е. дающих одинаковую вероятность для заданного типа «макроскопических ячеек» и произвольных при этом условии внутри ячеек. Это видно непосредственно, например, из сопоставления обратимости классической механики и того обстоятельства, что любая область $\Delta\Gamma$, в силу размешивания, при достаточно больших временах распределится «равномерно в макроскопическом смысле».

§ 20. Параграфом 19 мы закончили общее исследование возможностей, предоставляемых классической механикой для построения статистической физики. В настоящем параграфе мы остановимся на некоторых теориях и точках зрения, также исходящих из классической механики, но не имеющих общего характера, т. е. не относящихся к той максимально широкой постановке задачи, которая вообще возможна в классической теории (см. § 8). Мы остановимся лишь на некоторых точках зрения, представляющих наибольший интерес, и не будем ставить себе целью полноту обзора многочисленных работ, посвященных этой теме.

а) Остановимся прежде всего на предложенной Больцманом интерпретации H-теоремы при помощи так называемой пилообразной или ступенчатой H-кривой. Суть этой интерпретации заключается, как известно, в следующем: если изображать графически зависимость энтропии от времени, то, выделяя те точки кривой, которые соответствуют заданной ординате, т. е. заданному немаксимальному значению энтропии (точнее говоря, выделяя те отрезки ступенчатой кривой, которые соответствуют данному макроскопическому состоянию с данным значением энтропии), мы можем считать, что подавляющая часть таких точек соответствует точкам минимума кривой. Исходя из этого утверждения, делаем вывод о том, что если задано немаксимальное значение энтропии, то с подавляющей вероятностью энтропия будет в дальнейшем возрастать (а в прошлом она с подавляющей вероятностью убывала). Именно эта интерпретация H-теоремы была выделена Эренфестами среди других интерпретаций как лишенная противоречий и наилучшим образом передающая суть H-теоремы [1, 19]. Широко распространено мнение, что таким путем H-теорема может быть получена из одного лишь утверждения (эквивалентного, как легко видеть, предшествующему) о том, что каждое большее значение энтропии (более равновесное состояние) осуществляется в течение подавляюще большего времени, чем все меньшие значения (менее равновесные состояния). Само это утверждение, которое может быть названо *интегральной H-теоремой* (так как оно относится к поведению динамической траектории системы за бесконечный промежуток времени), может быть, например, получено как следствие эргодической теоремы (для почти всех начальных состояний). Интегральная H-теорема является, таким образом, утверждением чисто динамическим и ни в какой мере не содержит вероятностных понятий. Для того чтобы перейти от нее к H-теореме в обычном смысле, гласящей, что в данный момент при заданном значении энтропии подавляюще вероятно последующее возрастание энтропии, т. е. как бы к локальной H-теореме, имеющей уже вероятностный характер, необходимо, вопреки отмеченному выше мнению, ввести вероятностные предположения.

Эти вероятностные предположения состоят в том, что точки минимума кривой, которые встречаются подавляюще часто среди всех точек с заданной ординатой, являются в то же время подавляюще вероятными.

В то же время, на основании сказанного раньше легко видеть, что, вводя таким образом вероятностные предположения, которые только и делают возможным переход от «интегральной» H-теоремы к «локальной», мы делаем допущение, которое отнюдь не является логически очевидным и физически правильным. В самом деле, аргументы § 12 и 13 целиком сохраняются и по отношению к рассматриваемому случаю. Эти аргументы сводились к невозможности определить условия опытов, необходимых для того, чтобы проверить указываемое распределение вероятностей, т. е. для того, чтобы придать ему физический смысл. Рассматриваемая постановка задачи отличается лишь тем, что вместо того, чтобы говорить о геометрических вероятностях (о всех микросостояниях выделенной области), мы говорим о вероятностях элементов дискретного бесконечного множества, которые соответствуют различным осуществлениям данного макроскопического состояния (данного значения энтропии) при движении по заданной бесконечно простирающейся динамической траектории. Аргументы § 12 и 13 показывают, что не может иметь никакого физического смысла категория испытаний, при которых точки заданной динамической траектории, характеризующиеся определенным значением энтропии и соответствующие различным моментам эволюции системы, обладали бы определенными вероятностями (например, были бы одинаково вероятными) быть обнаруженными в данный момент.

Кроме того, в рассматриваемой трактовке H-теоремы при помощи H-кривой с самого начала предполагается, что осуществляется заданная динамическая траектория (которая может, например, обладать эргодическими свойствами). Получаемое таким путем толкование H-теоремы не дает возможности получить основное свойство релаксации — распределение состояний после времени релаксации по флюктуационной формуле (см. § 1). Для получения этого свойства релаксации необходимо предположить, что в начальный момент состояние системы задано не точно, а некоторой начальной областью, внутри которой определено, например, абсолютно непрерывное распределение вероятностей (см. § 18). Мы видели также в § 6, что независимо от способа определения начальных состояний одни свойства эргодичности недостаточны для интерпретации свойств релаксации; необходимо предположить размешивающиеся свойства статистических систем.

Наконец, следует сделать замечание о той конкретной вероятностной схеме, которая используется при переходе от интегральной H-теоремы к локальной. При таком переходе из факта, показывающего, что в некотором множестве (в нашем примере — множестве точек с данной ординатой) подавляющее большинство элементов обладает некоторым признаком (в нашем примере — являются точками минимума), делается вывод, что обнаружение на опыте элемента с этим признаком подавляюще вероятно. Но для этого, очевидно, необходимо, чтобы внутри множества существовало соответствующее распределение вероятностей, например, чтобы все элементы были одинаково вероятны. (Предельные частости, которые в некоторых случаях согласно теории коллектива, могут рассматриваться как вероятности, в случае рассматриваемой — заранее заданной, «реальной» в смысле § 13 — последовательности, без дополнительных предположений не имеют никакого отношения к понятию вероятности.) Однако легко видеть, что именно такое распределение не может получить математически корректного определения. Действительно, в нашем примере рассматриваемое множество элементов представляет собой дискретное бесконечное множество точек бесконечно простирающейся H-кривой, обладающих данной ординатой. Элементам же бесконечного дискретного множества, как подчеркивал С. Н. Бернштейн [20], мы не можем приписать равных вероятностей без того, чтобы не притти в противоречие с основным постулатом теории вероятностей, лежащим также в основе применения понятия вероятности к опыту. Этот постулат состоит в условии равенства суммы вероятностей единице — условии позволяющем предложениям истинным сопоставлять вероятность равную единице, а предложениям ложным — вероятность нуль. Исходя из предположения равновозможности, мы не могли бы приписать элементам нашего множества ни равного нулю (так как при этом и полная вероятность была бы равна нулю, тогда как в действительности заведомо осуществилась одна из точек), ни отличного от нуля значения вероятности.

Можно установить, однако, что не только в предположении равновероятности, но и при любом другом распределении, которое могло бы привести нас к цели — к локальной H-теореме, возникает аналогичная трудность. В самом деле, если в нашем примере вероятности различных точек и могут быть неодинаковыми, то во всяком случае распределение вероятностей должно быть таким, чтобы при суммировании вероятностей сумма ряда расходилась. В противном случае, имея дело уже с нормированными вероятностями, мы получили бы, что с вероятностью, сколь угодно близкой к единице, осуществляется одна из точек конечной, хотя, может быть, и содержащей очень много элементов, совокупности. Но на динамической траектории имеются участки флюктуаций любого вида, в частности, сколь угодно длинные участки, на которых большинство точек с заданной ординатой не является точками минимума. Поэтому для перехода к «локальной» H-теореме было бы необходимо утверждать, что упомянутый выше, осуществляющийся с практической достоверностью участок динамической траектории не является таким «флюктуационным» участком. Подобное утверждение не имеет никакого основания, и принимая его, мы, по существу, принимаем саму «локальную H-теорему». Очевидно, что полученное таким путем значение вероятности того, что в действительности осуществляется точка минимума, является следствием нашего предположения о том участке, который «выделяется» с подавляющей вероятностью (или с достоверностью, если мы предположим, что наше распределение дает отличные от нуля вероятности лишь на каком-либо конечном участке). Поэтому для того, чтобы наш переход к «локальной H-теореме» не был следствием одного лишь произвольного предположения о характере «выделенного» нашим распределением участка, необходимо предположить распределение таким, чтобы сумма вероятностей расходилась. При этом возникает охарактеризованная выше трудность.

Можно сказать, что вероятностная схема, которая позволила бы нам перейти от «интегральной H-теоремы» к «локальной», может быть получена лишь следующим путем: предполагается равномерность точек конечного интервала (или, во всяком случае, такое распределение, чтобы отношение вероятностей точек минимума и вероятности точек, не являющихся минимумом, не было слишком малым), образуется отношение сумм вероятностей, равное полной вероятности обнаружить точку минимума, и берется предел этого отношения при стремлении длины участка к бесконечности. Этот предел может быть отождествлен с вероятностью того, что осуществившаяся в данном опыте точка с заданной ординатой является точкой минимума. Но на основании всего сказанного раньше легко видеть, что применение такой схемы дает лишь качественно совпадающий с настоящей H-теоремой результат. Сама вероятностная схема ни в какой степени не соответствует действительности, как по причинам, связанным с аргументами § 12 и 13, так и потому, что при предельном переходе мы можем говорить лишь о пределе названного отношения сумм вероятностей, а не о самих предельных вероятностях (так как пределы вероятностей равны нулю). Существование этих вероятностей только и могло бы обосновать придание этому отношению указанного выше физического смысла. Отметим еще раз, что обладающие данной ординатой точки H-кривой, соответствующей заданной динамической траектории, являются элементами заранее заданной «реальной» совокупности в смысле § 13, и рассматриваемое отношение выражает вероятность осуществления любого из элементов определенной части этой совокупности. При этом мы можем придать физический смысл лишь предельному значению рассматриваемого отношения, а его допредельное значение, по изложенным соображениям, лишено всякого физического смысла.

Мы видели, что последняя трудность, связанная с конкретным видом вероятностной схемы, так же как и неудовлетворительность описания состояния релаксации (неприменимость флюктуационной формулы), не являются логически необходимыми следствиями классического характера теории; их можно избежать, если при интерпретации H-теоремы итти по пути, охарактеризованному в § 4 и 8. Мы указали здесь, тем не менее, на эти добавочные недостатки интерпретации H-теоремы с помощью ступенчатой H-кривой, так как эта интерпретация очень распространена, благодаря ее мнимой простоте и кажущейся возможности получить ее при помощи эргодической гипотезы или даже при помощи менее точного качественного динамического утверждения. Кроме того, переход от «интегральной H-теоремы» к «локальной» существенен для одной из основанных на квантовой механике трактовок вопроса о необратимости (работы Неймана [21], Паули и Фирца [22]), где присущих такому переходу недостатков уже нельзя избежать способом, подобным тому, который может быть использован в классической теории.

б) Со времени возникновения первых идей обоснования статистики при помощи эргодической гипотезы многократно высказывалась мысль о том, что для получения всех действительно выполняющихся законов статистической физики достаточно предположить наличие у статистических систем свойств, гораздо более широких, чем точная эргодичность, и лишь в некоторых отношениях сходных с эргодичностью. Главной побудительной причиной таких точек зрения были сомнения в математической возможности эргодических систем и в их реальном существовании. Эти сомнения остались и после того как от первоначального неудовлетворительного определения эргодических систем (как систем, в которых динамическая траектория проходит через все точки поверхности заданной энергии) перешли к новому определению. Последнее основано на том свойстве, что среднее во времени любой функции с интегрируемым квадратом, рассматриваемое как функция начальной точки, постоянно почти везде на поверхности заданной энергии (т. е. исключая начальные состояния не более чем меры нуль) и равно, как можно показать, среднему по этой поверхности.

В основе указанных сомнений лежали рассуждения следующего типа. Рассмотрим какой-нибудь, отличный от энергии интеграл движения и выберем две точки поверхности заданной энергии, в которых значения этого интеграла различны (такие точки должны найтись, так как иначе этот интеграл не был бы независимым от интеграла энергии). Пользуясь непрерывностью этого интеграла, можно выделять такие, достаточно малые окрестности этих точек, что интервалы изменения рассматриваемого интеграла в этих двух окрестностях не перекрываются. Тогда, выбирая за ту функцию, для которой образуется среднее по времени, характеристическую функцию первой из окрестностей, т. е. функцию, равную единице в точках этой окрестности и нулю вне ее, получим, что среднее по времени значение этой функции для всех траекторий, исходящих из точек второй окрестности, равно нулю. Для эргодических же систем это среднее почти для всех начальных состояний должно быть равно фазовому среднему, т. е. отношению меры первой окрестности к мере всей поверхности заданной энергии. Совершенно аналогичное противоречие констатировалось также в другой форме для систем, обладающих свойством метрической транзитности,— свойством эквивалентным (для систем с фазовым пространством конечной меры) эргодичности: на основе непрерывности интегралов движения (точнее говоря, их измеримости) показывалось, что метрически транзитивные системы невозможны [23].

Внушенные соображениями такого рода стремления заменить условия эргодичности более слабыми требованиями приводили к попыткам ослабить требования эргодичности в трех различных, естественно возникающих направлениях: во-первых, к отказу от требования, чтобы среднее во времени равнялось фазовому среднему для почти всех начальных состояний (за исключением, самое большее, меры нуль) и к допущению, что среднее по времени не равно фазовому среднему для начальных состояний, образующих множество конечной, но, разумеется, достаточно малой меры; во-вторых, к отказу от требования, чтобы временнóе среднее равнялось фазовому среднему для всех суммируемых функций, и предположению, что такое равенство справедливо лишь для определенных функций, представляющих величины, имеющие физический интерес; в-третьих, к замене требования точного равенства требованием равенства приближенного.

А. Я. Хинчин в своей книге «Математические основы статистической механики» [23], впервые объединившей, по существу, методы теории вероятностей и статистической механики и заложившей основы рационального метода получения асимптотических выражений статистической механики, посвящает несколько параграфов интересующему нас сейчас вопросу и дает одно из наиболее последовательных и математически ясных выражений рассматриваемой точки зрения. Хинчин отмечает, что значительное большинство изучаемых в статистической механике величин является так называемыми сумматорными функциями (т. е. суммами функций, каждая из которых зависит лишь от переменных одной молекулы), обладающими некоторым специфическим свойством. Это свойство заключается в том, что сумматорная функция на подавляющей части поверхности заданной энергии принимает значения, близкие к некоторой характерной для данной поверхности постоянной. Можно легко установить, что благодаря этому свойству подавляющая часть начальных состояний будет приводить к средним во времени значениям сумматорных функций, близким к этим постоянным, и следовательно, близким к фазовым средним. Таким образом, существование приближенных формул статистики, казалось бы, оказывается следствием одного лишь того свойства, что статистические системы состоят из огромного числа частиц.

Хинчин указывает также, что в некоторых случаях уже очень небольшое ослабление обычных требований эргодичности может устранить приведенные выше противоречия. В этих случаях — мы не будем останавливаться на их определении — для устранения противоречия достаточно ограничиться требованием равенства средних временных и средних фазовых лишь для так называемых «нормальных» функций, т. е. функций, принимающих одинаковые значения во всех физически эквивалентных точках.

По поводу этой последней возможности отметим, во-первых, что она носит лишь отрицательный характер — дает возможность в некоторых случаях избежать противоречия, но не гарантирует действительного существования равенства средних временных средним фазовым для нормальных функций; во-вторых, как показывает более детальный анализ, на котором мы не будем здесь задерживаться, для всех примеров с обычной физической постановкой задачи эта возможность даже в упомянутых выше наиболее благоприятных случаях ничего не может дать: противоречие указанного выше характера возникает также тогда, когда равенство средних временных средним фазовым будет относиться лишь к нормальным функциям.

Остановимся на приведенном выше рассуждении, относящемся к отмеченным Хинчином свойствам сумматорных функций. По поводу этого рассуждения, так же как и по поводу других подобных рассуждений, нужно сказать следующее. Прежде всего, для построения физической статистики совершенно недостаточно результатов, относящихся только к некоторому узкому классу функций, вроде сумматорных функций. Уже указание на применяемый в статистике — и единственно там возможный — способ определения важнейшей физической величины — вероятности состояния (обычно описываемый как способ определения числа комплексий), в частности, указание на флюктуационную формулу (причем здесь, поскольку речь идет о равенстве средних фазовых средним временным, эти формулы для вероятностей рассматриваются нами как законы распределения во времени), показывает, что физическая статистика принципиально не может ограничиться установлением равенства временного и фазового средних лишь для сумматорных функций. Эти формулы для вероятностей показывают, что вероятность осуществления любой области фазового Г-пространства определяется величиной фазового среднего ее — характеристической функции, отнюдь не являющейся сумматорной функцией. Для статистики необходимо равенство средних для всех таких характеристических функций (см. § 1). Если бы равенство распространялось лишь на сумматорные функции, то статистика была бы лишена возможности определения не только вероятностей возникновения неравновесных состояний, но и возможности определения любых величин, характеризующих эти неравновесные состояния. Кроме того, тот же результат — невозможность ограничиться суженными требованиями к динамическим свойствам статистических систем — независимо от всех только что упомянутых оснований, связанных с законами распределения временных средних, вытекает из существования релаксации, т. е. существования вероятностных распределений, в любой момент после времени релаксации (см. § 1). Как мы видели, существование релаксации влечет за собой необходимость приписать статистическим системам вполне определенную характеристику,— они должны быть размешивающимися системами (§ 5).

Таким образом, если ставить вопрос об обосновании всей статистической механики в целом, а не некоторой части ее формул, то рассматриваемый нами путь не может привести к удовлетворительному решению задачи.

Здесь же следует отметить, что главное из побуждений, толкавших на этот путь,— приведенное противоречие эргодических свойств и свойств интегралов движения,— в действительности отнюдь не должно заставить нас притти к выводу, что эргодические системы невозможны и что эргодическая проблема должна быть решена отрицательно. Дело в том, что противоречие возникает лишь при предположении, что рассматриваемый, отличный от энергии интеграл движения является непрерывной (точнее говоря, измеримой) функцией точки фазового пространства. Это предположение, вообще говоря, неверно; поэтому указанное противоречие отпадает. Следует еще отметить, что указанное выше сужение обычных требований, предъявляемых к статистическим системам, вопреки распространенному мнению, не может опираться лишь на одно предположение, что вероятностное распределение микросостояний после начального опыта, выделившего $\Delta\Gamma_0$, определяется любым, но абсолютно непрерывным законом (т. е. таким, что вероятность множества сколь угодно мала, если его мера достаточно мала). Для того чтобы вероятность осуществления тех «аномальных» начальных состояний, для которых временно́е среднее сумматорных функций не равно фазовому среднему, была достаточно мала, необходимо, очевидно, наложить количественные ограничения на значения функции распределения в «аномальных» областях (см. § 19).

Наконец, поскольку речь идет о принципиальной задаче обоснования статистики, следует иметь в виду, что к любому варианту рассматриваемой точки зрения, до тех пор пока эти варианты основаны на представлениях классической механики, целиком будут относиться все принципиальные возражения, которые определяют неудовлетворительность всякой классической теории (§ 12 и 13).

В дальнейшем (гл. V и VI) мы увидим, что, действительно, для построения статистической механики нет оснований требовать строгого соблюдения эргодичности. Однако отказ от полного объема эргодических требований объясняется не необходимостью избежать упомянутого выше кажущегося противоречия, а тем, что эргодичность в полном ее смысле не является ни достаточной, ни необходимой для обоснования физической статистики. Мы уже видели, что существенным свойством статистических систем является их свойство размешивания, не вытекающее из эргодичности. Кроме того, мы установили (§ 6), что требование размешивания любых, в том числе и сколь угодно малых областей, приводит к условиям, включающим в себя эргодичность, но что для согласования с опытом следует потребовать размешивания лишь достаточно больших областей.

Крайним выражением стремления отказаться от полных условий эргодичности является высказывавшаяся также точка зрения, согласно которой для обоснования статистики —

причем статистики в полном ее объеме — не нужны никакие специальные предположения о динамических свойствах систем, а достаточны общие принципы механики. (Иногда при этом указывались дополнительные условия: число степеней свободы предполагается очень большим, а иногда оговаривалось еще отсутствие невзаимодействующих частей системы.) На основании всего сказанного раньше нетрудно видеть, что эта точка зрения обладает одновременно как всеми общими недостатками точек зрения, основанных на классической механике, так и недостатками, специально присущими тем идеям, о которых говорится в настоящем пункте.

в) Трудности механической интерпретации физической статистики привели к мысли о построении статистики на чисто вероятностной основе, из соответствующим образом выбранной, ведущей к требуемым результатам вероятностной схемы. Эта мысль получила наиболее последовательное развитие в работах Мизеса, который показал, что если процесс перехода между состояниями системы является цепью Маркова с симметричными вероятностями перехода, то можно получить качественное выражение эргодической теоремы (называемое им квазиэргодической теоремой) и H-теоремы.

По поводу этих работ Мизеса [14], [24], так же как и всех других работ такого типа, следует отметить, что они, по существу, вообще не относятся к той проблеме обоснования, которая рассматривается в настоящей работе,— к выяснению связи физической статистики и микромеханики. Мизес с самого начала отказывается от постановки задачи об установлении этой связи. Между тем, практическая невозможность решить уравнения механики для статистических систем совсем не означает принципиальную возможность от них отказаться и, в частности, не означает возможности отказаться от вполне поддающихся учету качественных следствий дифференциальных уравнений движения (на основании сказанного в § 18, можно видеть, например, в каких случаях допустимо в классической механике исследование схемы цепей Маркова, а также можно видеть, что в этих случаях условие симметрии вероятностей переходов не выполняется). Настоящая задача обоснования статистики заключается не в том, чтобы дать построение всей системы физической статистики, исходя из некоторых внутренних принципов, из специально выбранных аксиом, а в том, чтобы согласовать наличие вероятностных законов статистической механики с теми выводами, которые вытекают из микромеханики (например, в классической теории мы должны считать, что в каждом данном случае осуществляется определенное микросостояние, независимо от того, знаем ли мы его или нет, а в квантовой теории мы можем, например, извлекать следствия из стационарности состояния, только если была измерена энергия и т. д.). Может оказаться, что решение задачи обоснования осуществимо лишь на основе определенных микроскопических принципов (мы уже видели, например, что оно не может быть дано на основе классической механики). Тогда должен быть выяснен вопрос о соотношении последних с принципами существующих микроскопических теорий: классической и квантовой, правильность которых внутри их области применимости не вызывает, конечно, никаких сомнений. Всех этих вопросов Мизес в своей теории вообще не ставит, и потому при всех своих достоинствах его теория не имеет отношения к проблеме обоснования статистики.

Отметим еще, что встречающееся иногда мнение, будто бы теория Мизеса может найти физическую основу в квантовой механике (квантовые «ячейки» и симметричные вероятности перехода между ними), совершенно ошибочно. В главе II мы увидим, что применение схемы цепей Маркова с симметричными вероятностями перехода к квантовым «ячейкам» столь же лишено физического смысла, как и применение ее к классической механике.

Здесь же следует упомянуть о работах Смолуховского [25], которые часто рассматриваются (и, повидимому, до известной степени рассматривались им самим) как примеры выяснения связи механической обратимости и термодинамической необратимости. Изучая броуновское движение частицы под действием упругой силы и флюктуации плотности в растворе коллоидных частиц, Смолуховский показал, что при начальных состояниях, сильно отклоняющихся от равновесного состояния, процесс с подавляющей вероятностью направлен к равновесию, а при начальных состояниях в окрестности равновесия оба направления хода процесса приблизительно одинаково вероятны. Кроме того, Смолуховский показал, что для любых двух заданных состояний подсчитанная при помощи стационарных вероятностей безусловная вероятность перехода из первого состояния во второе (т. е. стационарная вероятность осуществления первого состояния, умноженная на вероятность перехода из первого состояния во второе) равна безусловной вероятности перехода из второго состояния в первое. Смолуховский неоднократно отмечал, что указанное равенство выражает собой лошмидтовское требование обратимости, а так же писал, что это равенство выражает собой тот принцип объяснения необратимости при помощи обратимых явлений, который отвергался Цермело. Эти утверждения Смолуховского о смысле установленного им равенства не могут быть, однако, признаны правильными: лошмидтовская обратимость является фактом чистой механики, так же как и те свойства возврата, на которых основывался Цермело; равенство же, выведенное Смолуховским, выражает условие стационарности распределения с заранее данными вероятностными понятиями — понятиями вероятностей состояний и вероятностей перехода. Не останавливаясь здесь на этом вопросе, разрешение которого не представляет никаких трудностей, отметим лишь, что упомянутые результаты Смолуховского получены на основании заранее предположенных вероятностных законов (уравнения диффузии и равномерного закона распределения коллоидальных частиц в пространстве) и являются доказательством лишь согласованности принятых им вероятностных предположений и наших представлений о термодинамической необратимости и флюктуациях, но ни в какой мере не относятся к задаче согласования этих вероятностных пердположений и вообще законов статистики с принципами механики, а следовательно, ни в какой мере не относятся к задаче обоснования статистики.

г) Одна из наиболее распространенных точек зрения в изучаемом нами вопросе о построении статистической механики заключается в том, что существование законов физической статистики считают возможным объяснить воздействиями, оказываемыми внешней средой на статистические системы. Динамический характер последних может при этом предполагаться или любым, или обладающим некоторыми чертами, заведомо, однако, недостаточными, чтобы обеспечить существование законов статистики для изолированных систем. Было опубликовано большое число работ, в той или иной степени относящихся к этой постановке задачи; делались различные предположения о характере действующих внешних сил; однако до сих пор не получены результаты, которые могли бы при такой постановке задачи считаться удовлетворительным решением ее [26].

Отметим сначала, не задерживаясь здесь на доказательстве, что при оценке полученных на этом пути результатов следует иметь в виду, что, как правило, эти результаты лишь в некоторых отношениях аналогичны тем, которые необходимы для построения статистической механики. В других же существенных, но остающихся в тени, пунктах аналогию сохранить не удается.

Влияние внешней среды на эволюцию системы может быть очень большим. Пример, приведенный в § 15 для другой цели, показывал, насколько значительное воздействие на траектории размешивающихся систем может оказать самое незначительное возмущение (например, поле одного атома). Легко представить себе, что воздействия такой величины, как существующие в действительности, т. е. производимые всеми телами внешней среды, целиком изменяют траектории сильно неустойчивых размешивающихся систем. При этом имеющая сложную паутинообразную структуру область $(\Delta\Gamma_0)_t$, получившаяся через некоторое макроскопическое время из начальной области $\Delta\Gamma_0$, будет «размазана» по всей той части поверхности заданной энергии (точнее, слоя заданной энергии), которая «покрывается» этой паутиной.

Тем не менее, для занимающей нас главной задачи обоснования статистики мы вынуждены отвергнуть рассматриваемую точку зрения, связанную с представлением о возмущающем действии внешней среды. Дело в том, что при заданном состоянии среды, точнее говоря, при заданном законе изменения внешних сил со временем и при данном начальном микроскопическом состоянии системы мы получим траекторию, которая будет полностью определена. Следовательно, для того чтобы получить согласный с законами статистической механики вероятностный закон распределения конечных состояний (например, закон, описывающий состояние релаксации системы), необходимо* предположить наличие соответствующего вероятностного закона распределения для состояний, или, говоря иначе, для действий внешней среды (в классической теории действие однозначно определяется начальным состоянием среды). В частности, только при этом условии будет происходить упомянутое «размазывание» паутинообразной области $(\Delta\Gamma_0)_t$ по всей «покрываемой» ею части поверхности заданной энергии: при заданном законе изменения внешних сил со временем потоки в фазовом пространстве подчиняются теореме Лиувилля. С точки зрения теории «влияния внешней среды», можно было бы даже предположить, что начальные микросостояния рассматриваемой системы вообще не подчиняются определенным вероятностным законам распределения в заданной области $\Delta\Gamma_0$, а могут быть любыми. Тогда понятие вероятности для распределения начальных микросостояний вообще может быть не определено. Например, начальные микросостояния могут всегда совпадать с одной и той же точкой фазового пространства. Но зато необходимо предположить, что существует соответствующий (может быть, зависящий от этой точки фазового пространства), гарантирующий выполнение законов статистики закон распределения состояний (иначе говоря, действий) внешней среды. Лишь ценой этого нового, также нуждающегося в обосновании, предположения возможно удастся объяснить наличие законов статистической механики при многократном повторении опытов над данной системой.

* Если мы не хотим пойти путем, указанным в § 4 и 8, когда предполагался размешивающийся характер статистических систем и когда согласное с законами статистики распределение конечных состояний обусловливалось соответствующим распределением начальных состояний.

Мы оказываемся перед той же, обсуждавшейся в § 12 и 13, проблемой определения вероятностного физического закона в области, описываемой чисто классически, где не может быть физически определена сама категория испытаний, приводящих к понятию вероятности. Вводя вероятностные предположения о состояниях внешней среды, помимо всех трудностей математического построения теории, мы сталкиваемся с принципиальными трудностями обоснования этого вероятностного закона внешней среды. В частности, мы сталкиваемся с трудностями определения физических условий применимости вероятностного закона и с принципиальными и непреодолимыми трудностями, связанными с возможностью «подбора», и с вытекающим из этой возможности «несуществованием вероятностного закона». Таким образом, мы оказываемся перед лицом тех же принципиальных трудностей, перенесенных лишь из одного места в другое: с рассматриваемой системы на внешнюю среду. Для обоснования законов статистики в рассматриваемой системе мы вынуждены предполагать наличие вероятностных законов для внешней среды.

Обычно, говоря о вероятностном описании воздействия внешней среды, пытаются дать это описание в возможно более общей форме, а именно: предполагают, что возмущающее действие среды может быть представлено как действие очень большого числа независимых малых причин. Такая схема, действительно, оказывается чрезвычайно общей, и обычно удовлетворительно описывает внешние возмущения. Однако когда это предположение считают «естественным» и годным в качестве исходной точки для обоснования статистики, то упускают из виду, что речь идет не о каком-то понятии «независимых причин», имеющем самостоятельный смысл (такое понятие даже нельзя было бы определить удовлетворительно), а о независимости в е р о я т н о с т н ы х з а к о н о в действия этих причин. Для вопроса об обосновании существенно именно это п р е д п о л о ж е н и е о с у щ е с т в о в а н и и в е р о я т н о с т н ы х з а к о н о в.

Это предположение может означать для физика только то, что существует возможность неограниченного воспроизведения условий опыта, при которых параметры внешней среды будут распределены по указанным вероятностным законам (в частности, независимым законам). Мы видели в § 12 и 13, что в физической теории, основанной на классической механике, такое предположение не только не является естественным, но вообще не может быть допущено, так как вообще не может быть дано определение условий опыта, приводящего к вероятностному распределению результатов. В классической теории не может быть ни определена, ни обоснована, ни даже вообще понята возможность существования как независимых, так и любых других вероятностных законов.

Так как представление об «естественности» предположения независимых малых возмущающих действий среды особенно распространено, следует еще раз подчеркнуть, что мы, конечно, не отрицаем существования независимых вероятностных распределений большого числа малых внешних причин. Мы не отрицаем также влияния этих распределений на законы эволюции неизолированных систем, а указываем лишь на то, что ссылка на них не решает проблему обоснования вероятностных законов статистики. Действительно, сами вероятностные законы возмущающих действий среды, если говорить о физической стороне дела, обусловливаются теми же статистическими законами, которые подлежат объяснению. Задача вероятностной характеристики начальных состояний и законов изменения во времени внешней среды и, главное, задача определения связи этой характеристики с принципами классической механики является другой формой той же задачи, возможность разрешения которой составляет основной предмет настоящей главы. Как мы уже говорили, прибегая к помощи внешней среды, мы движемся в порочном круге, переносим ту же трудность из одного места в другое, придавая ей только более сложную форму.

Из сказанного следует, что удовлетворяющая требованиям логической последовательности и ясности постановка задачи обоснования вероятностных законов статистической механики может исходить лишь из идеализации изолированной системы: попытка привлечь для обоснования этих законов возмущающие действия внешней среды порочна и физически, и логически.

Добавим еще, что в рассматриваемой теории «влияния внешней среды» появляются также, хотя и в несколько ослабленной форме, трудности, порождаемые противоречием вероятностного и механического описаний закона изменения состояний системы за длительные промежутки времени (см. § 10). Выделяя как внешнюю среду столь большую совокупность внешних тел, что за рассматриваемые времена может сказаться действие на систему лишь тел этой совокупности, мы получим, поскольку в классической теории эта среда может рассматриваться как механическая система, что эволюция нашей системы будет однозначно определяться некоторым алгорифмом, зависящим от начальных микросостояний системы и «выделенной» среды и не зависящим от состояний остальных тел. Наряду с этим, в соответствии с вероятностными законами статистической физики (например, флюктуационной формулой), должны проявиться такие свойства беспорядочности временных рядов наблюдений (Regellosigkeit), которые (если рассматриваемые промежутки времени достаточно велики) лишь с крайне малой вероятностью могут быть совместимы с регулярностью, определяемой наличием алгорифма. Однако мера этой вероятности не может быть определена в общем виде, в частности, зависит от того, насколько сложен рассматриваемый алгорифм и насколько он способен имитировать законы случая за рассматриваемые интервалы времени (см. § 10). Поэтому замечание о несовместимости вероятностных законов статистики с принципами классической механики носит, конечно, менее определенный характер, чем соответствующий аргумент § 10.

Отметим еще два простых соображения, направленные против возможности последовательного проведения теории «влияния внешней среды». Основной принцип кинетики — H-теорема — справедлив только при соблюдении главного условия — изолированности системы. Поэтому его можно обосновать, лишь исходя из идеализации изолированной системы. Кроме того, теория, которая объясняла бы существование законов статистики действием внешней среды и не опиралась бы на определенные динамические свойства статистических систем, не могла бы определить границу приложимости статистики. Такая теория не могла бы, в частности, объяснить, почему для одних механических систем после некоторого времени наступает состояние релаксации (например, гиббсовское распределение энергии между частями), а для других систем не наступает. Это замечание до известной степени аналогично приведенному в § 11 аргументу.

Резюмируя, можно сказать, что, отнюдь не отрицая роли внешней среды для эволюции систем во времени и, в частности, для процессов релаксации, следует целиком отказаться от теории «влияния внешней среды» как теории, целью которой является обоснование статистики. Идя по пути, указываемому этой теорией, мы перенесли бы лишь трудность, существующую в проблеме обоснования статистических законов изолированной системы, на внешнюю среду. Поэтому решение задачи построения статистической механики может быть дано лишь на основе идеализации изолированной системы. Это прямо вытекает из наших общих соображений. То же подтверждают и приведенные в конце этого параграфа три дополнительных замечания.

§ 21. Целью первой главы было изучение возможностей построения статистической механики на основе классической механики. Резюмируем кратко, что́ может дать для обоснования физической статистики теория, исходящая из классических представлений, и что́ не может быть получено из такой теории.

Можно сделать предположения, охарактеризованные нами в § 8, т. е., помимо сделанного утверждения о том, что статистические системы являются системами размешивающегося типа, предположить, что начальный опыт выделяет «допустимые», в охарактеризованном там смысле области, и что внутри этих областей распределение вероятностей равномерно. Тогда мы сможем получить как соотношения, характеризующие состояние релаксации (распределение Максвелла — Больцмана, распределение Гиббса, вероятности флюктуаций и т. д.), так и некоторые зависимости, качественно характеризующие процесс релаксации (монотонность релаксации, H-теорему, некоторые частные зависимости, например принцип Онзагера, и т. д.).

Но в классической теории мы не можем обосновать упомянутые здесь предположения, т. е. не можем определить их отношение к микромеханике, и тем более получить их вывод, исходящий из принципов микромеханики. Это значит, что мы ни в какой мере не можем получить решения задачи так называемого обоснования статистики. В частности, в классической теории мы не можем получить понятие вероятностного закона (например, законов флюктуаций или законов статистических распределений), определить в терминах классической теории условия его применимости; не можем ответить на вопрос: как возникают вероятностные законы физической статистики, при каких условиях и благодаря каким элементарным законам природы они существуют.

Единственно возможный в классической теории ответ на эти вопросы — ответ, состоящий в том, что законы физической статистики существуют, когда соблюдается равновероятность начальных состояний, и что законы статистики обязаны своим существованием наличию этой равновероятности,— рождает новые вопросы той же трудности и того же характера. В самом деле, в классической теории остаются неопределенными возможность и условия существования равновероятности начальных состояний, остается неопределенной категория опытов, приводящих к этой равновероятности (см. § 12 и 13). Однако даже если отказаться от попыток ответить на эти принципиальные вопросы обоснования, построение статистики в классической теории не может одновременно быть удовлетворительным в теоретическом отношении и согласовываться с опытом. Это следует из того, что толкование, которое в классической теории только и может быть придано этой равновероятности начальных состояний, оказывается в прямом противоречии с опытом (см. § 14).

Кроме того, как будет показано в дальнейшем, в классической теории не могут быть получены соотношения, количественно характеризующие процесс релаксации (например, верхняя граница возможных времен релаксаций, ход процесса релаксации при начальных состояниях, определенных с наибольшей возможной полнотой, и т. п.; об этом будет говориться и это будет пояснено в гл. V). Указанный недостаток классической теории является непосредственным следствием установленной в настоящей главе невозможности построить физическую статистику на ее основе. Мы не говорим уже, конечно, об описании статистических явлений квантовой природы: явления, описываемые квантовыми статистиками, очевидно, не могут получить классической интерпретации.

Рассматривая принципиальные пороки попыток построения статистической физики на классической основе, мы не только отказываемся от исследования вопроса об интерпретации квантовых статистик, но и оставляем в стороне все соображения, связанные с тем, что сами классические понятия приложимы лишь внутри определенных границ, т. е. приложимы лишь к анализу связи опытов определенного типа. Например, опыт, точно определяющий все координаты и импульсы частиц, т. е. состояние системы как точки фазового Г-пространства, неизбежно наткнется на квантовые ограничения. Вопрос о том, в какой мере для описания статистических систем можно пользоваться классическими понятиями и в какой мере связь последовательных во времени опытов подчиняется классической механике, будет указано ниже. На основании сказанного в настоящей главе мы можем лишь притти к выводу, что вероятностные законы статистической механики основаны на существенно неклассических свойствах статистических систем (хотя в качестве необходимых условий применимости статистики могут входить и классические условия; см. § 5 настоящей главы).

Без аргументов настоящей главы, даже учитывая упомянутое ограничение области применимости классической теории квантовыми эффектами, можно было бы предполагать, что классическая механика является достаточно хорошим приближением для обоснования законов статистической механики. Можно было бы предполагать, что она является достаточным приближением, по крайней мере постольку, поскольку эти законы относятся к явлениям классическим — в том смысле, что для них величина размерности действия значительно больше, чем постоянная Планка — h, т. е. к явлениям, описываемым классической статистикой. Другими словами, можно было бы предполагать, что представления классической статистики логически последовательны и могут быть построены на основе классической механики. Можно было бы даже думать, и это было бы вполне естественным продолжением той же мысли, что законы статистической механики имеют вообще классическую природу, и даже тогда, когда они применяются в области квантовой статистики, они основаны на классических свойствах вещей и лишь выражены на квантовом языке. Мы видели, однако, что не может быть установлена необходимая связь между утверждениями классической механики, описывающими начальные опыты, и вероятностными распределениями, описывающими — также в терминах классической механики — результаты последующих опытов. В то же время опыт показывает, что такая необходимая связь в действительности существует. Поэтому необходимо отказаться от классической механики как основы для истолкования этой связи. Мы должны были притти к выводу,— звучащему несколько парадоксально и расходящемуся с наиболее распространенным мнением,— что законы статистической физики, в частности классической статистики, ни в какой мере не могут быть построены на почве классической механики.

В настоящей главе мы остановились так подробно на различных сторонах рассматриваемого вопроса потому, что с применениями понятия вероятности в чисто классической области связано особенно большое количество лишенных логической отчетливости скрытых представлений и предрассудков. Эти скрытые представления основаны на убеждении, что всякое явление природы описывается некоторым вероятностным законом, и на связанном с этим убеждением ложном мнении, будто бы независимо от применяемой т е о р е т и ч е с к о й с х е м ы (и от полного определения условий опыта), естественно допустить, что вероятностный закон всегда существует. Этот ложный взгляд предполагает, в частности, что всякому явлению всегда соответствует определенное значение вероятности (например, явлению, описываемому методами классической механики и заключающемуся в осуществлении некоторой указанной части области $\Delta\Gamma_0$; см. § 12 и 13) или что явления, «очевидно независимые», должны иметь независимые вероятностные законы распределения (см. § 21 п. 2), и т. д. Примеры таких ложных представлений мы увидим еще в главе III. Эти представления настолько привычны, что даже человек, согласившийся с нашей аргументацией, часто снова невольно к ним возвращается, как только он сталкивается с новым вопросом. Причина стойкости этих представлений в том, что они основаны на нашем интуитивном знании статистических законов, и потому они были бы допустимыми и целесообразными, если бы речь шла об изучении явлений конкретной действительности. Однако такие представления оказываются совершенно неудовлетворительными в качестве исходного пункта для обоснования самих вероятностных законов, когда речь идет о связи статистических законов и принципов микромеханики.

Кроме того, мы говорили о вопросах настоящей главы с такой подробностью еще потому, что приведенные здесь соображения об условиях применимости вероятностных понятий к опыту существенны не только для выводов этой главы, но будут лежать в основе также и многих наших последующих утверждений (гл. 2, 3 и 5).

ГЛАВА II

§ 1. Настоящая глава посвящена исследованию тех возможностей, которые предоставляются квантовой механикой для построения статистической физики.

Сразу после возникновения квантовой механики стали появляться работы, целью которых было вновь рассмотреть вопрос об обосновании статистики. В самом появлении этих работ, в возобновлении интереса к этому старому вопросу, в самой надежде найти его решение, исходящее из квантовой теории, отразилось, как уже говорилось в § 3 главы I, скрытое сознание того, что этот вопрос не получил достаточно удовлетворительного решения на основе классической механики. Действительно, никто не стал бы утверждать, что целью этих работ был просто перевод на квантовый язык решения вопроса, уже существующего в классической теории, и, в частности, распространения его на случай квантовых статистик. Очевидно, что с появлением квантовой механики возникла надежда на то, что удастся избежать различных предположений, делавшихся в классической теории, в особенности различных усреднений или, говоря точнее, различных предположений равновероятности (вроде предположения равновероятности фаз молекул в конфигурационном пространстве, позволившего Больцману доказать H-теорему для идеального газа), или удастся избежать эргодической гипотезы и т. д. и, по крайней мере, удастся придать выводам теории более общий смысл.

Несмотря на то, что опубликовано уже много работ, посвященных выяснению связи физической статистики и квантовой механики, до сих пор не внесена ясность в вопрос о том, в какой мере решена эта задача. Во всяком случае, в этом отношении нет никакого единогласия. До сих пор никто не предложил полной программы тех вопросов, которые должны быть выяснены для решения проблемы обоснования статистики; никто не показал, что предложенные схемы, в частности те квантовомеханические схемы, которые могут рассматриваться как доказательства H-теоремы, эргодической теоремы и других, д а ю т в с е, ч т о н е о б х о д и м о для обоснования статистики. В частности, никто не установил, каким образом квантовомеханические понятия, фигурирующие в этих схемах, переходят в понятия макроскопических опытов, имеющие существенно классический характер (в том смысле, что для соответствующих величин размерности действия — постоянная h пренебрежимо мала).

Однако, несмотря на отсутствие единогласия в рассматриваемых вопросах, можно, пожалуй, сказать, что в настоящее время значительное большинство физиков стоит на той точке зрения, что эргодическая проблема и проблема необратимости получили свое удовлетворительное решение в работе Неймана (1929 г. [21]) и в примыкающей к ней работе Паули и Фирца (1937 г. [22]). В таком признании, помимо всех прочих достоинств указанных работ, сыграла роль их полная математическая строгость и формальное совершенство предложенной в них схемы. Эти работы будут в дальнейшем рассмотрены особенно подробно.

Цель, которая должна быть поставлена перед квантовыми теориями, посвященными обоснованию статистики, по существу совпадает с той, которая ставилась в работах, исходивших из классических представлений. Эта цель заключается в том, чтобы дать интерпретацию не только некоторым частным проблемам — эргодичности или H-теоремы, как обычно ставилась задача, но и всей совокупности принципов, лежащих в основании физической статистики. Эти принципы — эргодический характер временных средних, равномерная (относительно начальных состояний и относительно выбора той или иной величины заданной группы величин) сходимость к пределу временных средних, существование релаксации и H-теорема — были охарактеризованы нами в § 1 главы I. До сих пор обычно оставлялись в стороне утверждения о равномерной сходимости и о релаксации (в том смысле, что после некоторого времени — времени релаксации — вероятности состояний должны определяться флюктуационной формулой). Мы будем различать в дальнейшем две части проблемы необратимости: проблему монотонного возрастания энтропии, которую будем называть H-теоремой, и проблему релаксации, имеющую только что определенный смысл. Совокупность указанных принципов лежит в основании как классической, так и квантовых статистик. В квантовых статистиках эти утверждения выражаются лишь на квантовом языке, так же как и понятия состояний системы, вероятностных распределений, эргодических средних и т. д.

При переходе от классической механики к квантовой не только изменяются понятия состояния системы и уравнений движения — вместо точки фазового пространства состояние характеризуется Ψ-функцией и вместо уравнений Гамильтона появляется уравнение Шредингера,— но также коренным образом изменяется и отношение этих понятий к опыту. В классической теории мы предполагаем, что какое-то определенное, хотя бы и неизвестное нам микросостояние существует независимо от опыта, и что любой немаксимально полный опыт, выделяющий область фазового пространства $\Delta\Gamma_0$, лишь определяет границы, внутри которых лежит это микросостояние, никак на него не влияя. В квантовой механике, во-первых, утверждение о существовании определенной Ψ-функции может быть сделано лишь на основании устанавливающего ее опыта (это обстоятельство, учет которого необходим для правильного физического толкования квантовомеханического формализма, особенно отчетливо было показано Бором в дискуссии о полноте квантовомеханического описания действительности [27]. В частности, мы не можем также говорить о значении энергии, если это значение не было предварительно определено [28]. Во-вторых, всякий опыт, в том числе и немаксимально полный (т. е. дающий нам значение не всех одновременно измеряемых величин и поэтому не определяющий Ψ-функцию), в соответствии с идеей неконтролируемого взаимодействия объекта и прибора, должен рассматриваться в квантовой теории как возмущающий состояние объекта. Следует лишь отметить, что, утверждая последнее, мы вынуждены оставить сейчас в стороне вопрос о том, как должно описываться это, предшествующее нашему опыту состояние объекта. Мы оставляем тем самым в стороне и вопрос о том, каким образом можем мы констатировать возмущающее действие опыта в тех случаях, когда объект не находился до рассматриваемого нами опыта в максимально полно определенном состоянии. Об этой проблеме описания немаксимально полных опытов еще много будет говориться в дальнейшем.

В то время как максимально полный опыт, заключающийся в определении собственных значений всех коммутирующих друг с другом эрмитовских операторов, описывается в квантовой механике Ψ-функцией, опыт немаксимально полный, по общепринятым сейчас представлениям, всегда может быть описан статистическим оператором (так называемым оператором Неймана [29] или матрицей плотности, см. § 4 гл. II). Все квантовомеханические попытки интерпретации статистики исходят поэтому из описания статистических систем либо при помощи Ψ-функций, либо при помощи статистических операторов. В настоящей главе мы будем рассматривать возможности различных точек зрения, исходя сначала из максимально полного описания, потом — из статистических операторов. Мы переносим в главу III исследование вопроса о возможности описания немаксимально полных опытов при помощи статистических операторов, и следуем в этой главе общепринятым представлениям.

Квантовомеханические работы по обоснованию статистики могут быть разделены на две основные группы: работы, в которых предполагается, что состояния системы описываются дискретными ячейками, между которыми происходят квантовые переходы с определенным образом заданными вероятностями, и работы, основанные на строгом квантовомеханическом описании систем при помощи Ψ-функций и точном решении уравнения Шредингера. Обе названные постановки задачи допускают обобщение с максимально полного описания на статистический оператор. Обе они относятся и к проблеме необратимости и к проблеме эргодичности.

Кроме того, существуют еще две группы работ, которые могут относиться лишь к проблеме доказательства H-теоремы. И та, и другая группы работ характеризуются также тем, что они используют понятие статистического оператора и теряют смысл, если ограничиваться «чистыми» состояниями. Но в то время как первая группа работ опирается на измерения, проводимые над рассматриваемыми системами, вторая основана на некотором частном свойстве изменения состояния систем по уравнению Шредингера в тех случаях, когда невзаимодействовавшие части этих систем приходят во взаимодействие. В настоящей главе мы разберем последовательно эти четыре возможных точки зрения.

В нашем изложении мы не будем стремиться к полноте обзора всех квантовомеханических работ, посвященных рассматриваемому вопросу. Будут изложены лишь основные идеи квантовых теорий, а их детали будут приводиться только в той мере, в какой они необходимы для наших выводов. Нашей целью будет выяснение вопроса о том, в какой мере эти квантовые работы способны решить задачу обоснования статистики, или, говоря более обще, выяснение вопроса о связи принципов статистической механики с квантовой механикой, в частности, выяснение поставленного Шредингером в 1925 г. вопроса [30] о роли и необходимости усреднений и дополнительных постулатов, которые могли бы обеспечить переход от квантовой механики к статистической, а также определение совместимости этих дополнительных постулатов с квантовой механикой.

Укажем здесь же результат, к которому мы придем: рассматриваемые квантовомеханические теории не могут привести к полному решению задачи обоснования статистики; даже более того,— квантовая механика в границах, определяемых ее формализмом, не может служить основой для построения статистической механики. Это значит, что не только те выводы, которые могут быть извлечены из квантовой механики при наличии максимально полного описания (т. е. при наличии Ψ-функций), недостаточны для интерпретации статистики, но что эта цель не может быть достигнута и при дополнительных постулатах, которые могут быть приняты без противоречия, с физическими условиями задачи (такие дополнительные постулаты могут, по существу, относиться лишь к вероятностям, определяющим выбор ортогональной системы и веса функций в выражении статистических операторов, которые служат, по принятому представлению, для описания немаксимально полных опытов). В частности, для всех рассматриваемых квантовомеханических работ характерно, что в них не разрешается вопрос о переходе предлагаемой квантовой интерпретации статистики в некоторую классическую интерпретацию при переходе — в смысле принципа соответствия — квантовых понятий в классические. Иначе говоря, в них остается вне поля зрения вопрос о соответствии квантовомеханической схемы с опытом, так как сами опыты, к которым относятся утверждения статистики, кинетики и термодинамики (см. § 1 гл. I), имеют макроскопический и в этом смысле классический характер (величина h для таких измерений, очевидно, может считаться пренебрежимо малой. Также очевидно, что рассматриваемые статистикой процессы никак не связаны с влиянием измерений; например, завершение процесса релаксации может быть констатировано не рядом последовательных измерений, а одним измерением, и т. д.). Следует отметить, что наличие нерешенного вопроса о связи квантовомеханических схем с опытом характерно не только для рассматриваемых работ, но неизбежно должно характеризовать всякую квантовомеханическую теорию построения статистики. Последнее утверждение будет доказано целиком в дальнейшем. Сейчас сошлемся только на то, что законченный формализм квантовой механики покоится на максимально полном описании (с помощью Ψ-функций), т. е. исходит из предположения, не совместимого с условиями, рассматриваемыми статистикой, именно с наличием макроскопических опытов. Квантовомеханический же формализм, исходящий из статистических операторов, не является законченным: описание немаксимально полных опытов статистическими операторами требует дополнительных допущений, и, как будет показано в главе III, вообще говоря, не является удовлетворительным.

Отметим еще, что так как принципиальные вопросы, представляющие наибольшую трудность для объяснения, введение вероятностных понятий, существование вероятностных законов и т. п., были весьма подробно изложены в главе I (главным образом в § 12 и 13), то в настоящей главе изложение будет более конспективным, и будет основываться на объяснениях предшествующей главы.

§ 2. Простейшая квантовомеханическая интерпретация статистики, созданная не столько со специальной целью обоснования статистики, сколько развиваемая в монографиях и курсах, посвященных квантовым статистикам, если освободить ее от некоторых ошибок изложения и придать ей, по возможности, последовательную форму, сводится к следующему. Состояние системы определяется принадлежностью системы к той или иной ячейке некоторой дискретной совокупности ячеек; причем ячейки соответствуют различным м а к с и м а л ь н о п о л н о определенным состояниям системы, а совокупность ячеек — классическому Г-пространству. На основании принципов квантовой механики предполагается, что существует определенная вероятность перехода за любой определенный интервал времени из одной ячейки в другую, удовлетворяющая соотношению симметрии $p_{ik} = p_{ki}$. В соответствии со значениями этих вероятностей перехода, любое начальное состояние или любое вероятностное распределение начальных состояний переходит с течением времени в некоторое другое распределение.

Прежде чем говорить о физических основаниях, придающих этой схеме реальность, отметим результаты, которые можно получить, исходя из нее. Если мы будем производить измерения через определенные заданные интервалы времени, то с вероятностной точки зрения эта схема оказывается схемой цепи Маркова. Действительно, так как ячейки соответствуют здесь максимально полно определенным состояниям, то вероятности перехода p_{ik}, а следовательно, и вероятности исходов последующего опыта однозначно определяются исходом настоящего опыта. Так как коэффициенты p_{ik} удовлетворяют соотношению симметрии $p_{ik} = p_{ki}$, то, как известно из теории цепей Маркова, существует стационарное распределение, представляемое равномерным распределением вероятностей между ячейками. Если мы будем считать, что все коэффициенты $p_{ik} > 0$ (что, как будет видно в § 3, можно предположить без существенного сужения физической постановки задачи), то стационарное распределение вероятностей единственно; кроме того, это стационарное распределение является предельным при любом начальном состоянии системы или при любом распределении вероятностей начальных состояний. Условие $p_{ik} > 0$ является достаточным для того, чтобы выполнялся закон больших чисел, согласно которому, для любого заданного начального состояния, при многократном воспроизведении начального состояния частость осуществления заданной ячейки в опыте, проводимом в некоторый заданный, достаточно удаленный момент, будет иметь пределом вероятность осуществления этой ячейки при стационарном (т. е. равномерном) распределении. Если выполняется условие $p_{ik} > 0$, справедлива также обобщенная предельная теорема Ляпунова [31]. Согласно этой теореме, частость осуществления заданной ячейки в данном процессе, для любого заданного начального состояния, при возрастании числа последовательных во времени опытов будет иметь пределом среднюю вероятность осуществления этой ячейки для того же процесса или (ввиду существования предельного распределения) вероятность осуществления этой ячейки при стационарном распределении. Первый из этих результатов является некоторым аналогом появления — независимо от начального состояния — равномерного распределения вероятностей на поверхности заданной энергии после времени релаксации. Второй результат можно рассматривать как аналог равенства среднего временнóго, взятого за достаточно большой промежуток времени, и среднего эргодического — также независимо от начального состояния. Если учесть, что число ячеек конечно, то упомянутое в § 1 главы I требование равномерности (с которой временнóе среднее должно сходиться к эргодическому среднему) относительно выбора начального состояния и относительно выбора ячейки, время пребывания в которой рассматривается, удовлетворяется тривиальным образом. Можно также доказать, что если всю совокупность ячеек разбить на области, отличающиеся друг от друга по величине в огромное число раз (подобно «макроскопическим областям»), то величина наиболее вероятной области с течением времени будет изменяться монотонным образом. Последнее не противоречит, однако, тому, что в опыте может быть обнаружена не эта, наиболее вероятная область, а некоторая другая. Это является аналогией, с одной стороны H-теоремы, а с другой стороны — возможности флюктуаций. Мы видим, таким образом, что понятие энтропии, которая может быть здесь определена как логарифм величины области, будет обладать теми тремя свойствами обычной физической энтропии, которые были отмечены в § 9 главы I. Резюмируя, мы можем сказать, что рассматриваемая квантовомеханическая схема обладает свойствами, которые являются аналогами всех основных, охарактеризованных в § 1 главы I утверждений физической статистики: эргодичности, равномерного стремления к пределу, H-теоремы и существования релаксации. Так же как и при изучении других, более сложных квантовомеханических теорий, мы должны будем выяснить вопрос о том, в какой мере эти аналогии являются формальными и в какой мере они выражают соотношения, существующие при действительных опытах, изучаемых физической статистикой.

В заключение этого параграфа сделаем еще несколько замечаний. Отметим, что к рассматриваемой схеме возражения возврата и обратимости не применимы. Действительно, поскольку всякое начальное состояние переходит в стационарное равномерное распределение вероятностей, очевидно, что не может быть таких моментов возврата, в которые наверняка осуществлялось бы начальное состояние (или начальное распределение вероятностей). В то же время это не противоречит тому, что опыт, проведенный после установления релаксации, даст начальное неравновесное состояние — вероятность такого исхода опыта определяется флюктуационной формулой. В изучаемой схеме не может быть для каждого данного распределения вероятностей указано такое другое распределение (переход к которому как бы аналогичен классическому обращению всех скоростей на обратные), при котором — если принять его за начальное — изменение всех вероятностей со временем будет протекать обратно тому, как протекало в исходном процессе. Действительно, как показывает известный результат Маркова, каково бы ни было начальное распределение вероятностей для ячеек, разность между экстремальными значениями вероятностей при последовательных опытах убывает — распределение стремится к равномерному. Следовательно, возражение обратимости здесь теряет силу.

Отличие цепей Маркова от динамических траекторий характеризуется также следующим, важным для дальнейшего (см. гл. V), обстоятельством: вероятности p_{ik} перехода из ячейки i в ячеку k, всегда удовлетворяющие соотношению $p_{ik}=p_{ki}$, вообще говоря, не равны вероятностям $p'_{ik} = p'_{ki}$ того, что система, прибывшая в k-ю ячейку, вышла из i-й. Как легко убедиться, равенство $p_{ik}= p'_{ik}$, вообще говоря, начинает быть справедливым лишь после установления стационарного распределения. Более того, если величины p_{ik}, согласно определению цепи Маркова, имеют определенное, независимое от распределения вероятностей между ячейками, значение, то величины p'_{ik}, как легко видеть, могут быть определены лишь в зависимости от распределения вероятностей.

Однако отмеченные отличия цепей Маркова от динамических траекторий и связанная с этим отличием невозможность воспроизвести в схеме цепей Маркова возражение обратимости не лишают временно́й ход флюктуаций физической системы, описываемой такой схемой, обратимого или, иначе, симметричного во времени характера. Действительно, в то время как любое начальное распределение с необходимостью переходит в стационарное равномерное распределение и разности между экстремальными значениями вероятностей монотонно убывают, при наблюдении и н д и в и д у а л ь н о й системы равновесная область, соответствующая подавляющей части всех ячеек, осуществляется после времени релаксации лишь с подавляющей вероятностью,— с некоторой малой вероятностью возможны флюктуации. Фиксируем некоторую «неравновесную область», состоящую из определенных ячеек, и будем определять, в какие области переходит система из этой неравновесной области и в каких областях она была непосредственно до того, как попала в эту фиксированную область. Возможны два способа определения частости: в первом случае мы рассматриваем последовательность опытов, заключающихся в том, что, исходя из произвольного начального состояния, мы ждем, пока установится (с определенной точностью) равномерное распределение вероятностей и потом возникнет фиксированная область, а затем воспроизводим опыт снова; во втором случае мы следим в течение длительного времени за невозмущенной эволюцией системы, отмечая, когда она попадет в фиксированную область. Результат будет одинаковым, независимо от того, какой способ мы изберем.

Это объясняется тем, что, согласно закону больших чисел в его простой форме — в первом случае и согласно обобщенной предельной теореме Ляпунова (которая, как уже говорилось, применима к рассматриваемой схеме) — во втором,— пределы частостей переходов из фиксированной области в некоторую другую заданную область равны пределам частости переходов, при которых система, попавшая в фиксированную область, перешла в нее из заданной области (понятно, что это заключение может быть сделано не только по отношению к областям, состоящим из группы ячеек, но и по отношению к самим ячейкам). Это свойство, называемое обычно симметрией флюктуаций относительно прошедшего и будущего или обратимостью флюктуаций, показывает, в частности, что всякая неравновесная область с подавляющей вероятностью происходит из той более равновесной области, в которую она с подавляющей вероятностью переходит. Это свойство основано лишь на зависимостях, характеризующих цепи Маркова.

То, что в рассматриваемой теории принадлежность к ячейке устанавливается максимально полным измерением, сразу вносит в последний результат одно ограничение: мы не можем говорить о симметрии флюктуации, фиксируемой в начальный момент первого максимально полного опыта, так как в квантовой механике мы вообще не можем говорить о состоянии системы, предшествующем начальному измерению. Впрочем, указанное обстоятельство несущественно для установленного сейчас результата, так как при обоих упомянутых выше путях определения частостей о симметрии флюктуаций можно говорить, очевидно, лишь по истечении времени релаксации. Мы можем, таким образом, сказать, что в рассматриваемой теории положение с возражениями возврата и обратимости соответствует тем представлениям статистической физики о возврате, обратимости и флюктуации, которые сложились на основе опыта.

Отметим еще, что в рассматриваемой теории мы получили равновероятность всех ячеек лишь как следствие процесса установления стационарного распределения. Было бы ошибкой пытаться получить эту равновероятность в начальный момент за счет каких-либо соображений симметрии. Как еще будет показано по поводу теории Паули, все соображения симметрии совершенно недостаточны для этой цели. Отсутствие симметрии всех ячеек очевидно, например, тогда, когда в начальный момент наш опыт выделил лишь какую-нибудь область заданной совокупности ячеек. Кроме того, как подчеркивалось в § 14 главы I, равновероятность всех точек поверхности заданной энергии (в рассматриваемой схеме роль этой равновероятности играет равновероятность всех ячеек), вообще говоря, противоречит опыту. В самом деле эта равновероятность не существует в любой начальный момент (иначе отпало бы само понятие релаксации), а лишь устанавливается в изолированной системе по истечении времени релаксации.

§ 3. В настоящем параграфе мы разберем вопрос об отношении изложенной в § 2 формальной схемы к действительным опытам, изучаемым физической статистикой. Изложенная в § 2 теория основана на представлении о ячейках, соответствующих максимально полным опытам. Действительно, в том случае, если состояние системы охарактеризовано максимально полно, вероятности перехода, как мы предполагали, целиком определены (на основании принципов одной только квантовой механики). Кроме того, мы предполагали, что вероятности перехода удовлетворяют соотношению симметрии $p_{ik} = p_{ki}$. Для того чтобы придать теории физический смысл, мы должны определить, при каких условиях опыта справедливы упомянутые предположения, и, в частности, определить, какие максимально полно определенные состояния могут играть роль ячеек рассматриваемой теории. Изложенная в предыдущем параграфе формальная схема лишь тогда будет соответствовать результатам статистической механики, когда полученную в этой схеме равновероятность ячеек можно будет сопоставить с законом равномерного распределения вероятности на поверхности заданной энергии. В формулах статистики подразумевается, как известно, равномерное распределение на поверхности п о л н о й энергии системы. Если бы мы допустили закон равномерного распределения на некоторой другой поверхности фазового пространства, то мы пришли бы в противоречие с основными формулами статистики в такой же мере, в какой эта поверхность отличалась бы от поверхности полной энергии. Между тем, если бы мы, в соответствии с этим, допустили, что совокупность ячеек соответствует поверхности (слою) заданной полной энергии, а каждая отдельная ячейка соответствует состоянию с определенной полной энергией, то мы пришли бы к противоречию с условием $p_{ik} > 0$ при $i \neq k$, так как вероятность перехода между стационарными состояниями равна, очевидно, нулю. Единственная возможность устранить это противоречие — возможность, находящаяся в согласии с основными чертами теории § 2, заключается в следующем: рассматривать равновероятность не стационарных состояний — собственных функций полной энергии, а почти стационарных состояний—собственных функций невозмущенной энергии системы—при соответствующим образом выбранной энергии возмущения. Выбор энергии возмущения прежде всего должен быть сделан так, чтобы собственные состояния невозмущенного оператора энергии были достаточно близки к собственным состояниям полной энергии, т. е. чтобы с достаточной точностью можно было установленную равновероятность ячеек принять за равномерный закон распределения вероятностей на поверхности заданной полной энергии. Кроме того, этот выбор должен обеспечить выполнение соотношения $p_{ik} > 0$, гарантирующего переход к предельному равномерному распределению и равенство среднего временного среднему эргодическому (или выполнение некоторого другого более слабого требования, приводящего к той же цели). Условие симметрии вероятностей перехода $p_{ik} = p_{ki}$ будет выполнено при любом выборе возмущающей энергии и является, как известно [28], следствием эрмитовского характера матрицы возмущающей энергии. Обоим условиям мы можем удовлетворить, принимая за возмущающую энергию любую функцию (оператор) V, лишь бы она, во-первых, давала достаточно малую величину для разности математических ожиданий полной и невозмущенной энергии и, во-вторых, удовлетворяла бы конечному числу условий $\int u_i V u_k dq \neq 0$ (u_i, u_k — собственные функции невозмущенной системы, соответствующие ячейкам теории § 2). Заметим, что эта возмущающая энергия V может и не иметь никакого непосредственного физического смысла.

Однако все сказанное выше отнюдь не доказывает полного соответствия изложенной в § 2 схемы действительным опытам, изучаемым физической статистикой. Укажем здесь на два основных соображения, показывающих, что мы не можем удовлетвориться приведенной в § 2 интерпретацией статистики.

Первый из этих доводов заключается в следующем: для того чтобы считать интерпретацию удовлетворительной, необходимо показать, что может быть установлена эквивалентность понятий изложенной теории и обычных понятий физической статистики, в частности, понятий макроскопического состояния и макроскопического процесса. Между тем, совершенно не очевидна возможность сопоставить с результатом макроскопического опыта (чему обычно в классической статистике сопоставлялась область фазового пространства) «область ячеек» — некоторую группу собственных состояний невозмущенной системы (о таком сопоставлении мы говорили в § 2, когда говорили об H-теореме). Такое сопоставление возможно лишь в том случае, если возмущающая энергия (и соответствующая совокупность невозмущенных состояний) выбрана так, что, помимо двух упомянутых выше требований (которым удовлетворить нетрудно), она удовлетворяет еще следующим: 1) соответствующие этой возмущающей энергии собственные состояния невозмущенной энергии при усреднении по всем собственным состояниям выделенной опытом группы должны для всех физических величин давать средние значения и законы распределения, совпадающие со средними значениями и законами распределения в том макроскопическом состоянии, с которым эта группа собственных состояний сопоставлена; 2) законы изменения во времени всех физических величин, вычисленные при помощи этих собственных функций (с точным уравнением Шредингера или посредством теории возмущения), должны совпадать с законами изменения для соответствующего макроскопического состояния как для наиболее вероятного течения процесса, так и для флюктуаций в ходе процесса; 3) наконец, для того чтобы микроскопические положения рассматриваемой теории имели физический смысл, необходимо, чтобы была возможность измерений, определяющих эти невозмущенные состояния и констатирующих переходы между ними. С обычной точки зрения эта возможность имеется всегда, если в моменты измерения мы можем выключить возмущение. Так как возмущающая энергия представляет собой часть полной энергии системы и к тому же, как отмечено выше, может совсем не иметь непосредственного физического смысла, то говорить о ее выключении в общем случае нельзя. Поэтому она должна быть выбрана так, чтобы при наличии возмущения V с помощью соответствующего опыта можно было с достаточной точностью определить невозмущенные состояния системы, описываемые собственными функциями невозмущенного оператора энергии (например, если возмущением является взаимодействие молекул газа, то невозмущенная энергия равна сумме кинетических энергий, и для определения невозмущенного состояния достаточно измерить скорости; такое измерение может быть сделано сколь угодно точно и при наличии возмущения, если взаимодействие молекул достаточно слабо). Понятно, что отмеченная выше малость энергии возмущения V сама по себе была бы недостаточна для выполнения этого требования, если бы при наличии возмущения V мы измеряли полную энергию и считали, что получаем при этом с достаточным приближением значение невозмущенной энергии. Действительно, как бы ни было мало V, мы получили бы строго стационарное состояние и, следовательно, независимо от того, насколько это стационарное состояние близко к собственному состоянию невозмущенной системы, мы не могли бы констатировать переходов между ячейками.

По существу, для того чтобы теория оправдывалась, указанные три требования к возмущению и невозмущенным состояниям должны выполняться не при каком-нибудь одном определенном выборе возмущающей энергии, а при любом выборе, удовлетворяющем условию достаточной малости V, т. е. достаточной близости «поверхностей» полной и невозмущенной энергий и условию $p_{ik} > 0$. Одним словом, все три требования должны выполняться при выборе, удовлетворяющем тем условиям, при которых может быть обоснована формальная схема теории. В самом деле, в действительности физические условия не выделяют никакую определенную возмущающую энергию; мы выделяем из полной энергии энергию V мысленно и не сопровождаем это выделение каким-либо реальным воздействием на систему. Поэтому мы получили бы внутренне противоречивую теорию, если бы предположили, что среди различных V — в одинаковой мере «реальных» — некоторые приводят к удовлетворению указанных требований, а другие — к их нарушению, тогда как в действительности, если теория справедлива, эти требования предполагаются выполненными. Легко видеть, что при любых V мы не можем ожидать выполнения этих требований, в частности второго. Однако если мы забудем на время о том, что ни одно V не выделено реально среди других (это вытекает из нашего второго основного довода), и будем брать наш первый довод в чистом виде (независимо от второго), то мы должны будем убедиться, что наши три требования удовлетворяются хотя бы при одном определенном выборе V.

До тех пор пока нет доказательства, что указанные здесь три требования, предъявляемые к выбору возмущения V, т. е. к выбору невозмущенных состояний, могут быть удовлетворены,— а задача дать такое доказательство даже никем не была поставлена,— вся теория остается скорее программой, некоторым формальным сопоставлением терминов квантовой механики и статистической физики, чем действительной интерпретацией статистической механики.

Даже более того, простые соображения показывают, что очень мало правдоподобна возможность удовлетворить этим требованиям, в частности первому, позволяющему описывать макроскопические состояния при помощи соответствующих групп почти-стационарных состояний — групп точных собственных состояний невозмущенной энергии (а не любых состояний, просто сопоставляемых с объемом h^n фазового пространства, как говорится в некоторых ошибочных изложениях этой теории). Рассмотрим, например, газ, близкий к идеальному, и различные макроскопические состояния этого газа связанные с определенной локализацией его частей в пространстве. Взаимодействие частиц может быть предположено сколь угодно слабым, и энергия возмущения, которая также, вообщ говоря, зависит от координат, в соответствии со сказанным выше, может быть сколь угодно малой (величина возмущения сказалась бы лишь на вероятностях перехода, т. е. временах изменения состояния). Поэтому энергия невозмущенной системы со сколь угодно большой точностью может быть представлена как сумма кинетических энергий частиц. Собственные функции, соответствующие такому оператору энергии, будут сколь угодно близки к плоским волнам, и, следовательно, описываемые ими частицы не могут быть локализованы даже в сколь угодно больших областях пространства, не могут быть локализованы в областях пространства, соответствующих подобранным физическим условиям, в противоречии с принятой нами макроскопической картиной. Несоответствие представлений теории и представления о макроскопическом описании можно увидеть на примере газа, близкого к идеальному, и более наглядно: если бы макроскопические состояния представлялись группой почти-стационарных состояний, то, добавляя некоторое внешнее воздействие, способное компенсировать действие возмущения, получим, что состояния системы сделаются строго стационарными и газ с любой точки зрения — также и макроскопической — не будет изменяться во времени. Такое заключение не может не казаться явно противоречивым, если мы учтем, что энергия добавочного воздействия ничтожно мала по сравнению с полной энергией $\frac{3}{2}\,nkT$ и что молекулы газа движутся, практически не взаимодействуя друг с другом.

Отметим попутно, что было бы ошибкой пытаться представить возмущение как действие внешней среды на изучаемую систему, получая таким образом равновероятность собственных состояний п о л н о й энергии системы. Причины этого те же, что и указанные в § 20 п. «г» главы I: задача доказательства H-теоремы, составляющая одну из наиболее важных частей теории, может быть поставлена лишь по отношению к изолированной системе. Главное же заключается в том, что, привлекая внешнюю среду для обоснования статистических свойств системы, мы просто переносим трудности в другое место — в определение вероятностной характеристики действия внешней среды (в частности, в излагаемой теории внешнее возмущение должно будет удовлетворять второму и третьему из только что приведенных требований). Как показывает строгое, основанное на уравнении Шредингера решение квантовомеханической задачи, * для любой заданной начальной Ψ-функции и любой

* Мы покажем сейчас, говоря о нашем втором основном доводе, направленном против теории § 2, что от применения методов теории возмущений, если они дают результаты, отличные от строгих квантовомеханических методов, следует отказаться в первую очередь.

другой заданной Ψ-функции всегда может быть подобран такой, независящий от времени гамильтониан взаимодействия с внешней средой, и, следовательно, такой полный гамильтониан, что начальная Ψ-функция, изменяясь согласно точному уравнению Шредингера, через соответствующее время будет переходить во вторую указанную Ψ-функцию (см., например, Нейман [29]). Таким образом, само действие внешней среды, согласное с законами статистической механики — выбор соответствующих гамильтонианов действия внешней среды и, в общем случае, их зависимость от времени,— нуждается в обосновании. Даже условие малости возмущающего действия внешней среды не является, очевидно, следствием принципов микромеханики, а имеет, в действительности, статистический характер и нарушается при флюктуациях действия внешней среды.

Второй основной довод, направленный против разбираемой теории, связан с понятием ячеек, т. е. максимально полно определенных состояний и вероятностей перехода между ними. Как мы подчеркивали, в этой теории предполагалось, что *система всегда находится в максимально полно определенном состоянии* и лишь переходит от одного такого состояния к другому. Вероятности перехода определялись в этой теории при помощи *теории возмущений*. С другой стороны, вероятность осуществления того или иного состояния в определенный момент времени (из выделенного нами дискретного ряда моментов) подсчитывалась обычными методами теории вероятностей, с помощью обычных законов сложения и умножения вероятностей. При этом предполагается, что указанная вероятность равна сумме вероятностей перехода системы в данное фиксированное состояние из всех других состояний, в одном из которых она была в предшествующий момент. Каждая из этих вероятностей равна произведению вероятности того, что система в предшествующий момент находилась в соответствующей ячейке, на вероятность перехода из этой ячейки в данную фиксированную ячейку за интервал времени между двумя выделенными дискретными моментами и т. д. Одним словом, изменение вероятностного распределения со временем определялось так, как если бы переходы между ячейками реально существовали, и значения вероятностей переходов p_{ik} определялись по теории возмущений. Получаемое таким путем в некоторый момент распределение вероятностей, т. е. значение вероятностей различных ячеек, определяется долей систем ансамбля тождественных независимых систем, оказавшихся в различных ячейках, если системы ансамбля действительно совершали переходы с указанными вероятностями p_{ik} (и если число систем ансамбля бесконечно велико или, во всяком случае, достаточно велико, чтобы проявилось действие закона больших чисел).

Между тем, как следует из основных принципов квантовой механики, нельзя говорить о максимально полно определенном состоянии системы (о Ψ-функции системы), если не произведен максимально полный опыт. Только при наличии такого опыта следствия, извлекаемые из наличия определенной Ψ-функции, окажутся приложимыми к действительности. Точно так же нельзя говорить о переходах между различными состояниями невозмущенной системы, если не производились максимально полные опыты в начале и в конце действия возмущения. Без таких опытов устанавливаемые теорией возмущений значения вероятностей перехода не имеют никакого отношения к действительности.

Рассмотрим ансамбль систем, находящихся в определенном начальном состоянии с собственной функцией Ψ_0. Если мы не будем производить никаких промежуточных измерений, а определим состояние систем ансамбля через длительное время t, то очевидно, что в с е системы ансамбля окажутся в одном и том же состоянии Ψ_t, которое может дать при определении невозмущенного состояния системы некоторое распределение систем ансамбля по собственным состояниям невозмущенной энергии. Очевидно, что это распределение не будет иметь ничего общего с тем распределением, которое получилось бы, если бы производились промежуточные измерения. При наличии промежуточных измерений изменение вероятностей подсчитывалось бы не квантовомеханически, а указанным выше чисто вероятностным образом, и распределение вероятностей при достаточно больших временах, как отмечалось в § 2, неизбежно стало бы равномерным. При отсутствии же промежуточных измерений распределение при сколь угодно больших временах возвращалось бы со сколь угодно большой точностью к начальному распределению, так как Ψ-функция со сколь угодно большой точностью возвращалась бы к начальной Ψ_0-функции (см. статью «Об описании немаксимально полных опытов», стр. 167). Применение теории возмущений дает здесь, таким образом, принципиально иной результат, чем привлечение точного уравнения Шредингера, так как теория возмущений связывается в этом случае с дополнительным, иногда не указываемым явно, но крайне важным предположением о наличии промежуточных измерений. Все эти обстоятельства достаточно известны, и мы останавливаемся на них лишь ввиду их особой важности для разбираемого нами вопроса.

Сущность нашего довода против теории § 2 становится ясной, если сопоставить сказанное выше с тем, что в действительности не производятся ни максимально полные измерения, определяющие начальное состояние системы, ни максимально полные измерения, служащие для констатации переходов между невозмущенными состояниями системы (эти измерения должны были бы, кроме того, производиться через столь малые промежутки времени, чтобы было допустимо использование первого приближения теории возмущений). Для физической статистики характерно как раз то, что она опирается на неполные макроскопические опыты. Как начальные опыты, так и опыты, проверяющие следствия, вытекающие на основании законов статистики (или кинетики и термодинамики), имеют существенно неполный характер (сравни также § 1 гл. I и гл. IV). Независимо от принципиальных соображений главы IV, совершенно очевидно, что практически над макроскопическими системами, изучаемыми статистикой, никогда не производятся максимально-полные опыты.

Следовательно, теория § 2 теряет всякую основу: теряется соответствие выводов теории и действительных опытов.

Заключение, к которому приводят наши два основных довода против теории § 2, находит подтверждение также в следующем: рассматриваемая теория не дает определения границ приложимости статистики, т. е. не дает определения тех систем, к которым приложимы выводы статистики. Мы видели в главе I, говоря о построении статистики на классической основе, что удовлетворение основных, охарактеризованных в § 1 утверждений статистики возможно лишь для систем определенного типа — именно размешивающихся систем. Наличие определенных требований, предъявляемых к системам, описываемым статистикой, признавалось всегда; обычно эти требования сводились к эргодичности или квазиэргодичности. В рассматриваемой теории, если бы физический смысл ее положений совпадал со смыслом обычных положений физической статистики, эти основные утверждения были бы справедливы для всех систем. В частности, в с е системы обладали бы свойствами, аналогичными эргодичности и размешиванию. Действительно, в этой теории нет никаких условий, наложенных на системы (на гамильтониан системы). Единственное предположение, позволяющее получить требуемые соотношения $p_{ik}=p_{ki}$ и $p_{ik}>0$, заключается в конечности числа состояний. Это предположение, вытекающее из дискретности энергетического спектра, выполняется при одном лишь условии конечности объема, предоставленного системе. Между тем, если предполагать, что статистические системы описываются классической механикой, последнее условие явно недостаточно для справедливости важнейших утверждений статистики, например тех, которые покоятся на свойствах размешивания.

Рассматриваемая теория не удовлетворяет поэтому принципу соответствия. Поскольку мы обсуждаем как раз возможность построения статистики на чисто квантовой основе, мы не можем заранее исходить из требования полной применимости принципа соответствия, т. е. требовать, чтобы все квантовые положения допускали бы также классическую интерпретацию. Но мы вправе ждать, чтобы по крайней мере некоторые черты теории удовлетворяли этому требованию. Действительно, описываемые статистикой опыты имеют обычно макроскопический и в этом смысле классический, не связанный с влиянием измерения, характер; все фигурирующие, например, в классической статистике понятия, кроме понятия вероятности (см. § 12 и 13 гл. I), имеют также классический характер. Не придавая поэтому замечанию о нарушении принципа соответствия самостоятельного и решающего значения, следует его учесть наряду с нашими двумя основными доводами, по существу означающими, что формальная (а именно квантовая) схема рассматриваемой теории не соответствует физической (макроскопической, и в этом смысле классической) постановке задач в статистической механике. Неспособность теории дать определение границ приложимости статистики является косвенным подтверждением этого вывода.

Мы обсуждаем теорию § 2 так подробно ввиду того, что она послужила основой ряда дальнейших квантовомеханических представлений. В частности, именно она была перенесена на почву более строгих физических представлений в известной работе Паули (1928 г. [32]), сыгравшей основную роль в развитии изучаемого нами вопроса. Отметим, что излагаемые в § 2 представления, в свою очередь, до известной степени опирались на теорию квантовых переходов в μ-пространстве одной молекулы, т. е. квантовую теорию столкновений молекул идеального газа.

Резюмируем результат, к которому мы пришли. Для того чтобы выводы теории соответствовали опыту, необходимо, чтобы через короткие промежутки времени — настолько короткие, что можно пользоваться теорией возмущений — производились максимально полные опыты, устанавливающие состояние системы (ячейки) и переходы между состояниями. Так как в действительности такие опыты не производятся, вероятностная схема теории не может соответствовать действительности. Стремление восстановить соответствие с действительностью в этом пункте, избегая представления о максимально полных опытах и пользуясь неполным описанием состояний, было исходной идеей упомянутой работы Паули. Заметим, что при невозмущенной, без промежуточных измерений, эволюции изолированной системы основной результат, получившийся в рассматриваемой теории, — эргодический, т. е. равномерный закон распределения почти-стационарных состояний (заключающийся, в частности, в том, что всегда или в подавляющую долю времени вероятность группы почти-стационарных состояний пропорциональна числу состояний группы), — при достаточно малых возмущениях принципиально не верен. Кроме того, независимо от довода об отсутствии максимально полных измерений, даже если бы эти измерения производились, мы не могли бы рассматривать излагаемую теорию как удовлетворительную интерпретацию статистики. В самом деле, нельзя доказать, что группы почти-стационарных состояний могут служить для описания макроскопических состояний и что законы изменения первых способны характеризовать изменения вторых. Даже наоборот, на примере, когда соотношение этих понятий наиболее просто, как в случае газа, близкого к идеальному, мы видим, что возможность такого доказательства совершенно неправдоподобна.

Таким образом, рассматриваемая квантовомеханическая теория § 2 не может являться удовлетворительной интерпретацией статистической механики. Она представляет формальную схему, обладающую некоторыми свойствами, аналогичными законам статистики, но не соответствует, в целом, действительным опытам, описываемым физической статистикой.

§ 4. Прежде чем перейти к теории Паули, исходящей, как уже говорилось, из немаксимально полного описания состояний, укажем в настоящем параграфе основные черты того описания неполных опытов, которое обычно применяется в квантовой механике.

Обычно считается, что тогда, когда состояние системы не может быть охарактеризовано при помощи определенной Ψ-функции, как, например, после неполного опыта, оно может быть описано при помощи определенной статистической совокупности. Статистическая совокупность задается путем указания дискретной или непрерывной (в функциональном пространстве) совокупности Ψ-функций с определенным — дискретным или непрерывным — законом распределения, устанавливающим вес той или иной Ψ-функции совокупности или той или иной области Ψ-функций функционального пространства. Задать статистическую совокупность — это значит дать способ определения математического ожидания любой величины (вероятность некоторого события, например вероятность осуществления некоторой Ψ-функции, равна математическому ожиданию величины, равной единице, если событие осуществилось, и равной нулю, если событие не наступило). Поэтому, если статистическая совокупность задана, то определены все математические ожидания $\overline{L} = \int \Psi^* L\psi dq$, где черта над L обозначает усреднение по статистической совокупности, т. е. по всем Ψ-функциям статистической совокупности, взятым с соответствующим весом. Выберем определенную систему ортогональных нормированных функций $\varphi_1\ \varphi_2, \ldots$; тогда любая Ψ-функция может быть представлена в виде: $\Psi = \Sigma a_i \varphi_i$, а математическое ожидание величины L при фиксированной Ψ-функции будет равно: $\sum_{ik} L_{ik}\, a_i^* a_k$, где $L_{ik} = \int \varphi_i^* L \varphi_k\, dq$. Математическое ожидание величины L в статистической совокупности равно $\overline{L} = \sum_{ik} L_{ik}\, \overline{a_i{}^* a_k}$, т. е. однозначно определяется для любой величины L, если заданы элементы матрицы $\rho : \rho_{ik} = \overline{a_i^*\, a_k}$, называемой обычно статистической (очевидно, Spur $\rho = 1$). Таким образом, $\overline{L} = \Sigma\, L_{ik}\rho_{ik} = \Sigma\,(L\cdot\rho)_{mm} = \mathrm{Spur}\, L\rho$, где $L\rho$ — произведение матриц L и ρ. Так как «след» матрицы — величина инвариантная относительно унитарного преобразования s системы ортогональных функций, то такой же формулой определяются математические ожидания в любой другой системе координат $\varphi_i' = \sum_k s_{ik}\, \varphi_k$, причем статистическая матрица ρ', определенная аналогично предыдущему при помощи новой координатной системы φ_i', связана со статистической матрицей ρ формулами преобразования $\rho_{ik} = s_{ei}^{-1}\, \rho_{em} s_{km} = s_{ie}^*\ \rho_{em}\ s_{km}$. Перейдем к такой координатной системе, в которой статистическая матрица диагональна (через φ будем теперь обозначать фундаментальные функции именно этой системы). Пусть элементы матрицы в этой системе имеют вид: $s_{ik} = w_i \delta_{ik}$. Тогда статистическая матрица может быть представлена в виде: $\rho = \Sigma w_k J_k$, где J_k — диагональная матрица со всеми элементами, равными нулю, кроме элемента, стоящего на пересечении k-й строки и k-го столбца и равного $+1$. Легко видеть, что J_k является так называемой матрицей проектирования на k-ю координатную ось (т. е. в подпространство φ_k функционального пространства).

Мы можем описывать рассматриваемую статистическую совокупность при помощи геометрических представлений, не зависящих от выбора той или иной координатной системы. Вместо матрицы $\rho = \Sigma w_k J_k$ можно ввести статистический оператор (его называют также оператором Неймана [29]) $U = \Sigma w_k P_{\varphi_k}$, где P_{φ_k} — оператор проектирования в подпространство φ_k. Так как Spur $P_{\varphi_k} = 1$, то Spur $U = \Sigma w_i'$ Spur $P_{\varphi_k} = 1$. Если матрицы были определены в пространстве последовательностей коэффициентов Фурье со сходящейся суммой квадратов (гильбертовом пространстве) и действовали на векторы, компоненты которых равны коэффициентам Фурье, то операторы определены в пространстве функций с интегрируемым квадратом и действуют на сами функции. Так же как каждой функции сопоставляется последовательность коэффициентов Фурье и обратно (причем в квантовой механике это сопоставление однозначно, т. е. функции, обладающие одинаковыми коэффициентами Фурье, отождествляются и имеют одинаковый физический смысл), каждому оператору L в том числе и оператору U в заданной координатной системе сопоставляется матрица с элементами $L_{ik} = \int \varphi_i^* L \varphi_k dq$, а с матрицей может быть сопоставлен оператор. Тогда математическое ожидание $\bar{L}$ любой величины L в статистической совокупности может быть выражено в форме $\mathrm{Spur}\, LU$. Последнее утверждение прямо вытекает из того, что равенство $\mathrm{Spur}\, L\rho = \bar{L} = \mathrm{Spur}\, LU$ справедливо в координатной системе φ_i (что непосредственно следует из определения оператора U) и из независимости величины «следа» от координатной системы. Оператор $U = \Sigma w_k P_{\varphi_k}$, физический смысл которого определяется этим утверждением, является, как легко видеть, дефинитным оператором с собственными функциями φ_i и собственными значениями w_i (в самом деле, операторы P_{φ_k}— дефинитные операторы с собственными функциями φ_i и собственными значениями $+1$ для φ_k и 0 для остальных φ_i). Так как $\mathrm{Spur}\, LU = \Sigma w_k\ \mathrm{Spur}\, LP_{\varphi_k}$, а $\mathrm{Spur}\, LP_{\varphi_k} = \sum\limits_{mn} L_{ik}\ (P_{\varphi_k})_{mn}$ равен L_{kk} (что легко видеть, если воспользоваться координатной системой φ_i), то $\mathrm{Spur}\, LU = \Sigma w_k L_{kk}$. С другой стороны, если в статистической совокупности производить опыты, ставящие целью определить, какое из состояний φ_i (собственных состояний U) осуществится (что́ достигается путем измерения любой величины L с собственными функциями φ_i и всеми различными собственными значениями), то вероятность обнаружить состояние φ_k равна $\mathrm{Spur}\ P_{\varphi_k} U$ (действительно, в состоянии φ_k величина, соответствующая оператору P_{φ_k}, равна единице, а в других состояниях φ_i равна нулю). Так как $\mathrm{Spur}\ P_{\varphi_k} U = w_k$, то, следовательно, вероятность получить в опыте состояние φ_k равна w_k (собственному значению оператора U). Поэтому, сопоставляя этот результат с равенством $\mathrm{Spur}\ LU = \Sigma w_k L_{kk}$ и замечая, что L_{kk}— математическое ожидание величины L в состоянии φ_k, получим, что математическое ожидание $\bar{L}$ л ю б о й величины L в статистической совокупности может определиться следующим образом: сначала производится определение того, какое из состояний φ_i осуществляется (доуточнение состояния до максимально полного), а затем, в условиях максимально полно определенного состояния, измеряется величина L. Такое заключение в квантовой механике не является, конечно, очевидным (при классических представлениях аналогичное утверждение разумелось бы само собой). Это видно уже из того, что оно выполняется лишь для системы фундаментальных функций φ_i (собственных функций оператора U, т. е. функций, для которых статистическая матрица, описывающая совокупность, приводится к диагональной форме), а для других ортогональных систем функций, вообще говоря, ложно (оно ложно, как можно непосредственно проверить, если все значения w_i различны для всех других ортогональных систем функций).

Это заключение дает возможность представлять любую статистическую совокупность (заданную как дискретным, так и непрерывным законом распределения в функциональном пространстве) как смесь систем, находящихся в «чистых» состояниях $\varphi_1, \varphi_2 \ldots$, причем доли общего числа систем в этих состояниях равны соответственно $w_1, w_2 \ldots$ Таким образом, любой непрерывный закон распределения эквивалентен некоторому дискретному закону распределения, заданному для соответствующей системы ортогональных функций φ_i (мы называем эквивалентными такие распределения, для которых математические ожидания любых операторов одинаковы). Свойство статистических совокупностей быть представимыми в виде смесей счетной последовательности состояний $\varphi_1, \varphi_2 \ldots$ позволяет определять их как такую смесь. Это определение часто берется за исходное, хотя последовательнее было бы получать его как следствие, не сужая исходного определения статистической совокупности предположением о том, что в эту совокупность входят лишь Ψ-функции некоторой счетной последовательности — заданной ортогональной системы функций.

Отметим одну простую, но важную теорему, относящуюся к связи непрерывных и дискретных эквивалентных распределений. Пусть задана статистическая совокупность, характеризуемая непрерывным и равномерным по углам распределением в некотором n-мерном подпространстве $\varphi_1, \varphi_2 \ldots \varphi_n$. Эта статистическая совокупность может характеризоваться статистическим оператором $U' = \int\int \ldots \int P_\Psi d\Omega$, где P_Ψ — оператор проектирования на переменный вектор — Ψ; $\Psi = \Sigma a_k \varphi_k$, причем $a_k = u_k + i v_k$; $\Sigma |a_k|^2 = 1$. Вектор Ψ пробегает равномерно поверхность $(2n - 1)$-мерной единичной сферы $\Sigma |a_k|^2 = \Sigma(u_k^2 + v_k^2) = 1$, что выражается условиями: $\int\int \ldots \int u_i v_k d\Omega = 0$ при всех i и k; $\int\int \ldots \int u_i u_k d\Omega = \int\int \ldots \int v_i v_k d\Omega = \delta_{ik}\, c (c > 0)$. Рассматривая выражения $\int f_1^* U' f_2 dq$ для произвольных f_1 и f_2, получим теорему: оператор U' с точностью до постоянного множителя (не имеющего значения, так как Spur $U = 1$)

равен оператору $U=\frac{1}{n}\sum_{k=1} P_{\varphi_k}$, где φ_1 и $\varphi_2 \ldots \varphi_n$ — любая ортогональная система в заданном подпространстве, т. е. оператору, системой собственных функций которого может быть любая ортогональная система в выделенном подпространстве, дополненная любой ортогональной системой в остальной ортогональной к подпространству части функционального пространства и все собственные значения которого в подпространстве равны друг другу и равны $\frac{1}{n}$, а в остальном пространстве равны нулю. Так как сумма операторов проектирования в ортогональные подпространства равна оператору проектирования в подпространство, полученное объединением рассматриваемых подпространств, то при любой ортогональной системе φ_i' имеем: $\sum_1^n P'_{\varphi_k}=P_M$, где P_M — оператор проектирования в подпространство M, образованное ортами φ_i', т. е. оператор, не зависящий от выбора ортогональной системы.

В связи с последним замечанием отметим, что когда заданы два оператора $U=\sum_1^n w_k P_{\varphi_k}$ и $U'=\sum_1^n w'_k P'_{\varphi_k}$ и если системы функций φ_i и φ_i' совпадают, то для равенства U и U' необходимо и достаточно, чтобы соответствующие w_i и w_i' также совпадали. Если φ_i и φ_i' — различные системы функций, то равенство $U=U'$ возможно лишь тогда, когда w_i равны w_i' и среди значений w_i существуют одинаковые. Функции φ, соответствующие данным одинаковым значениям w_i, могут быть переведены ортогональным преобразованием, охватывающим лишь подпространство этих φ_i, в функции φ_i', соответствующие тому же данному значению φ_i'. Это обстоятельство вытекает из простой теоремы об условиях подобия двух диагональных матриц. Иначе говоря, статистический оператор $U=\Sigma w_i P_{\varphi_i}$, определенный при помощи некоторой системы функций φ_i, может быть представлен в виде линейной комбинации операторов проектирования. Это возможно для таких систем функций, которые отличаются друг от друга и от исходной системы φ_i лишь ортогональными преобразованиями в подпространствах функций φ_i, соответствующих одинаковым собственным значениям.

Статистический оператор $U=\Sigma w_i P_{\varphi_i}$ принято представлять не только в такой непосредственно геометрической форме — в виде линейной комбинации операторов проектирования и не только в виде матрицы, но и в виде интегрального оператора с ядром $U_1 = \Sigma w_i \varphi_i^*(q')\varphi_i(q)$. Результат применения этого интегрального оператора к некоторой функции $\Psi(q)$ определяется формулой: $\int [\Sigma w_i \varphi_i^*(q')\varphi_i(q)]\ \Psi(q')dq'$, т. е. равен результату применения оператора $\Sigma w_i P_{\varphi_i}$; следовательно, собственными функциями этого интегрального оператора являются также φ_i, а собственные значения равны w_i. Легко проверить, что математическое ожидание $\bar{L}$ любой величины L определяется при его помощи формулой $\bar{L} = \int [\Sigma w_i\, \varphi_i^*(q')\ L(q)\, \varphi_i\ (q)]_{q'=q}\, dq = \int [L(q)\, \Sigma w_i \varphi_i^*(q')\, \varphi_i(q)]_{q'=q}\, dq = \mathrm{Spur}'\, LU$, где операция Spur′ обозначена специальным символом со штрихом, чтобы подчеркнуть, что здесь эта операция имеет иной смысл, чем раньше (операция в старом смысле учитывается здесь суммированием под знаком интеграла). Операция Spur′ имеет тот смысл, что в ядре интегрального оператора (т. е. в данном случае в LU_1) полагается $q = q'$.

Приведем простейший пример статистической совокупности. Пусть опыт, проводимый над водородным атомом, дал значение энергии и квадрата момента количества движения. Соответствующая такому неполному опыту статистическая совокупность задается непрерывным или дискретным распределением вероятностей различных φ-функций в подпространстве функционального пространства, определяемом функциями $\Psi_{n,l,m}$ ($n = n_0$ и $l = l_0$ — фиксированы, а $m = -l \ldots +l$). Это распределение, как показано, описывается всегда некоторым статистическим оператором $U = \sum_1^{2l+1} w_i P_\varphi$, где φ образуют ортогональную систему в $(2l + 1)$-мерном подпространстве, и, следовательно, связаны с $\Psi_{n_0,l_0,m}$ унитарным преобразованием. Направление магнитного поля не определяется измерением энергии и квадрата момента количества движения водородного атома, и произволу в его выборе соответствует произвол в выборе унитарного преобразования от одной ортогональной системы $2l + 1$ функций φ_i к другой. Это унитарное преобразование соответствует переходу от вспомогательной ортогональной системы, в которой ось z направлена вдоль магнитного поля, к основной координатной системе, в которой определены функции φ_i. Если потребовать, чтобы статистический оператор изображался линейной комбинацией операторов проектирования при любом выборе ортогональной системы φ_i, т. е. при любом выборе упомянутого унитарного преобразования, то мы должны предположить $w_i = \frac{1}{2l+1}$ при всех i. Это соответствует тому, что ядро интегрального оператора, которое с точностью до постоянной при преобразовании множителя равно $\sum_{m=-l}^{+l} w_i Y_{e.m}^{*}(\theta',\varphi')\, Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ [если представить статистический оператор, как интегральный оператор с ядром $\sum_{m=-l}^{+l} w_i \Psi^{*}_{n_0,l_0,m}(r',\theta',\varphi')\, \Psi_{n_0,l_0,m}(r,\theta,\varphi)$, где $\Psi_{n,\,l,\,m}(r,\theta,\varphi) = R_{n,\,l}(r)\, Y_{l,\,m}(\theta,\varphi)$, то при унитарном преобразовании в выделенном подпространстве радиальная часть функций не будет изменяться], будет инвариантным лишь в том случае, если все w_i равны $\frac{1}{2l+1}$. Действительно, $(2l+1)$-мерное унитарное преобразование сферических функций имеет лишь один инвариант $\sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}^{*}(\theta',\varphi')\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$, сохраняющийся при любых унитарных подстановках.

Отметим еще, что понятие статистического оператора возникает в квантовой механике в двух, принципиально различных случаях. Во-первых, предполагают обычно, что состояние системы описывается статистическим оператором, когда произведен немаксимально полный опыт, т. е. когда опыт не дает возможности определить волновую функцию. В этом случае считают, что проведенный неполный опыт выделил в функциональном пространстве некоторое подпространство, * и результату опыта сопоставляют статистическую совокупность, определенную в этом подпространстве и характеризуемую статистическим оператором. Очевидна полная аналогия таких представлений и классического описания неполного опыта при помощи ансамбля систем, распределенных в выделенной опытом области $\Delta\Gamma_0$ фазового пространства (см. гл. I), а также значение этих представлений для задачи обоснования статистики, изучающей связь принципиально неполных (макроскопических) опытов. Во-вторых, понятие статистического оператора возникает тогда, когда рассматривается сложная система, описываемая в целом при помощи Ψ-функции (после соответствующего максимально полного опыта), и ставится вопрос об описании какой-либо части системы. В этом случае можно показать, опираясь только на формализм квантовой механики, что части системы, вообще говоря, не имеют определенной Ψ-функции, а характеризуются статистическим оператором. Разница

---

* То же относится к измерению точного значения величин, обладающих вырождением, как в приведенном примере измерения энергии и квадрата момента количества движения водородного атома, или при приближенном измерении величин.

в названных двух случаях ясна. Во втором случае возникновение статистического оператора является чисто математическим следствием основных принципов квантовой механики — следствием статистического толкования Ψ-функции,— т. е. покоится на формализме максимально-полного опыта. В первом же случае возникновение статистического оператора является следствием некоторого расширения обычного формализма квантовой механики — формализма, совпадающего по своему объему со статистическим толкованием Ψ-функции. Хотя такое расширение квантовой механики на область немаксимально полных опытов является, повидимому, общепринятым и может казаться очевидным, следует отметить, что оно включает в себя некоторый новый принцип, не содержащийся в принципах статистического толкования волново́й функции. Этот вопрос будет рассматриваться в главе III, где будет показано, что, вопреки кажущейся естественности этого нового принципа, немаксимально полные опыты, вообще говоря, статистическим оператором описаны быть не могут.

Полное исследование математических свойств статистических операторов было сделано Нейманом в его известной книге [29].

II. ОБ ОПИСАНИИ НЕМАКСИМАЛЬНО ПОЛНЫХ ОПЫТОВ

Максимально полным опытом называется, как известно, опыт, определяющий значение всех одновременно измеримых величин, т. е. в квантовой механике — всех величин, соответствующих взаимно коммутирующим операторам. Максимально полный опыт дает, как известно, возможность определять Ψ-функции системы — векторы в гильбертовом пространстве. В случае же немаксимально полного опыта, когда измеряются не все одновременно измеримые величины, в гильбертовом пространстве лишь выделяется некоторое подпространство.

§ 1. Обычно считают, что немаксимально полные опыты описываются в квантовой механике при помощи так называемого статистического оператора. Полное изложение свойств этого оператора приведено в известной книге Неймана [29]. Статистический оператор может быть представлен в различных эквивалентных формах: в матричной форме, в виде интегрального оператора, и в виде линейной комбинации операторов проектирования. Остановимся для определенности на последней форме:

$$U = \sum_i w_i P_{\varphi_i}.$$

Такая запись указывает, что произведенный неполный опыт выделил в гильбертовом пространстве подпространство, характеризуемое векторами φ_i, и что вероятность получить при доуточнении опыта до максимально полного функцию φ_i равна w_i. Математическое ожидание любой величины в условиях, описываемых статистическим оператором, равно, как известно, Spur LU.

Представления, приводящие к описанию немаксимально полных опытов статистическими операторами, кажутся с первого взгляда естественными. Однако эти представления оказываются слишком «классическими». Они основаны на скрытом предположении, что после того, как произведен немаксимально полный опыт, система характеризуется некоторыми величинами и свойствами, которые в действительности порождаются лишь доуточнением опыта до максимально полного и до этого доуточнения не существуют. Когда считают, что после немаксимально полного опыта система описывается статистическим оператором, подобно тому как после максимально полного опыта системе приписывается Ψ-функция, то упомянутые (вообще говоря, ошибочные) представления сводятся к представлениям двух различных видов. Краткому, без подробного изложения и без примеров, доказательству неправильности этих двух представлений посвящены последующие пункты «а» и «б».

а) Во-первых, используя статистический оператор, мы предполагаем выделение некоторой ортогональной системы координат в подпространстве, выделенном немаксимально полным опытом, и предполагаем также определенный выбор весов w_i. Выделение той или иной ортогональной системы координат, т. е. системы ортогональных функций φ_i, не является, очевидно, выбором того или иного математически эквивалентного способа описания той же физической картины. Изменение ортогональной системы, вообще говоря, означает переход к иному, описываемому статистическим оператором, физическому состоянию, к иной, как говорят, статистической совокупности. («Состояние» понимается здесь в более широком смысле, чем максимально полное — Ψ-функцией определенное состояние.) Это видно уже из того, что, как можно показать, при двух различных выборах ортогональных систем функций статистические операторы могут быть равны друг другу лишь при условии, что в обоих операторах все веса w_i одинаковы (отсюда следует также, что свобода в выборе ортогональных систем не может быть сведена к свободе в выборе весов w_i). Поэтому предполагаемое оператором Неймана выделение определенной ортогональной системы функций и фиксирование определенных весов w_i является введением ф и з и ч е с к и ф и к т и в н ы х свойств описываемой действительности. Сделанное утверждение означает, что после одного лишь немаксимально полного опыта ни выделение ортогональной системы функций, ни вероятности w_i физически не существуют. Это означает, в частности, что в физических условиях, определяемых результатом начального немаксимально полного опыта, могут быть системы с законами распределения (даже если предположить, что эти законы распределения существуют), противоречащими тем, которые предписываются статистическим оператором (как бы ни был фиксирован — лишь бы он был фиксирован — выбор ортогональной системы функций и вероятностей w_i). Сказанное основано, в конечном счете, на том, что запись результатов опыта при помощи статистического оператора вводит всегда дополнительные и, вообще говоря, фиктивные утверждения, не содержащиеся ни в начальном опыте, ни в тех следствиях, которые можно извлечь на основании постулатов квантовой механики.

Для иллюстрации сказанного можно, например, указать на случай, когда в результате начального немаксимально полного измерения для водородного атома оказалось, что значение энергии E меньше E_0. Тогда, если выбрать в качестве ортогональной системы функции $\Psi_{n,l,m}$ с $n < n_0$, то, как следует из формулы $\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}(UH - HU)$, все математические ожидания не будут изменяться со временем; если же выбрать в качестве ортогональной системы линейные комбинации функций $\Psi_{n,l,m}$ с различными $n (n < n_0)$, то математические ожидания будут со временем изменяться.

б) Во-вторых, независимо от предположения, что в ы д е л е н а какая-то ортогональная система функции φ_i и существуют какие-то вероятности w_i, применение статистического оператора содержит предположение, что какие-то Ψ-функции — φ_i с у щ е с т в у ю т (с теми или иными вероятностями), хотя бы они и не были фиксированы. При этом предположении упускается из виду то, что при каждом максимально полном измерении возникает сильное воздействие прибор — объект, и что, предполагая те или иные Ψ-функции существующими «сами по себе» — после немаксимально полного опыта, мы упускаем из виду то, что в действительности это воздействие не было произведено.

В начальный момент $t_0 = 0$ следствия, извлекаемые из статистического оператора, не могут противоречить тем результатам проверочного измерения, которые с достоверностью будут получены. Ведь эти результаты могут быть лишь такими, которые с достоверностью следуют из начального немаксимально полного опыта и, следовательно, с достоверностью следуют из того факта, что состояние системы принадлежит к выделенному начальным опытом подпространству. Поэтому они содержатся в любом — при любой системе φ_i и любых значениях w_i — статистическом операторе, который может быть написан на основании этого опыта. Вследствие этого противоречие между данными, извлекаемыми из статистического оператора и результатами проверочного измерения в момент $t_0 = 0$, невозможно. Однако это противоречие может возникнуть для моментов времени $t > t_0$ и причина этого противоречия заключается в названном выше ошибочном предположении существования Ψ-функции. Могло бы показаться, что для предсказания результатов проверочного измерения после начального немаксимально полного опыта у нас нет иного аппарата, кроме того, который дает изменение со временем самого статистического оператора, и что поэтому никакого противоречия нельзя установить. Но, как видно из следующего примера, это не так. На примере простейшего случая мы покажем, что указанное противоречие для $t>t_0$ действительно возникает.

Пусть начальный немаксимально полный опыт, произведенный над материальной точкой с массой в 1 г, дал координату x_0 с точностью $\delta x_0 = 1$см и импульс p_0 с точностью $\Delta p = 10^{-2}$г см/сек. Записывая этот результат при помощи статистического оператора, можно представить его линейной комбинацией операторов проектирования в состоянии Ψ_i, являющихся волновыми пакетами, которые получены в результате доуточнения начального опыта до максимально полного: $U = \sum_i w_i P_{\Psi_i}$. Действительно, эти доуточнения могут, например, заключаться в измерении координаты с неточностью $\Delta x_0 = 10^{-25}$ см, при прежней неточности $\Delta p_0 = 10^{-2}$ г см/сек импульса, так что $\Delta x_0 \Delta p_0 \backsim h$ (такая точность в измерении координаты, конечно, недостижимая практически, принципиально, по крайней мере в «классической» квантовой механике, вполне допустима). Измерение координаты даст один из $n = \frac{\delta x_0}{\Delta x_0}$ интервалов ширины Δx_0; каждый из n возможных результатов доуточнения записывается в виде Ψ-функции, имеющей вид волнового пакета $\Psi_i(x, t)$:

$$\Psi_i(x,0) = Ce^{-\frac{(x-x_i)^2}{4\Delta x_0^2}}; \quad \Psi_i(x,t) \sim Ce^{-\frac{\left(x-x_i-\frac{\bar{p}}{m}t\right)^2}{4\left(\Delta x_0^2+\left(\frac{\Delta p_0}{m}\right)^2 t^2\right)}}.$$

Плотность вероятности будет

$$|\Psi_i(x,t)|^2 \sim C_1 e^{-\frac{\left(x-x_i-\frac{\bar{p}}{m}t\right)^2}{2\left(\Delta x_0^2+\left(\frac{\Delta p_0}{m}\right)^2 t^2\right)}},$$

т. е. имеет вид гауссовской кривой с дисперсией $D = \Delta x_0^2 + \left(\frac{\Delta p_0}{m}\right)^2 t^2$. Вне центрального интервала ширины $\sqrt{D}$ лежит приблизительно 0.62 интеграла гауссовской кривой (это видно из таблиц функции $\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^x e^{-\frac{z^2}{2}}dz$), а вне интервала ширины $2\sqrt{D}$ лежит 0.32 интеграла гауссовской кривой. В начальный момент $t_0 = 0$ статистический оператор в силу указанного обстоятельства дает ничтожную практически равную нулю вероятность обнаружить материальную точку вне интервала δx_0, каковы бы ни были значения весов w_i в операторе. Ведь каждая функция Ψ_i дает при $t = 0$ гауссовское распределение со своим центром x_i и с дисперсией Δx_0. Во времена $t > \frac{\delta x_0}{\Delta p_0} m = 10^2$ сек дисперсия $D = \Delta x_0^2 + \left(\frac{\Delta p_0}{m}\right)^2 t^2 \approx \left(\frac{\Delta p_0}{m}\right)^2 t^2$ имеет величину, большую чем δx_0^2. Поэтому для таких времен вероятность найти материальную точку вне интервала $\left(x_0 + \frac{p_0}{m} t\right) \pm \pm \frac{1}{2}\left(\delta x_0 + \frac{\Delta p_0}{m} t\right)$ длины $\delta x_0 + \frac{\Delta p_0}{m} t \leqslant 2\sqrt{D}$ будет не меньше 0.32. Однако легко видеть, что этот интервал и есть тот интервал, в котором должна оказаться материальная точка по классической механике, в применимости которой к данному случаю ($m = h$, $\delta x_0 = 1$ см, $\Delta p_0 = 10^{-2}$ г см/сек, $t = 10^2$ сек) нельзя сомневаться. В частности, например, вероятность найти материальную точку вне полуторного классического интервала, т. е. вне интервала длины $\frac{3}{2}\left(\delta x_0 + \frac{\Delta p_0}{m} t\right)$, не меньше 0.14. Абсурдность приведенного результата (отметим, что он будет справедлив при любых значениях весов w_i) доказывает сделанное утверждение.

Из сказанного в пп. «а» и «б» следует, что описывать немаксимально полные опыты при помощи статистического оператора, вообще говоря, нельзя. Однако это не значит, что статистическим оператором совсем нельзя пользоваться. Во многих случаях он получает право на существование в силу специальных обстоятельств. В большинстве этих случаев изложенные в п. «б» аргументы перестают быть существенными, так как хотя описываемая при помощи статистического оператора совокупность систем и рассматривается, как кажется с первого взгляда, после немаксимально полного опыта, все же рассчитываемые при помощи этого оператора средние измеряются после промежуточного доуточнения опыта до максимально полного. При этом, по существу, статистический оператор является средством охарактеризовать совокупность систем, находящихся в различных максимально полно определенных состояниях. Изложенные в п. «а» аргументы перестают при этом быть существенными и по только что указанной причине (существование определенной ортогональной системы) и благодаря тому, что к рассматриваемой совокупности применима статистика (существование определенных вероятностей w_i), что, однако, не является следствием квантово-механического описания. Отметим еще отдельно случай, когда статистический оператор бесспорно применим к описанию по существу немаксимально полно определенных состояний: тогда, когда рассматривается часть системы, в целом обладающей Ψ-функцией. Часть такой системы, вообще говоря, Ψ-функцией не обладает и описывается статистическим оператором. Этот случай подробно рассмотрен Нейманом.

§ 2. Так как статистический оператор не может в общем случае служить средством описания немаксимально полного опыта, и так как при приближении к максимально полному опыту классическая характеристика заведомо неприменима, то возникает вопрос об описании опытов, не являющихся максимально полными, хотя и близких к ним. Мы не будем здесь касаться вопроса об условиях, гарантирующих существование определенного вероятностного закона при немаксимально полных измерениях (например, как отмечалось выше, в статистическом операторе вероятности могли бы не иметь определенных значений). Этот вопрос связан с выяснением условий существования статистики и релаксации в физической системе. Отметим лишь одну характерную черту области, переходной между классическим и квантовым описанием,— черту, относящуюся к специфическому, но важному для принципиальных задач статистики, вопросу о возвратной теореме.

Пусть опыт дал нам определенную область $\Delta\Gamma$ фазового пространства. Рассмотрим вопрос об эволюции этой области во времени. Пусть область $\Delta\Gamma \gg h^n$. Тогда применима классическая механика и, в частности, возвратная теорема Пуанкаре. В усиленной формулировке Хинчина она означает, что при конечной мере фазового пространства $m(\Omega)$ при заданной области $\Delta\Gamma$ на временной оси относительно плотно расположены такие моменты времени t (т. е. в каждом достаточно большом интервале длины T есть хотя бы один такой момент), что

$$\mu_t = \frac{m(\Delta\Gamma\,\Delta\Gamma_t)}{m(\Delta\Gamma)} > \frac{m(\Delta\Gamma)}{m\,\Omega} - \varepsilon,$$

каково бы ни было ε. Здесь $\Delta\Gamma_t$ обозначает ту область, в которую $\Delta\Gamma$ перейдет через время t. $\Delta\Gamma\,\Delta\Gamma_t$— общую часть областей $\Delta\Gamma$ и $\Delta\Gamma_t$, а m — меру соответствующей области. В то же время существование в механике размешивающихся систем, для которых, по определению при $t \to \infty$, $\mu_t = \frac{m(\Delta\Gamma)}{m(\Omega)}$, показывает, что отношение $\frac{m(\Delta\Gamma)}{m(\Omega)}$ является верхним пределом μ, т. е. что в общем случае μ не может превзойти этот предел.

Пусть, с другой стороны, $\Delta\Gamma \approx h^n$. Тогда применима квантовая механика, состояние системы описывается волновым пакетом, а его изменение во времени — уравнением Шредингера. Распределение вероятностей в пространстве координат и в пространстве импульсов определяет некоторую область возможных значений x_i и p_i (для волнового пакета — это входящие в знаменатель показателя гауссовских пакетов величины Δx и Δp, определяющие дисперсию пакетов), т. е. некоторую область $\Delta\Gamma$ фазового пространства. Общее решение уравнения Шредингера в случае дискретного энергетического спектра может быть представлено в виде:

$$\Psi(x, t) = \sum_i C_i e^{-\frac{i}{h}\varepsilon_i t}\Psi_i(x).$$

Кроме того, по доказанной Фридрихсом теореме, спектр уравнения Шредингера с потенциальной энергией, равномерно стремящейся к бесконечности при стремлении точки конфигурационного пространства к бесконечности, дискретен (отметим, что это условие эквивалентно условию конечности объема фазового пространства в возвратной теореме Пуанкаре). По этим двум причинам, какова бы ни была желаемая точность, можно указать такой промежуток времени, по истечении которого $\Psi(x, t)$ каждый раз будет с желаемой точностью (в смысле среднего квадратичного) возвращаться к исходному состоянию. Для определения этого промежутка времени следует отбросить остаточный член ряда $\Psi(x, t)$, обладающий достаточно малой нормой, и рассматривать свойства периодичности n первых членов ряда. По истечении этого времени с желаемой точностью будут возвращаться к исходному состоянию и законы распределения в конфигурационном и импульсном пространстве, и, следовательно, величина μ_t, определенная выше, сможет превзойти $1 - \varepsilon$ при любом ε.

Указанное различие величины μ в классической и квантовой механике естественно,— эти две механики имеют совершенно различные законы. Однако следует помнить, что система подчиняется законам и квантовой и классической механики в зависимости от типа рассматриваемых опытов. При $\Delta\Gamma \sim h^n$ предел $\sup \mu = 1$ для любой системы, удовлетворяющей указанным условиям; при $\Delta\Gamma \gg h^n$ для общего вида систем (в частности, для размешивающихся) $\lim \sup \mu = \frac{m(\Delta\Gamma)}{m(\Omega)} < 1$.

Из сказанного вытекает, что по отношению к рассматриваемым — характеризуемым величиной μ — свойствам нет непрерывного перехода от квантовой механики к классической.

Отметим, что отношение рассматриваемых свойств к свойствам движения индивидуальной системы с заданным начальным состоянием $\Delta\Gamma$, очевидное в квантовом случае (где, в частности, близость μ к единице влечет с вероятностью, близкой к единице, повторение с заданной точностью прежних результатов измерений), в классическом случае определяется обычно предположением, что все точки внутри $\Delta\Gamma$ одинаково вероятны (или даже подчинены некоторому непрерывному закону распределения,— это не изменит нашего основного вывода). Тогда μ делается равным вероятности найти систему в исходном $\Delta\Gamma$.

Не будем останавливаться на вопросе о том, когда и при каких опытах аналогичное предположение правильно и должно быть сделано. Отметим лишь, что существующая в указанном смысле промежуточная область, лежащая между квантовой и классической областями, не может быть рассмотрена существующими полуклассическими методами. Последние являются методами приближенного решения уравнения Шредингера, и дают лишь следствия этого уравнения. Для рассматриваемой же промежуточной области характерно именно отклонение от выводов из уравнения Шредингера.

Мы оставляем в стороне выяснение тех глубоких свойств уравнений классической и квантовой механики, на которых основаны сделанные выводы; оно могло бы быть полезно при попытках найти методы описания промежуточной области. Мы не будем также касаться вопроса о возможных применениях представления об этой области.

III. ПРОЦЕССЫ РЕЛАКСАЦИИ СТАТИСТИЧЕСКИХ СИСТЕМ И КРИТЕРИЙ МЕХАНИЧЕСКОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ

(докторская диссертация)

ВВЕДЕНИЕ

Трудности, связанные с так называемым «обоснованием статистики», т. е. установлением связи статистики и механики, сводились, как известно, к двум основным трудностям, имеющим совершенно различную природу: во-первых, трудности, связанной с введением в классическую механику вероятностных представлений, составляющих существенную черту статистической физики, например ее основного утверждения — H-теоремы; во-вторых, трудности, связанной с необходимостью определять тот вид механических систем, к которым относятся результаты статистики. С первой группой вопросов связаны задачи механического толкования необратимости, все широко известные возражения против больцмановского рассмотрения H-теоремы. Со второй группой связаны исследования по эргодичности, в очень малой степени достигшие той цели, которая ставилась статистической механикой.

Несмотря на ряд побочных результатов, иногда исключительной ценности, полученных при попытках преодолеть эти две трудности, следует считать, что задача установления связи статистики и механики еще совершенно не решена.

Действительно все попытки ввести вероятностные представления в классическую механику оказались противоречивыми. В частности, противоречивой оказалась и интерпретация H-теоремы при помощи знаменитой больцмановской пилообразной кривой. С другой стороны, механическая эргодичность, во-первых, оказалась совершенно недостаточной для целей статистики,— в частности для определения основного понятия — понятия релаксации; во-вторых, результаты исследования по эргодичности не представляли возможности дать физическую характеристику тех систем, которые подпадали под вводимые математические определения.

В то же время основанные на квантовой механике попытки решения вопроса вообще не касались второй трудности; эти попытки относились лишь к модели необратимости. Но и здесь они не достигали цели: указанная ими связь микроскопических и макроскопических понятий не была удовлетворительной. Таким образом, как классическая, так и квантовая точки зрения не вводили вытекающего из механической характеристики системы понятия релаксации системы — основного понятия статистической физики: они не только не давали (хотя бы принципиально) возможности количественного определения времени релаксации, но не давали даже его качественного определения. Поэтому они были совершенно неудовлетворительны.

В настоящей работе понятие эргодичности оставляется в стороне. Мы отказываемся от принятия эргодической гипотезы: она одновременно и недостаточна и не необходима для статистики. Мы исходим из понятия движений размешивающегося типа. В работе показывается, что необходимое механическое условие для применимости статистики заключается в требовании того, чтобы в фазовом пространстве системы все области, начиная с некоторых, достаточно больших областей, деформировались с течением времени так, чтобы при сохранении объема — по теореме Лиувилля — их части распределялись по всему фазовому пространству (точнее, слою заданных значений однозначных интегралов движения) все более и более равномерно. Далее, устанавливается критерий, которому должна удовлетворять потенциальная энергия системы для того, чтобы осуществлялось такое размешивание и показывается, что во всех случаях практически важных сил взаимодействия этот критерий будет выполнен.

Такое размешивание связано с тем, что в n-мерном конфигурационном пространстве близкие вначале траектории расходятся очень быстро, так, что их нормальное расстояние возрастает по экспоненциальному закону. Этот метод сведения задачи механики к задаче изучения расходимости геодезических линий в соответствующем римановом пространстве вариационного принципа Якоби оказывается общим методом исследования механической неустойчивости систем.

С излагаемой точки зрения входящее в утверждения статистической механики понятие вероятности порождается вызываемой квантовыми причинами невозможностью определить состояние системы как точку в фазовом пространстве. Результат начального опыта будет некоторой областью объема $A^n \gg h^n$, и закон распределения вероятностей определяется законом расплывания точек этой области по всей поверхности заданной энергии.

При этом процесс релаксации оказывается процесоом этого размешивания. Время релаксации, вообще говоря, зависит от вида начальной флюктуации. Наибольшее время релаксации определится как то время, в течение которого начальные области объема A^n (при $A \sim h$) расплывутся по всему фазовому пространству более или менее равномерно, с той равномерностью, которая определяется точностью проверочного опыта, констатирующего установление равновесия. Оказывается, что это время в очень широких пределах будет нечувствительно к величине начальной области A^n, но при предельном переходе $A \to 0$, т. е. при переходе к классической механике, стремится к бесконечности. Далее показывается, что при переходе к все бо́льшим и бо́льшим флюктуациям обычно определенное время релаксации — время, после которого система с подавляющей вероятностью перейдет в равновесное состояние, будет возрастать в очень незначительной степени. Определенное нами наибольшее время релаксации зависит от выбора той или иной начальной области величины порядка A^n. В конце работы доказывается, что оно имеет верхнюю границу.

Общему изложению предшествует разбор названных вопросов для идеального газа, являющийся в то же время иллюстрацией общих утверждений. Для идеального газа приведено количественное определение времени релаксации.

А. СЛУЧАЙ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

§ 1. Расходимость геодезических линий

Законы соударения — сохранение энергии и количества движения — дают для столкновения двух шаров следующие равенства:

$$v'_{x_1} = \frac{m_1 v_{x_1} + m_2 v_{x_2}}{m_1 + m_2} + \frac{u m_2}{m_1 + m_2} \cos\theta \cos\varphi;$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$v'_{z_2} = \frac{m_1 v_{z_1} + m_2 v_{z_2}}{m_1 + m_2} - \frac{u m_1}{m_1 + m_2} \sin\theta.$$

Здесь $u^2 = \left|\vec{v_1} - \vec{v_2}\right|^2$ и сферические координаты θ и φ определяют после столкновения направление относительной скорости (сохраняющейся при столкновении по величине).

Предполагая столкновение упругим и задавая направление линии центров, совпадающей по предположению с направлением оси x, определяем скорости целиком:

$$v'_{x_1} = \frac{(m_1 - m_2)\, v_{x_1} + 2m_2\, v_{x_2}}{m_1 + m_2}\,; \; v'_{y_1} = v_{y_1}; \; v'_{z_1} = v_{z_1};$$

$$v'_{x_2} = \frac{(m_2 - m_1)\, v_{x_2} + 2m_1\, v_{x_1}}{m_1 + m_2}\,; \; v'_{y_2} = v'_{y_2}; \; v'_{z_2} = v_{z_2}.$$

Уравнение поверхности в n-мерном пространстве имеет вид:

$$F(x_1, \ldots, x_n) = 0.$$

Законы движения луча, распространяющегося по формулам геометрической оптики со скоростью, равной единице, приводят к следующим результатам.

Пусть X_i — координаты передовой точки луча (т. е. движущейся точки в n-мерном пространстве) в момент времени t_0; Y_i — точки поверхности, от которой произошло отражение в момент t_1; Z_i — точки луча в момент $t_2 > t_1$; U_i и V_i — компоненты скорости до и после столкновения. Тогда

$$\vec{Y} = \vec{X} + \vec{U}(t_1 - t_0), \tag{1}$$

$$\vec{Z} = \vec{Y} + \vec{V}(t_2 - t_1), \tag{2}$$

$$F(\vec{Y}) = F(\vec{X} + \vec{U}[t_1 - t_0]). \tag{3}$$

Обозначая

$$U = \left|\vec{U}\right|^2; \quad V = \left|\vec{V}\right|^2,$$

получим из законов отражения:

$$U = V; \tag{4}$$

$$\vec{V} = a\vec{U} + b \operatorname{grad} F \tag{5}$$

$$\frac{(\vec{U} \operatorname{grad} F)}{\sqrt{U}\sqrt{\Phi}} = -\frac{(\vec{V} \operatorname{grad} F)}{\sqrt{V}\sqrt{\Phi}}, \tag{6}$$

где $\Phi = \operatorname{grad}^2 F$.

Возводя (5) в квадрат и складывая почленно, получим:

$$U = a^2 U + 2ab\,\Phi' + b^2\,\Phi, \tag{7}$$

где $\Phi' = (\vec{U}\,\mathrm{grad}\,F)$.

Равенство (6) при подстановке (5) дает:

$$\Phi' = -(a\Phi' + b\Phi), \tag{8}$$

$$\Phi'^2 = a^2\,\Phi'^2 + 2ab\,\Phi\Phi' + b^2\,\Phi^2. \tag{9}$$

Умножая (7) на Φ и вычитая из (9), получим:

$$(a^2 - 1)(\Phi'^2 - U\Phi) = 0.$$

Неравенство Коши—Шварца дает

$$a = \pm 1$$

(за исключением того случая, когда $\vec{U}$ и grad $\vec{F}$ параллельны, т. е. луч нормально падает на поверхность).

При $a = -1$ (8) дает $b = 0$, т. е. $\vec{V} = -\vec{U}$ — случай отражения не по законам геометрической оптики. При $a = +1$ $b = -\dfrac{2\Phi'}{\Phi}$ и

$$\vec{V} = \vec{U} - \frac{2\Phi'}{\Phi}\,\mathrm{grad}\,F. \tag{10}$$

Рассматривая в координатной системе, линейно преобразованной по закону:

$$x_1' = \sqrt{m_1}\,x_1 \quad x_2' = \sqrt{m_1}\,y_1 \quad x_3' = \sqrt{m_1}\,z_1 \quad x_4' = \sqrt{m_2}\,x_2, \ldots$$

отражение от поверхностей

$$F_i(x_i, y_i, z_i) = 0,$$

параллельных стенкам сосуда и отстоящих от них на расстоянии r_i и $\dfrac{n(n-1)}{2}$ поверхностей

$$\varphi_{ik} = (x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2 + (z_i - z_k)^2 - r_{ik}^2 = 0 \tag{11}$$

(где $r_{ik} = r_i + r_k$), представляющих собой гиперцилиндры, параллельные $3n - 2$ осям координат, мы находим законы упругих столкновений молекул.

Действительно, например, для поверхности

$$\varphi_{12}(x_1', x_2', \ldots, x_n') = \left(\frac{x_1'}{\sqrt{m_1}} - \frac{x_4'}{\sqrt{m_2}}\right)^2 + \left(\frac{x_2'}{\sqrt{m_1}} - \frac{x_5'}{\sqrt{m_2}}\right)^2 +$$

$$+ \left(\frac{x_3'}{\sqrt{m_1}} - \frac{x_6'}{\sqrt{m_2}}\right)^2 - r_{ik}^2 = 0,$$

выбирая ось x в направлении центров молекул и полагая, следовательно, $x_2 = x_3 = x_5 = x_6 = 0$, получим:

$$\Phi' = (\vec{U}\,\mathrm{grad}\,\varphi_{12}) = 2\left(\frac{u_1'}{\sqrt{m_1}} - \frac{u_4'}{\sqrt{m_2}}\right)\left(\frac{x_1'}{\sqrt{m_1}} - \frac{x_4'}{\sqrt{m_2}}\right),$$

а

$$\Phi = \mathrm{grad}^2\,\varphi_{12} = 4\left(\frac{x_1'}{\sqrt{m_1}} - \frac{x_4'}{\sqrt{m_2}}\right)\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right),$$

где $\vec{U}' = \frac{d\vec{X}'}{dt}$, формула (10) дает:

$$v_1' = u_1' - \frac{\left(\frac{u_1'}{\sqrt{m_1}} - \frac{u_4'}{\sqrt{m_2}}\right)}{\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)}\frac{2}{\sqrt{m_1}},$$

$$v_4' = u_4' - \frac{\left(\frac{u_1'}{\sqrt{m_1}} - \frac{u_4'}{\sqrt{m_2}}\right)}{\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)}\frac{2}{\sqrt{m_1}} \qquad (12)$$

и $V_k' = U_k$ для $k \neq 1.4$.

Возвращаясь к нештрихованным координатам, находим обычные формулы соударений.

Выраженные в приведенной выше формуле (10) уравнения движения системы в $3n$-мерном конфигурационном пространстве дают возможность определить быстроту возрастания неопределенности в скоростях системы, т. е. неопределенности в направлении движения точки, представляющей движение системы в $3n$-мерном конфигурационном пространстве. Эта неопределенность определяется величиной телесного угла, образованного пучком лучей $3n$-мерного пространства.

При соответствующем выборе координатной системы, как показывают соотношения (12), изменятся лишь две компоненты $3n$-мерной скорости.

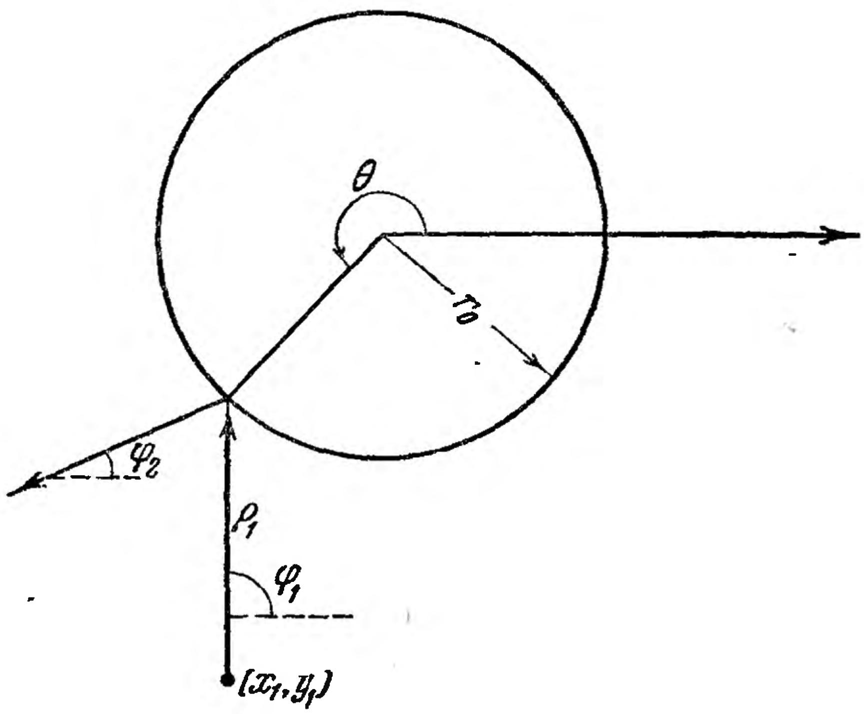
Для рассеяния пучка лучей соответствующий двумерный случай дает:

$$x_1 + \rho_1 \cos\varphi_1 = r_0 \cos\theta, \tag{1}$$

$$y_1 + \rho_1 \sin\varphi_1 = r_0 \sin\theta, \tag{2}$$

$$\varphi_1 + \varphi_2 - \pi = 2\theta. \tag{3}$$

Здесь x_1 и y_1 — декартовы координаты начального положения точки, ρ_1 — расстояние этой точки до точки отражения луча от окружности, θ — угол, определяющий положение последней точки относительно центра окружности, r_0 — радиус окружности, φ_1 и φ_2 — углы, определяющие начальное и конечное направление скорости.



Принимаем за независимые переменные x_1, y_1 и угол φ_1. Тогда из (3)

$$\frac{\partial\varphi_2}{\partial\varphi_1} = 2\frac{\partial\theta}{\partial\varphi_1} - 1. \tag{4}$$

Дифференцируя (1), получим:

$$\frac{\partial\rho_1}{\partial\varphi_1}\cos\varphi_1 - \rho_1 \sin\varphi_1 = -r_0 \sin\theta \frac{\partial\theta}{\partial\varphi_1}.$$

Откуда

$$\frac{\partial\theta}{\partial\varphi_1} = \frac{-\frac{\partial\rho_1}{\partial\varphi_1}\cos\varphi_1 + \rho_1 \sin\varphi_1}{r_0 \sin\theta}. \tag{5}$$

Теперь определим $\frac{\partial \rho_1}{\partial \varphi_1}$. Исключая θ из (1) и (2)

$$x_1^2 + y_1^2 + 2(x_1 \cos\varphi_1 + y_1 \sin\varphi_1)\rho_1 + \rho_1^2 = r_0^2.$$

и дифференцируя по φ_1, получим:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial \varphi_1}(x_1 \cos\varphi_1 + y_1 \sin\varphi_1 + \rho_1) + \rho_1(y_1 \cos\varphi_1 - x_1 \sin\varphi_1) = 0.$$

Исключая x_1 и y_1 при помощи (1) и (2):

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial \varphi_1} = -\rho_1 \operatorname{tg}(\theta - \varphi_1). \tag{6}$$

Подставляя (6) в (5), получим:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \varphi_1} = \frac{\rho_1}{r_0} \frac{1}{\cos(\theta - \varphi_1)} \tag{7}$$

и, подставляя (7) в (4), получим окончательно:

$$\frac{\partial \varphi_2}{\partial \varphi_1} = \frac{\rho_1}{r_0} \frac{2}{\cos(\theta - \varphi_1)} - 1, \tag{8}$$

т. е. телесный угол, образуемый пучком лучей, возрастает при каждом отражении в число раз порядка $\frac{\rho_1}{r_0}$ $\left[\frac{\partial \varphi_2}{\partial \varphi_1}\right.$ стремится к ∞ при φ_1 стремящемся к $\theta - \frac{\pi}{2}$, но при интегрировании по углам это, конечно, не дает расходимости, так как число столкновений с данным $\theta - \varphi_1$ пропорционально $\left.\sin 2(\theta - \varphi_1)\right]$.

Так как число столкновений пропорционально времени, то, принимая угол, образуемый двумя исходящими из одной точки конфигурационного пространства траекториями (геодезическими линиями соответствующего риманова пространства), за меру геодезического отклонения, получим, что это отклонение возрастает со временем по экспоненциальному закону. Действительно, за время свободного пробега τ произойдет в среднем столкновение n молекул, и телесный угол, характеризующий неопределенность направления $3n$-мерного вектора скорости, возрастет в $\left(\frac{\lambda}{r_0}\right)^{2n}$ раз (где λ — средняя длина свободного пробега, а r_0 — радиус молекул), и геодезическое отклонение двух данных траекторий возрастает в $\left(\frac{\lambda}{r_0}\right)$ раз.

Таким образом, $\varphi_t = \varphi_0 \left(\frac{\lambda}{r_0}\right)^{\frac{t}{\tau}}$, что в соответствии с формулой

$$y(s) \geqslant Cy(s_0)\, e^{D(s-s_0)} \quad s \geqslant s_0 \geqslant 0 \tag{9}$$

показывает, что ход возрастания нормального линейного геодезического отклонения будет определяться экспоненциальным законом (так как время t, очевидно, пропорционально длине геодезической дуги s).

Действительно, $\varphi_t = \varphi_0 e^{\alpha t}$ и линейное геодезическое отклонение:

$$y_t \approx \sum \varphi_i \, \Delta s_i \approx \int_0^t \varphi_s \, ds = \frac{\varphi_0}{\alpha} e^{\alpha t} - \frac{\varphi_0}{\alpha}.$$

Условие (9) требует, чтобы было выполнено соотношение:

$$\frac{\varphi_0}{\alpha} e^{\alpha t} \geqslant C \frac{\varphi_0}{\alpha} e^{\alpha t_0} e^{D(t-t_0)},$$

т. е. чтобы $Ce^{(D-\alpha)(t-t_0)} \leqslant 1$, что будет всегда, если выбрать $C < 1$, а $D < \alpha$.

§ 2. Время релаксации

Соображения, высказанные выше, дают возможность оценить время релаксации идеального газа по скоростям.

Пусть состояние системы в импульсном пространстве характеризуется классически точкой, лежащей на поверхности заданной энергии — на сфере радиуса p:

$$p = \sqrt{3np_0} = \sqrt{3n \frac{1}{2} mkT}.$$

Минимальная допускаемая квантовой механикой неопределенность каждой компоненты импульса равна $\frac{h}{L}$, где L — линейные размеры сосуда.

Мы получим равномерное распределение вероятностей в импульсном пространстве на поверхности заданной энергии тогда, когда изображающие точки скорости системы будут иметь в $3n$-мерном импульсном пространстве сферически симметричное и равномерное распределение. В этом случае телесный угол, под которым видна из начала координат импульсного пространства область неопределенности импульса системы, будет порядка полного телесного угла, а именно порядка

$\dfrac{(2\pi)^{\frac{3n}{2}}}{(3n-2)(3n-4)\ldots 2}$ для n четного и порядка $\dfrac{2^{\frac{3n+1}{2}}\pi^{\frac{3n-1}{2}}}{(3n-2)(3n-4)}$ для n нечетного. Этим определится время релаксации по скоростям.

Так как, согласно приведенным выше формулам, за время свободного пробега τ произойдет в среднем возрастание телесного угла, характеризующего неопределенность направления $3n$-мерного вектора импульса, в $\left(\frac{\lambda}{r_0}\right)^{2n}$ раз, то время релаксации по скоростям будет определяться соотношением:

$$\varphi_0\left(\frac{\lambda}{r_0}\right)^{2n\frac{t}{\tau}}=\frac{(2\pi)^{\frac{3n}{2}}}{(3n-2)(3n-4)\ldots 2}$$

(для четного n), где φ_0 — начальная неопределенность в телесном угле. Угол φ_0 равен величине центральной проекции начальной области неопределенности импульса на поверхность единичной сферы, т. е. равен $\varepsilon_0 s_1$, где ε_0 — отношение величины центральной проекции s' начальной области неопределенности импульса на поверхности сферы радиуса $p=\sqrt{3n}\,p_0$ к величине s_p поверхности этой сферы, а s_1 — величина поверхности единичной сферы.

Таким образом, равномерное распределение наступает тогда, когда величина ε (определенная так же как ε_0, но для всех моментов времени) будет порядка единицы, т. е. когда

$$\varepsilon_0\left(\frac{\lambda}{r_0}\right)^{2n\frac{t}{\tau}}=1,$$

где

$$\varepsilon_0=\frac{s'}{s_p},\quad \text{а}\quad s_p=\frac{(2\pi)^{\frac{3n}{2}}\cdot\left(p_0\sqrt{3n}\right)^{3n-1}}{(3n-2)(3n-4)\ldots 2},$$

а s' заключено, как легко видеть, в пределах Δp^{3n-1} и $\Delta p^{3n-1}\sqrt{3n}$. Отсюда получим:

$$2n\frac{t}{\tau}\ln\frac{\lambda}{r_0}=\ln\frac{s_p}{s'}=\frac{3n}{2}\ln 2\pi+\frac{3n-1}{2}\ln 3n+$$
$$+(3n-1)\ln\frac{p_0}{\Delta p}-\frac{3n-2}{2}\ln 2-\frac{3n-2}{2}\ln\frac{3n-2}{2}+$$
$$+\frac{3n-2}{2}\approx\frac{3n}{2}\ln 2\pi+3n\ln\frac{p_0}{\Delta p}+\frac{3n}{2}.$$

Следовательно,

$$t = \frac{\frac{3}{2}\tau}{\ln\frac{\lambda}{r_0}}\left[\ln\frac{2\pi}{\frac{\Delta p_0}{p_0}} - \frac{1}{2}(\ln 2\pi - 1)\right].$$

Для другого предельного значения s' в прямую скобку добавляется пренебрежимо малый член $-\frac{1}{4}\left(\frac{\ln n}{n} + \frac{\ln 3}{n}\right)$.

Как легко убедиться, для n нечетного выражение для t будет иметь точно такой же вид.

При интересующих нас значениях Δp и p_0 второй член прямой скобки будет исчезаюше малым по сравнению с первым, и им следует пренебречь.

Тот же результат можно получить несколько менее строго, определяя то время, в течение которого максимальный линейный угол θ, под которым видна область неопределенности, возрастет до 2π. За время свободного пробега область неопределенности возрастает в среднем в $\frac{\lambda}{r_0}$ раз вдоль каждой из $2n$ осей; следовательно, максимальный линейный угол возрастет в $\left(\frac{\lambda}{r_0}\right)^2$ раз в среднем за время 3τ.

θ_0 заключено в пределах $\frac{\Delta p\sqrt{3n-1}}{p}$ и $\frac{\Delta p\sqrt{3n}}{p}$, т. е. может считаться равным $\frac{\Delta p}{p_0}$. Следовательно, $\theta_0\left(\frac{\lambda}{r_0}\right)^{2\frac{t}{3\tau}} = 2\pi$ и, так же как и раньше, получаем:

$$t = \frac{\frac{3}{2}\tau}{\ln\frac{\lambda}{r_0}}\left[\ln\frac{2\pi}{\frac{\Delta p}{p_0}}\right].$$

Полученная формула обладает свойством, аналогичным, в некотором смысле, нечувствительности формулы Больцмана к определению вероятности: она нечувствительна к определению величины исходной неопределенности. Эта нечувствительность, как и в формуле Больцмана, обусловливается логарифмической зависимостью и малой величиной множителя, стоящего перед логарифмом. Нечувствительность проявляется в возможности введения под знак логарифма множителей, которые должны быть малы по сравнению с отношением $\frac{p_0}{\Delta p}$. Иначе говоря, время релаксации оказывается нечувствительным к величине планковской постоянной h; однако оно стремится к бесконечности при h, стремящемся к нулю, т. е. при переходе к классическому случаю.

Подставляя минимальные, допускаемые квантовой механикой значения неопределенности, получим, в случае нормального состояния 1 см^3 идеального газа (например, H_2) для отношения $\frac{p_0}{\Delta p}$ значение 10^{+9}, а для времени релаксации по скоростям величину порядка 5τ, где τ — время свободного пробега (порядка 10^{-9}). Эта величина по порядку лишь немного отличается от принимаемой обычно, когда исходят из предположения, что время релаксации по скоростям совпадает со временем изменения энергии каждой молекулы на величину порядка самой энергии, т. е. со временем τ, считая (по самой постановке задачи совершенно бездоказательно), что это изменение с необходимостью (или по крайней мере с подавляющей вероятностью) протекает в направлении установления равновесного распределения скоростей. Согласно излагаемым здесь представлениям, с необходимостью будет устанавливаться лишь равномерное распределение вероятностей, а оно с подавляющей вероятностью приводит к равновесному распределению скоростей.

Полученные соотношения показывают, что при возрастании величины флюктуации время релаксации возрастает очень незначительно. Не только при малых, но и при больших флюктуациях время релаксации по скоростям будет порядка τ, т. е. при возрастании величины флюктуации будет очень быстро сходиться к пределу.

Для времени релаксации по координатам, т. е. для времени, после которого все положения каждой из молекул окажутся одинаково вероятными, точки зрения, основанные на классической механике, не могут, конечно, дать никакой количественной оценки. В квантовых работах Неймана—Паули [21, 22] этот вопрос вообще не ставится.

С излагаемой точки зрения время релаксации по координатам определяется, как время, для которого

$$\Delta x_{i0} + \Delta v_{x_{i0}} \cdot t \approx L$$

порядка линейных размеров системы. Это время максимально для $\Delta x_{i0} \approx \frac{L}{2}$.

Действительно:

$$\Delta x_0 + \frac{ht}{\Delta x_0 \cdot m} = L; \qquad t = \frac{m \cdot \Delta x_0}{h} \cdot (L - \Delta x_0);$$

$$t'_{\Delta x_0} = \frac{mL}{h} - \frac{2m}{h} \Delta x_0 = 0.$$

Следовательно, для указанных выше условий

$$t_{\max} = \frac{m}{h} \frac{L^2}{4} \approx 2.5 \cdot 10^2.$$

Время релаксации по координатам несравненно больше времени релаксации по скоростям.

Б. РАЗМЕШИВАНИЕ В ФАЗОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ

§ 1. Исследования по эргодичности

Невозможность эргодических систем в исходном их определении (как систем, траектория которых при безграничном во времени продолжении должна проходить через все точки, совместные с заданным значением энергии системы) основана, по Розенталю [33] и Планшерелю [34], на доказанной Брауэром (1911) невозможности взаимооднозначных и непрерывных отображений множеств различного числа измерений.

Предложенная Эренфестом квазиэргодическая гипотеза («при достаточно длительном продолжении движения во времени изолированная система сколь угодно близко подходит к любой заданной фазовой точке, совместимой с энергией системы») была использована Розенталем [35] для доказательства равенства временных и фазовых средних. Его доказательство, основанное на разбиении двух областей равной меры на счетное число частей, происходящих друг из друга при движении по фазовым траекториям, оказалось, как показал Миламед, ошибочным: в нем ошибочно изменялся порядок операций суммирования бесконечных рядов и перехода к предельным во времени значениям.

Как показал Нейман [36], при конечной мере $m(\Omega)$ фазового пространства системы требование эргодичности системы, как постоянство почти везде в Ω среднего во времени каждой принадлежащей L^2 функции, эквивалентно требованию метрической транзитивности движения системы (т. е. невозможности выделить хотя бы два измеримых и отличных по мере от нуля инвариантных при движении подмножества Ω).

При этом среднее во времени функции $f(P)$ определено как $\lim\limits_{T-T_0\to\infty} \frac{1}{T-T_0}\int\limits_{T_0}^{T} f(P_t)\,dt$. Связь определенной таким образом эргодичности с требованием совпадения временного и фазового среднего очевидна.

Независимо от этого Нейман, Карлеман, Биркгофф и Рисс доказали так называемые статистическую и индивидуальную эргодические теоремы, являющиеся общими предложениями механики, независимыми от конкретных предложений о характере движения (вроде метрической транзитивности).

Было доказано, что каждая, принадлежащая L^2 функция $f(P)$ обладает (в смысле сильной сходимости) принадлежащим L^2 средним во времени:

$$\lim_{T-T_0\to\infty}\left\|\frac{1}{T-T_0}\int\limits_{T_0}^{T} f(P_t)\,dt-\bar{f}(P)\right\|=0, \quad f(P_t)=U_t f(P),$$

где U_t — унитарный (вследствие существования интегрального инварианта движения) оператор движения. Приведенное равенство в силу общего свойства унитарных операторов — существования среднего арифметического возрастающих целых степеней — будет всегда справедливым.

Среднее во времени $\bar{f}(P)$ будет инвариантным относительно преобразования U_t, что очевидно из того, что $\bar{f}(P)$ как предел среднего во времени постоянно вдоль фазовых траекторий и однозначно определяется равенством $(f, \varphi)=(\bar{f}, \varphi)$ (здесь φ — некоторая функция), выполнимость которого следует требовать для каждого инвариантного при движении φ.

Кроме того, была доказана обычная сходимость

$\frac{1}{T-T_0}\int\limits_{0}^{T} f(P_t)\,dt$ к $\bar{f}(P)$ почти для всех P, для всех принадлежащих L' функций f и для Ω без диссипативных (т. е. состоящих из блуждающих множеств) частей (так называемая индивидуальная эргодическая теорема).

Из последней теоремы сразу же вытекает существование предела доли времени пребывания системы в заданной области $\Delta\Gamma$ фазового пространства; для этого достаточно принять $f(P)$ за характеристическую функцию множества $\Delta\Gamma$.

Эти общие предложения механики оставляют, однако, открытым вопрос о том, в каких случаях будут выполняться приводящие к равенству средних хронологических и средних фазовых условия метрической транзитивности системы.

Но главная причина недостаточности изложенных результатов для так называемого обоснования статистики заключается, тем не менее, совсем в другом. Не вдаваясь подробно в этот вопрос, изложенный в другом месте (см. монографию), отметим только следующее: все основанные на классической механике схемы, к которым примыкают и изложенные результаты, принципиально не допускают непротиворечивого введения вероятностных представлений — в том смысле, что любое относящееся ко времени t вероятностное утверждение не может быть необходимым следствием какого бы то ни было утверждения, относящегося к моменту времени t_0, если оно не содержится в нем тождественным образом. Кроме того, «классические» представления принципиально не дают возможности определить понятие времени релаксации, и тем более не дают возможности количественно определить это время.

Лишь иным выражением этого обстоятельства является отсутствие непротиворечивого толкования необратимости. В частности, именно в этом отношении противоречиво и последнее оставшееся после многочисленных дискуссий больцмановское толкование H-теоремы при помощи известной H-кривой: во-первых, само введение вероятностных представлений лишено здесь необходимых оснований и оказывается бессмысленным, а во-вторых, вероятностная схема оказывается противоречивой — она приводит к противоречию: счетное множество равновероятных состояний.

Отметим также разобранное в другом месте (см. монографию) утверждение, что той же чертой — неспособностью ввести основное для статистической физики понятие — понятие о времени релаксации — обладают и все основанные на квантовой механике работы по обоснованию статистической физики — работы Паули [32], Неймана [21, 36], Паули и Фирца [22] и т. д.

§ 2. Максимально полный макроскопический опыт

Перейдем к представлениям, излагаемым в этой работе и основанным на невозможности доуточнения некоторого класса опытов — максимально полных опытов, производимых над макроскопическими системами и записываемых в виде неравенств, характеризующих области фазового пространства объема $A^h \gg h^n$ (только такие опыты и являются для макроскопических систем, изучаемых статистикой, возможными).

Отметим, что понятие о максимально полном опыте, производимом над макроскопическими системами, являющимися объектами статистики, основано не только на невозможности определять состояние как точки в классическом фазовом пространстве, но и на невозможности проведения опыта, дающего область точной величины h^n. Невозможность такого опыта вызывается наличием достаточно высокого потенциального барьера, ограничивающего систему (т. е. наличием ящика), вызывается наличием полей взаимодействия частиц системы друг с другом и с ящиком (полей, ограничивающих, вообще говоря, точность измерения импульса) и вызывается, главное, неконтролируемым воздействием измерения, произведенного над одной частью, на другие части системы.* Этой невозможностью порождается задача о способах описания результатов измерения, т. е. об описании изменения во времени начального распределения вероятностей. Таким описанием, как отмечалось выше, не может быть статистический оператор, отчасти потому, что входящие в него коэффициенты с точки зрения строгой квантовой механики принципиально остаются неопределенными. Еще важнее то, что сами результаты последующих измерений, как видно из анализа, произведенного измерением возмущения, принципиально будут иными, чем результаты каких бы то ни было (с любыми определенными или неопределенными вероятностями) исходов максимально полного опыта, понимаемого в смысле *точной квантовой механики*, т. е. опыта, приводящего к области, описываемой Ψ-функцией, т. е. области величины h^n. Однако описание проведенного опыта будет обладать рядом присущих статистическому оператору свойств: не давая закона распределения вероятностей для измерения любых величин, оно будет давать вероятности для некоторых из них, а именно для координат и импульсов. Мы принимаем как постулат, что в этой области максимально полных, т. е. не допускающих уточнений опытов, проводимых над макроскопическими системами,** будет справедлив принцип соответствия, в том смысле, что распределение вероятностей различных состояний будет определяться распределением частей исходной фазовой области по поверхности однозначных интегралов движения. Такой принцип, относясь к области, к которой неприменим ни аппарат квантовой механики, ни аппарат классической механики, конечно, не может быть доказан иначе, чем правильностью вытекающих из него следствий. Однако этот принцип не противоречит ни одной из известных закономерностей и, повидимому,

---

* Невозможность получения Ψ-функции макроскопической системы является следствием требования сохранения заданной макроскопической характеристики [всякий опыт, устанавливающий Ψ-функцию макроскопической системы, приводит, по Н. С. Крылову, к сильному нарушению макроскопической характеристики системы. Подробное доказательство этого утверждения должно было содержаться в недописанных главах монографии. (*Прим. ред.*)].

** В то же время эти опыты принципиально не допускают возможности записи в виде Ψ-функций и приводят к областям порядка $\gg h^n$.

подтверждается всеми установленными фактами. Математическая форма, описывающая утверждаемое сформулированным принципом распределение вероятностей и изменение его во времени, аналогична полуклассическому методу Венцеля—Брюллюена, примененному к случаю, когда задано распределение вероятностей для двух рядов канонически сопряженных величин и ставится задача о приближенном определении Ψ-функции. При этом, как известно, можно пренебречь связанными с фазой квантовыми эффектами (так что получаемый результат близок к определенному классическим описанием распределению вероятностей для значений канонически сопряженных величин), что очевидно, так как исходные области $\gg h^n$.

§ 3. Размешивание в фазовом пространстве

Определим понятие движения размешивающегося типа. Такими движениями в классической механике называются движения, для которых

$$\lim (U_t f g) = \frac{(f \cdot 1)\overline{(g \cdot 1)}}{m(\Omega)},$$

т. е.

$$\lim_{t \to \infty} \int\limits_{\Omega} f(P_t) \overline{g}(P)\, dm = \frac{\int\limits_{\Omega} f dm \int\limits_{\Omega} \overline{g} dm}{m(\Omega)}$$

для любых двух принадлежащих L^2 функций.

Если принять, что f и g — характеристические функции двух заданных областей, то движение размешивающегося типа будет, очевидно, удовлетворять требованиям необходимого для применимости статистики и сформулированного во введении «расплывания».

Исследуем вопрос о существовании систем размешивающегося типа. При этом мы будем опираться на принадлежащие Хедлюнду и Хопфу [37] исследования о распределении элементов геодезических линий на поверхностях с заданной римановой метрикой.

Пусть F — риманова поверхность с заданной метрикой $ds^2 = g_{ik} dx^i dx^k$. Предполагается, что квадратичная форма положительно определенна, обладает неприводимой к однопараметрической форме коэффициентов таблицей производных, и что коэффициенты этой квадратичной формы дифференцируемы нужное число раз.

Пусть F — полное пространство, т. е. вместе с отрезком линии F содержит и всю линию. Рассмотрим пространство Ω направленных элементов линий, принадлежащих F, т. е. пространства, точками которого являются точки пространства F вместе с заданным в них направлением, определенным, например, соответствующим единичным вектором. Геодезическим течением в Ω называется движение точек Ω вдоль соответствующих геодезических линий F со скоростью $\frac{ds}{dt}=1$. Тогда, при заданной единичной длине направляющих векторов, $dm=dm_1 d\varphi$ образует инвариантный при преобразованиях движения элемент объема пространства Ω, причем dm_1 — элемент объема F, а $d\varphi$ — элемент определяемого в F угла. Этим определяется инвариантная при преобразованиях движения лебеговская мера m пространства Ω. Предполагается, что рассматриваемые пространства F обладают свойством финитности, т. е. тем свойством, что угловая мера геодезических полулучей, уходящих на бесконечность, равна нулю для почти всех точек F.

При этих условиях предложенные Хедлюндом и Хопфом методы дают возможность доказать ряд теорем, излагаемых в последовательно появлявшихся работах этих авторов, — ряд теорем последовательно возрастающего объема. Эти теоремы сводятся к доказательству того, что при двух условиях: *а*) кривизна R ограничена, и геодезические линии равномерно удовлетворяют условию неустойчивости $\frac{y'}{y} \geqslant C$, где y — нормальное линейное геодезическое отклонение, т. е. расстояние двух соответствующих точек двух близких геодезических, и *б*) производная $\frac{dR}{ds}$ ограничена — среднее во времени любой суммируемой в Ω в смысле m-меры функции равно вдоль всех геодезических (исключая самое большое множество геодезических, имеющих в Ω меры нуль) среднему по Ω пространству. Иначе говоря, обобщенная геодезическая распределена на F равномерно по поверхности и по направлению. Кроме того, будет справедливо основное предложение (в частности теоремы 10.1 и 11.2 основной работы Хопфа [10]) о том, что, геодезический поток будет в пространстве Ω потоком размешивающегося типа (в смысле приведенного выше определения).

Этот результат Хедлюнда и Хопфа будет исходным пунктом последующего изложения. Рассмотрим классическую вариационную задачу движения консервативной системы n степеней свободы (т. е. будем предполагать независимость сил от скоростей). Тогда, как известно, вариационная задача может быть сведена к вариационной задаче, имеющей вид:

$$\delta \int ds = \delta \int \sqrt{(\varepsilon_0 - u) \sum a_{ik} \dot{q}^i \dot{q}^k}\, dt = \delta \int \sqrt{(\varepsilon_0 - u) \sum a_{ik} dq^i dq^k},$$

т. е. к задаче нахождения геодезических линий в римановом пространстве с метрикой, определяемой квадратичной формой $ds^2 = (\varepsilon_0 - u) \Sigma a_{ik} dq^i dq^k$. Произведя некоторое преобразование координат, приведем метрику к конформно-эвклидовой форме, т. е. придадим компонентам фундаментального тензора g_{ik} вид: $g_{ik} = A(\varepsilon_0 - u) \delta_{ik}$.

Получив далее некоторую равномерность распределения вероятностей в новой координатной системе, мы сможем сразу распространить эту вероятность на старую координатную систему, так как величина элемента объема фазовой области есть инвариант канонического преобразования. Будем считать, поэтому, что $ds^2 = A(\varepsilon_0 - U) \Sigma dx^{i2}$, где $A = \text{const}$. Легко видеть, что пространство, состоящее из направленных элементов линий полученного риманова пространства, будет эквивалентно фазовому пространству. Действительно, точка фазового пространства (x_i, p_i) может быть определена как соответствующая точка конфигурационного пространства (x_i) вместе с заданным вектором скоростей $(\dot{x}_i)$. Некоторому интервалу координат и импульсов фазового пространства будет соответствовать в пространстве F некоторый интервал объема dm_1, некоторый интервал угла $d\varphi$ и некоторый интервал dr длины направляющих векторов. Рассматривая те точки начальной неопределенности пространства Ω, которые соответствуют заданной полной энергии ε_0 мы получим, что в силу размешивающегося характера геодезического движения в Ω, доля этих точек, попадающая в некоторый интервал $dm_1 d\varphi$, будет зависеть лишь от величины рассматриваемого интервала и будет ему пропорциональна. Все рассматриваемые точки фазового пространства, т. е. точки Ω с добавочной характеристикой — длиной направляющегося вектора, соответствующие каждому данному ε_0, принадлежащему интервалу $d\varepsilon$, попадут внутрь интервала dr. Поэтому, определяя во всех точках допускаемую в них начальной неопределенностью полной энергии системы $d\varepsilon$ величину dr, одинаковую для всех точек (так как $d\varepsilon = d\varepsilon_{\text{кин}}$), получим, что все точки начальной области равномерно распределятся внутри слоя заданного dr, т. е. равномерно распределятся внутри слоя заданной неопределенности однозначных интегралов движения. (Распределение будет равномерным при данном dr, т. е. сделается равномерным по всем параметрам, кроме r, по которому оно будет определяться начальным распределением, так как очевидно, что по параметру r размешивания не будет, поскольку области фазового пространства, соответствующие неперекрывающимся $d\varepsilon$, бесспорно не будут переходить друг в друга.)

Трудность, возникающая при этом, состоит в том, что, по условиям теоремы Хопфа, при стремлении к равномерному размешиванию скорость движения вдоль геодезической $\frac{ds}{dt}$ равняется единице, т. е. постоянна, в то время как в действительности скорость движения обратно пропорциональна квадрату коэффициента преломления $(\varepsilon_0 - u)^{-\frac{1}{2}}$. Таким образом, вводя обозначение $\frac{1}{2}\ln(\varepsilon_0 - u) = \tau$, получим, что $\frac{ds}{dt} = e^{\tau}\sqrt{\sum\left(\frac{dx^i}{dt}\right)^2}$, в то время как $\sqrt{\sum\left(\frac{dx^i}{dt}\right)^2} = \sqrt{\varepsilon_{\text{кин}}}$, в свою очередь, пропорционально e^{τ}. Однако это несущественно, так как хотя точки области начальной неопределенности, соответствующие одному и тому же ε_0, но разным начальным значениям u, и будут иметь в начальный момент различную скорость $\frac{ds}{dt}$, их средние скорости за достаточно большой промежуток времени будут одинаковыми в силу теоремы о равномерном распределении обобщенной геодезической по поверхности F Следовательно, при указанных выше условиях будет существовать стремление к равномерному распределению точек начальной области по заданному слою неопределенности однозначных интегралов движения, т. е. в соответствии с принятым принципом будет существовать тенденция к равномерному распределению вероятностей в указанном смысле. Выясним, для каких систем эти условия будут справедливы.

Легко видеть, что исходное условие a может быть выражено в следующей интегральной форме a': существуют две таких константы C и D, при которых всегда будет справедливо неравенство

$$\frac{y(s)}{y(s_0')} \geqslant Ce^{D(s-s_0)} \qquad \text{при } s \geqslant s_0 \geqslant 0.$$

Этой формой мы воспользуемся в пункте об идеальном газе.

Как отметил Хопф [10], желательно заменить условия, относящиеся ко всей бесконечной геодезической, некоторым условием финитной природы. Некоторое достаточное условие такого рода может быть получено следующим путем. Рассмотрим в пространстве F конечное число несвязных областей B, заключающих все точки, для которых кривизна $R \geqslant 0$. Так как F ограничено, то будет существовать точная верхняя граница R в пространстве F. Обозначим ее M^2, а через $-\mu^2$ — точную верхнюю границу R в области $F - \Sigma B$ $(\mu \neq 0)$. Пусть l — верхняя граница для длины геодезического отрезка, находящегося внутри одной из областей B, а L — точная нижняя граница для длины геодезического отрезка, принадлежащего

$F - \Sigma B$. Обозначая тогда логарифмическую производную $\frac{y'}{y}$ через u и рассматривая для нее уравнение Риккати $u' = -R - u^2$, получим при соответствующих предположениях о ходе $y(s)$ следующий результат: из сравнения этого уравнения с уравнением $v' = \mu^2 - v^2$ в области $F - \Sigma B$ (длина геодезической в этой области больше или равна L) и с уравнением $v' = -\mu^2 - v^2$ в области B (длина геодезической в такой области меньше или равна l) получим (на основании штурмовских теорем о сравнении), что для непрерывного в точках перехода из области $F - \Sigma B$ в области B решения $v(s)$ справедливо неравенство $v \leqslant u$ во всех точках s, если оно справедливо в исходной точке. Беря последовательные точки $s_0, s_1, s_2 \ldots$ входа и выхода геодезической из областей B в область $F - \Sigma B$ и находя непрерывное в точках перехода решение $v(s)$, получим, что v будет непрерывной и ограниченной снизу некоторым положительным числом функцией, если характеризующие рассматриваемые области и рассматриваемые уравнения числа: l, L, M и μ будут удовлетворять неравенствам:

$$a'')\ Ml < \frac{\pi}{2} \text{ и } M \operatorname{tg} Ml < \mu \operatorname{tg} h\, \mu L.$$

В этом случае $u = \frac{y'}{y}$ будет равномерно ограниченной снизу некоторым положительным числом функцией.

Частным случаем приведенных достаточных условий являются условия a'' и $б'''$: a''' — кривизна R меняется в области с заданной отрицательной верхней границей и $б''' = б$.

§ 4. Условия размешивания в фазовом пространстве

Выясним вопрос о применимости к механическим системам условий a'' и $б'' = б$. Будем исходить для этого из приведенной выше конформно-эвклидовой формы метрики механической задачи:

$$ds^2 = A(\varepsilon_0 - u)\Sigma dx^{i2}$$

с фундаментальным тензором $g_{ik} = A(\varepsilon_0 - u)\delta_{ik}$ и из установленной Ричи [38] формулы для преобразования тензора кривизны при конформном преобразовании координат:

$$R'_{ik,\,lm} = e^{2\tau} R_{ik,\,lm} + e^{2\tau}[-g_{km}(\tau_{il} - \tau_i \tau_l) + g_{im}(\tau_{kl} - \tau_k \tau_l) -$$
$$- g_{kl}(\tau_{im} - \tau_i \tau_m) + g_{il}(\tau_k \tau_m - \tau_{km}) - (g_{km} g_{il} - g_{im} g_{kl}) \operatorname{grad}^2 \tau].$$

Будем обозначать с чертой вверху величины, относящиеся к системе, для которой

$$\overline{g}^{ik} = e^{-2\tau} g^{ik}.$$

τ — некоторая функция координат, и значки у τ обозначают соответствующие ковариантные производные, а $\mathrm{grad}^2 \tau = \tau_i \tau^i$.

Вводя функцию $\Phi = e^{-\tau}$ так, что $\overline{ds}^2 = \frac{1}{\Phi^2} ds^2$, получим:

$$R'_{ik,\,lm} = \frac{1}{\Phi^2} R_{ik,\,lm} + \frac{1}{\Phi^2} \left[g_{km} \frac{\Phi_{il}}{\Phi} - g_{im} \frac{\Phi_{kl}}{\Phi} - \right.$$

$$\left. - g_{kl} \frac{\Phi_{im}}{\Phi} + g_{il} \frac{\Phi_{km}}{\Phi} - (g_{km} g_{il} - g_{im} g_{kl}) \frac{\mathrm{grad}^2 \Phi}{\Phi^2} \right].$$

При этом используется, что $\tau_i = -e^{\tau} \Phi_i$;

$$\tau_{ik} - \tau_i \tau_k = \frac{\Phi_{ik}}{\Phi} \text{ и } \frac{\mathrm{grad}^2 \Phi}{\Phi^2} = \mathrm{grad}^2 \tau.$$

Оставляя пока последнюю формулу в стороне, будем исходить при получении выражения для скаляра кривизны R' из формулы Ричи. При этом мы получим:

$$\overline{R'}_{im} = \overline{g}^{kl} \overline{R'}_{ik,\,lm} = e^{-2\tau} g^{kl} \overline{R'}_{ik,\,lm} = g^{kl} R'_{ik,\,lm} - (\tau_{im} - \tau_i \tau_m) +$$

$$+ g_{im}(\Delta\tau - \mathrm{grad}^2\tau) + m(\tau_{im} - \tau_i \tau_m) - (\tau_{im} - \tau_i \tau_m) - (g_{im} - n g_{im}) \mathrm{grad}^2 \tau =$$

$$= g_{im} \Delta\tau + (n-2) g_{im} \mathrm{grad}^2 \tau + (n-2)(\tau_{im} - \tau_i \tau_m) + R_{im},$$

где $$\Delta\tau = g^{kl} \tau_{kl};$$

откуда

$$\overline{R'} = \overline{g}^{im} \overline{R'}_{im} = e^{-2\tau} g^{im} \overline{R'}_{im} = e^{-2\tau} \{ n \Delta\tau + n(n-2) \mathrm{grad}^2 \tau +$$

$$+ (n-2) \Delta\tau - (n-2) \mathrm{grad}^2 \tau \} + e^{-2\tau} R' =$$

$$= e^{-2\tau} \{ (2n-2) \Delta\tau + (n-1)(n-2) \mathrm{grad}^2 \tau \} + e^{-2\tau} R' =$$

$$= (n-1) e^{-2\tau} \left\{ -\frac{2\Delta\Phi}{\Phi} + n \frac{\mathrm{grad}^2 \Phi}{\Phi^2} \right\} + e^{-2\tau} R'.$$

Здесь $e^{-\tau} = \Phi$, а R' для эвклидова пространства равно нулю. Тогда

$$\overline{R'} = (n-1)\,\Phi^2\left(-\frac{2\Delta\Phi}{\Phi} + n\,\frac{\operatorname{grad}^2\Phi}{\Phi^2}\right).$$

Чтобы выяснить связь этого выражения для скаляра кривизны R' с кривизной R, заметим, что в пространстве постоянной (т. е. одинаковой для всех направлений в каждой данной точке) кривизны тензор кривизны $R'_{ik,\,lm}$ в каждой данной точке связан с кривизной R следующим образом:

$$R'_{ik,\,lm} = R\,(g_{il}\,g_{km} - g_{im}\,g_{kl}),$$

откуда

$$R' = -n\,(n-1)\,R.$$

Эта связь дает возможность сразу установить и полученное раньше выражение для скаляра кривизны R'. Действительно, тензор кривизны $R'_{ik,\,lm}$, а значит и скаляр кривизны, содержат вторые производные от Φ линейно, а первые квадратично, тензор $R'_{ik,\,lm}$ обратно пропорционален Φ^2, а следовательно, скаляр R' прямо пропорционален Φ^2 $\left(\text{так как } \overline{ds^2} = \frac{1}{\Phi^2}\,ds^2\right)$, и, наконец, скаляр R' не должен изменяться от поворота осей в эвклидовом пространстве. Следовательно, R' должен иметь вид:

$$R' = \Phi^2\left(a\,\frac{\Delta\Phi}{\Phi} + b\,\frac{\operatorname{grad}^2\Phi}{\Phi^2}\right),$$

где Δ и grad составлены для эвклидова пространства.

Так как, с другой стороны, в частном случае пространства постоянной кривизны R вида

$$\Phi = 1 + \frac{R}{4}\,\Sigma\,x^{i^2},$$

должно, как известно, быть

$$R' = -n\,(n-1)\,R,$$

то из последнего равенства, подставляя

$$\Delta\Phi = \frac{n}{2}\,R \quad \text{и} \quad \operatorname{grad}^2\Phi = \frac{R^2}{4}\,\Sigma x^{i^2} = R\,(\Phi - 1),$$

получим:

$$a = -2(n-1) \text{ и } b = n(n-1 .$$

Следовательно, для R' попрежнему получаем:

$$R' = (n-1)\{-2\Phi\Delta\Phi + n \operatorname{grad}^2 \Phi\},$$

а для кривизны R:

$$R = \frac{2\Phi\Delta\Phi}{n} - \operatorname{grad}^2 \Phi = \frac{\Phi^2}{n}\left(2\frac{\Delta\Phi}{\Phi} - n\frac{\operatorname{grad}^2 \Phi}{\Phi^2}\right).$$

Заменяя переменную

$$\Phi = f(v),$$

последнее выражение можно привести (что существенно для некоторых приложений) к одночленному выражению:

$$\frac{n}{2\Phi}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)^2 = \frac{nf'^2}{2f}\left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2;$$

$$-\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} = -\frac{f'}{f}\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{f''}{f}\left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2;$$

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} - \frac{n}{2}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)^2\frac{1}{\Phi} = f'\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \left\{f'' - \frac{n}{2}\frac{f'^2}{f}\right\}\left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2.$$

Находим v из условия обращения второго члена в нуль:

$$\frac{f''}{f'} = \frac{n}{2}\frac{f'}{f};\ \ln f' = \frac{n}{2}\ln f;\ f' = Cf^{\frac{n}{2}}.$$

Если $f = C_1 v^\alpha$, то $\alpha = -\frac{2}{n-2}$ и $C_1 = 1$. Следовательно, $\Phi^{n-2} = v^{-2}$, и выражение в круглой скобке последней формулы для R сведется к виду:

$$-\frac{4\Delta v}{v(n-2)}, \text{ а } R \text{ будет равен } -\frac{4}{n(n-2)}v^{-\frac{n+2}{n-2}}\Delta v.$$

Произведем еще другую замену.

Положим:

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{w}}\,; \ \operatorname{grad}\ \Phi = -\frac{1}{2}\ w\ \frac{3}{2}\operatorname{grad} w,$$

тогда

$$U\Delta U = -\frac{1}{2w^2}\ \Delta w + \frac{3}{4w^3}\operatorname{grad}^2 w,$$

и, следовательно, получаем окончательную основную формулу:

$$R = -\frac{1}{nw^2}\ \Delta w - \left(\frac{1}{4} - \frac{3}{2n}\right)\frac{1}{w^3}\operatorname{grad}^2 w.$$

По поводу этой формулы сделаем сначала два замечания. Во-первых, из вида ее можно заключить, что выполнение условий размешивания a'' и $б''$ для данного типа систем [т. е. для данного типа потенциального поля u, так как $w = A(\varepsilon_0 - u)$] не зависит, вообще говоря, от числа степеней свободы; второй член при больших n всегда отрицателен, а первый, знак которого не определен, того же порядка относительно n. Если считать, что между частицами существует попарное взаимодействие, то этот порядок n^{-3}. Зависимость от n будет лишь при достаточно малых n. Это соответствует, повидимому, в задаче многих тел аномалиям еще не вполне выясненного характера — аномалиям, соответствующим небольшому числу взаимодействующих тел.

Во-вторых, отметим то основное для нашей постановки задачи обстоятельство, что она требует размешивание не сколь угодно малых областей, а областей ограниченного снизу объема (и заданной формы). Кроме того, для физического существа задачи существенно не размешивание на некоторых заданных выделенных поверхностях в рассматриваемом пространстве, а размешивание объемное, относящееся к областям того же числа измерений. Поэтому условия такого размешивания носят не поверхностный (относящийся к заданным поверхностям) характер, сказывающийся лишь на достаточно малом прилежащем к поверхности объеме, а существенно объемный, определяемый скаляром кривизны.

По этому поводу можно сделать еще лишь следующее краткое дополнение. Пользуясь теоремой о том, что кривизна двумерной геодезической в данной точке поверхности определяется кривизной вмещающего пространства в этой точке в направлении, перпендикулярном к поверхности, и пользуясь известным для конформно-эвклидовых пространств выражением для тензора кривизны,

$$R_{ik,\,lm} = g_{il}s_{km} - g_{kl}s_{im} - g_{im}s_{kl} + g_{km}s_{il},$$

где s_{ik} — симметричный тензор вида

$$s_{ik} = \nabla_{ik}\tau - \nabla_i\tau\nabla_k\tau + \frac{1}{2}\,g_{ik}g^{rs}\nabla_2\tau\nabla_s\tau,$$

можно показать, что кривизна K_{ik} двумерной геодезической поверхности, определяемой данными двумя координатными осями i и k, будет иметь знак, совпадающий со знаком объемной кривизны, т. е. кривизны вмещающего пространства. Действительно, вводя в данной точке римановы координаты, т. е. координаты, определяемые направляющим вектором и длиной, отсчитываемой вдоль соответствующей геодезической, можно, как известно, показать, что интересующая нас величина K_{ik} равна $\dfrac{R_{ik,\,ik}}{g_{ii}g_{kk} - g_{ik}g_{ki}}$. При этом используется основное геометрическое значение понятия кривизны пространства в направлении данной двумерной плоскости, и то обстоятельство, что римановы координаты в то же время будут геодезическими (т. е. для них дифференциальные параметры Γ^l_{ik} будут равны нулю).

Таким образом, для конформно-эвклидового пространства

$$K_{ik} = \frac{R_{ik,\,ik}}{g_{ii}g_{kk} - g_{ik}g_{ik}} = \frac{-g_{ii}s_{kk} - g_{kk}s_{ii}}{g_{ii}g_{kk}} =$$

$$= -e^{-2\tau}\left[\frac{\partial^2\tau}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2\tau}{\partial x_k^2} - \left(\frac{\partial\tau}{\partial x_i}\right)^2 - \left(\frac{\partial\tau}{\partial x_k}\right)^2 + \mathrm{grad}^2\tau\right] =$$

$$= -\frac{1}{w}\left[\frac{1}{2w}\left(\frac{\partial^2 w}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial x_k^2}\right) - \frac{3}{4}\,\frac{1}{w^2}\left\{\left(\frac{\partial w}{\partial x_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial x_k}\right)^2\right\} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{4w^2}\,\mathrm{grad}^2 w,\right.$$

так как

$$s_{ii} = \frac{\partial^2\tau}{\partial x_i^2} - \left(\frac{\partial\tau}{\partial x_i}\right) + \frac{1}{2}\sum\left(\frac{\partial\tau}{\partial x_i}\right)^2 \text{ и } g_{ik} = w\delta_{ik} \quad (w = e^{2\tau}),$$

а $g^{ik} = \dfrac{1}{w}\,\delta^{ik}$. При этом используются соотношения

$$\tau = \frac{1}{2}\ln w;\quad \frac{\partial\tau}{\partial x_i} = \frac{1}{2w}\,\frac{\partial w}{\partial x_i}$$

$$\frac{\partial^2\tau}{\partial x_i^2} = -\frac{1}{2w^2}\left(\frac{\partial w}{\partial x_i}\right)^2 + \frac{1}{2w}\,\frac{\partial^2 w}{\partial x_i^2}\,.$$

Так как для подавляющего большинства состояний любые пары частиц равноправны, то в подавляющем большинстве случаев K_{ik} одинаковы для различных пар. Складывая почленно $\frac{n}{2}$ соответствующих равенств и умножая на $\frac{2}{n}$, получим, сравнивая с полученным выше основным выражением для R, что знак K_{ik} в этих случаях будет определяться знаком R; именно: эта величина K_{ik} определяет в данной точке быстроту расходимости геодезических, принадлежащих данной геодезической поверхности. Геодезическая же поверхность может быть построена так, что она будет проходить через любую пару геодезических. Следует лишь иметь в виду, что кривизна пространства F, взятая в данной точке, не будет, вообще говоря, одинаковой в различных двумерных направлениях, так как в противном случае по теореме Шура кривизна была бы постоянной и для различных точек. В силу той же причины — непостоянства кривизны — поверхность геодезическая в одной точке F (в противоположность пространству Лобачевского) не будет, вообще говоря, такой в других точках.

Установим применимость выведенного условия к системам, являющимся объектами статистической механики. Будем исходить из предположения (по сути метода, вообще говоря, не обязательного), что потенциальная энергия всей системы в целом может быть представлена как сумма потенциальных энергий попарного взаимодействия частиц, образующих систему. Тогда для основного интересующего нас выражения кривизны можно получить следующие вспомогательные соотношения:

$$u = \sum_{ik} u(r_{ik}); \quad \frac{\partial u}{\partial x_i} = \sum_k (x_i - x_k) \frac{u'(r_{ik})}{r_{ik}};$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} = \sum_k \frac{u'(r_{ik})}{r_{ik}} + (x_i - x_k) \frac{u''(r_{ik})\,(x_i - x_k) - u'(r_{ik}) \frac{x_i - x_k}{r_{ik}}}{r_{ik}^2} =$$

$$= \sum_k \frac{u'(r_{ik})}{r_{ik}} + \frac{(x_i - x_k)^2}{r_{ik}^2} u''(r_{ik}) - \frac{(x_i - x_k)^2}{r_{ik}^2} \frac{u'(r_{ik})}{r_{ik}}$$

и

$$\Delta u = \sum_{ik} \frac{3u'(r_{ik})}{r_{ik}} + u''(r_{ik}) - \frac{u'(r_{ik})}{r_{ik}} =$$

$$= \sum_{ik} \frac{2u'(r_{ik})}{r_{ik}} + u''(r_{ik}).$$

Так как второй член в формуле для кривизны

$$R = -\frac{1}{nw^2}\Delta w - \left(\frac{1}{4} - \frac{3}{2n}\right)\frac{1}{w^3}\operatorname{grad}^2 w$$

при больших n всегда существенно отрицателен, то из полученного выражения для Δu сразу можно заключить для случая кулонова поля о постоянном, во всех точках пространства, выполнения условия отрицательности кривизны.

Действительно, для кулонова поля при любых знаках и при любой величине взаимодействующих зарядов Δu тождественно равно нулю. Следовательно, всегда $R \leqslant 0$. Так как, по теореме Ирншоу, при кулоновском взаимодействии состояния равновесия не могут быть осуществлены (за исключением случаев, не представляющих интереса), и так как всякая непрерывная функция достигает своей точкой верхней границы, то можно даже утверждать, что, вообще говоря, соблюдается не только условие a'', но и условие a''', т. е. кривизна будет изменяться в области с отрицательной верхней границей.

Аналогичное утверждение будет справедливо для всех практически интересных случаев сил притяжения. В этих случаях оказывается, что многомерный оператор Лапласа отрицателен. Например, для случая степенного закона парного взаимодействия:

$$u(r_{ik}) = Cr_{ik}^{-\alpha}$$

по предыдущей формуле

$$\Delta u_{ik} = \frac{\alpha(\alpha - 1)}{r_{ik}^2}\, u_{ik}.$$

Следовательно, при $\alpha > 0$ отношение $\frac{\Delta u}{u} > 0$ и, так как при силах притяжения $u < 0$, то

$$\Delta u < 0, \text{ а } \Delta w = \Delta A(\varepsilon_0 - u) > 0$$

и первый член в выражении для кривизны, так же как и второй, всегда будет отрицательным.

Тот же результат будет получаться при показательных нах взаимодействия.

Например, если $u\ (r_{ik}) = Ce^{\frac{\alpha}{r_{ik}}}$, то

$$u'\ (r_{ik}) = -\frac{C\alpha}{r_{ik}^2}\, e^{\frac{\alpha}{r_{ik}}};$$

$$u''\ (r_{ik}) = C\,\frac{2\alpha}{r_{ik}^3}\, e^{\frac{\alpha}{r_{ik}}} + \frac{C\alpha^2}{r_{ik}^4}\, e^{\frac{\alpha}{r_{ik}}}.$$

Отсюда

$$\Delta u = \sum_{ik} C\,\frac{\alpha^2}{r_{ik}^4}\, e^{\frac{\alpha}{r_{ik}}},$$

т. е. для сил притяжения при $C < 0$ величина $\Delta u < 0$.

Также при $u\,(r_{ik}) = Ce^{-\alpha r_{ik}}$

$$\Delta u = \sum_{ik} C\alpha^2 e^{-\alpha r_{ik}} - \frac{2C}{r_{ik}}\,\alpha e^{-\alpha r_{ik}} = \sum_{ik} \alpha\left(\alpha - \frac{2}{r_{ik}}\right) u\,(r_{ik}) < 0,$$

так как в подавляющем большинстве состояний $r_{ik} \gg \frac{1}{\alpha}$.

При силах отталкивания знак Δu, вообще говоря, положительный, и знак R будет неопределенным. Однако это оказывается практически несущественным, так как в реальных объектах статистической механики силы отталкивания существенны лишь на малых расстояниях, там, где второй член в формуле для кривизны будет значительно больше первого. Там же, где первый член может быть больше, или там, где он будет того же порядка, преобладают силы притяжения, при которых оба члена будут иметь один и тот же отрицательный знак.

Действительно, для часто принимаемых типов сил молекулярного взаимодействия вида $u = -\frac{A}{r^m} + \frac{B}{r^n}$ (при условии $n > m$ и n и m настолько больших, чтобы можно было говорить о столкновениях) получим для величины, пропорциональной кривизне, в применении к случаю столкновения одной пары молекул, приближенную формулу:

$$C\,R \approx \frac{Am^2}{r^{m+2}} + \frac{Bn^2}{r^{n+2}} - \frac{N}{\varepsilon_0 + \frac{A}{r^m} + \frac{B}{r^n}}\left[\frac{A^2m^2}{r^{2m+2}} + \frac{B^2n^2}{r^{2n+2}} - \frac{2AB_{mn}}{r^{m+n+2}}\right],$$

где C — некоторый положительный коэффициент пропорциональности. При больших r существенным будет первое слагаемое, а при малых — третье, так что в обоих случаях знак кривизны будет отрицательным. Тот же результат следует, конечно, и из рассмотрения потенциала взаимодействия в форме Морзе.

Приведем еще доказательство того, что встречающиеся в задачах статистической физики области положительной кривизны будут удовлетворять приведенному выше условию a'': $Ml < \frac{\pi}{2}$, где M^2 — точная верхняя граница кривизны во всем пространстве, а l — точная верхняя граница длины геодезической дуги в области положительной кривизны. Выполнение следующего условия, связывающего величины кривизны с длинами геодезических отрезков, будет при этом очевидным следствием подавляюще-большей величины областей отрицательной кривизны.

Так как рассматривается длина геодезического отрезка l в конфигурационном пространстве всей системы, то, как видно из общего выражения для метрики пространства при заданной конфигурации частей, распределение энергий между частями несущественно для величины l. Существенно время пребывания системы в области с положительной кривизной, т. е. в области, где вторые производные велики по сравнению с отношением квадрата первых производных к величине разности $\varepsilon_0 - u$. Легко видеть, что при столкновениях, испытываемых частицей и характеризуемых отбрасыванием частицы в резко возрастающих полях взаимодействия, время будет наибольшим для медленно движущихся частиц. Оно будет тем больше, чем медленнее движется частица. Однако это время не возрастает безгранично: для достаточно медленных частиц всегда можно ограничиться квадратичными членами в разложении поля в степенной ряд. Но тогда время движения не будет зависеть от скорости и будет определяться периодом соответствующего гармонического осциллятора, т. е. будет равно $\tau = \sqrt{\frac{m}{-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}}}$.

При этом длина геодезического отрезка будет равна

$$l = \frac{\sqrt{(\varepsilon_0 - u)\,\Sigma a_{ik}\dot{q}_i\,\dot{q}_k}\,\sqrt{m}}{\sqrt{-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}}},$$

где m — масса одной частицы, а u — потенциальное поле в n-мерном пространстве.

Беря для необходимой оценки кривизны заведомо большие величины, а именно пренебрегая всеми отрицательными членами ($-\operatorname{grad}^2 u$) и заменяя каждую вторую производную значением наибольшей из них, получим:

$$R \leqslant \left| \frac{1}{w^2} \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right| \geqslant M^2$$

и так как $w = m(\varepsilon_0 - u)$, то

$$M \leqslant \sqrt{-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} m \frac{1}{m(\varepsilon_0 - u)}} = \sqrt{-\frac{1}{m} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{1}{\varepsilon_0 - u}},$$

откуда

$$Ml \leqslant \frac{\sqrt{(\varepsilon_0 - u)\sum a_{ik}\dot{q}_i \dot{q}_k}}{\varepsilon_0 - u} = 1 < \frac{\pi}{2}.$$

Приведенное неравенство может быть получено и в несколько иной форме и будет, конечно, справедливым и в случае относительного движения двух частиц с достаточно малой относительной скоростью.

Необходимо еще показать выполнение второго условия размешивания — условия *б*: производная $\frac{dR}{ds}$ ограничена сверху. Так как кривизна R не может иметь разрывов непрерывности, то $\frac{dR}{ds}$ может стремиться к бесконечности лишь вместе с R, т. е. либо при $\varepsilon_0 - u$, стремящемся к нулю, либо при неограниченном росте производных.

В случае сил притяжения, как уже говорилось, при всех встречающихся практически типах сил взаимодействия, многомерный оператор Лапласа, примененный к потенциальной энергии u, отрицателен. Поэтому неограниченный рост производных (имеющий место, если не принимать во внимание появляющиеся при достаточно большом сближении силы отталкивания, т. е. если не учитывать конечность радиуса частиц) не может привести в этих случаях к нарушению условия *б* (величина $\varepsilon_0 - u$ при этом, конечно, не может стремиться к нулю, так как при притяжении $u < 0$).

При силах отталкивания $u > 0$ и возможны последовательности таких состояний, что $\varepsilon_0 - u \to 0$. Однако при движении частиц, связанном с таким стремлением к пределу, взаимные расстояния частиц будут стремиться к пределу, отличному от нуля, и во всяком случае первые и вторые производные от потенциальной энергии взаимодействия будут стремиться к некоторым конечным пределам. Но тогда можно утверждать, что знаки R и $\frac{dR}{ds}$ будут отрицательными, и как R так и $\frac{dR}{ds}$ будут стремиться не к $+\infty$, а к $-\infty$. Действительно, в приведенном выше основном выражении для кривизны второй (всегда отрицательный) член — третьего порядка относительно $\varepsilon_0 - u$, а первый член — второго порядка. Поэтому и в этих случаях условие *б* не будет нарушено.

До сих пор мы имели в виду лишь поля взаимодействия частей системы, но, как легко видеть, наши выводы относятся в той же мере и к полям, происходящим от стенок, ограничивающих систему. В случаях, когда последние существуют (а лишь они, вообще говоря, гарантируют финитность системы), поля взаимодействия с ними должны быть включены в выражение для общей потенциальной энергии.

Отметим еще следующее: условие *а″*, выполнимость которого при практически важных типах сил взаимодействия мы показывали, сводилось к требованию, чтобы либо везде кривизна была отрицательной, либо чтобы области положительной кривизны были достаточно малы. Однако пример идеального газа подсказывает возможность некоторого обобщения. Для результирующей величины расходимости геодезических линий существенна средняя расходимость. В областях положительной кривизны нормальное расстояние геодезических — величина, колеблющаяся по некоторому закону периодичности, а в областях отрицательной кривизны — величина, возрастающая по экспоненциальному закону. Поэтому при заданных величинах кривизны и при условии, что области отрицательной кривизны следуют при движении по траектории достаточно систематически (т. е. с частотой, не убывающей слишком быстро), результирующая расходимость будет такой же, как если бы кривизна была везде отрицательной, но имела соответственно меньшую величину. Следовательно, можно думать, что последнее условие, выполняющееся и при чистых силах отталкивания, является (вместе с условием *б*) достаточным (и, конечно, необходимым) условием размешивания. В то же время, как видно из порядковой оценки величины производной, при столкновении некоторой пары частиц — область, для которой $u > kT$, будет областью отрицательной кривизны; с другой стороны, как показывает сам факт применимости статистики (обращение к которой не образует здесь, конечно, порочного круга), для подавляющего большинства начальных состояний столкновения частиц распределены вдоль фазовых траекторий совершенно регулярным образом.

Кроме того, из сказанного следует, что, как уже неоднократно отмечалось, достаточное для применимости статистики размешивание будет осуществляться уже при достаточно больших величинах начальных областей. Эти области должны быть таковы, чтобы не существенны были те начальные состояния системы, которые реализуют несогласное с утверждениями статистики (в частности, с требованием известной регулярности — известного постоянства частоты столкновений) поведение системы.

Сделаем еще два кратких замечания.

А. Приведенное выше доказательство установления равномерного распределения вероятностей, т. е. доказательство размешивания, опиралось существенным образом на возможность сведения задачи решения уравнений движения чистой механики к задаче нахождения геодезических линий соответствующего риманова пространства. Иначе говоря, это доказательство опиралось на потенциальный характер полей — на независимость действующих между частями системы сил от скоростей. С этим связано то обстоятельство, что в случаях, когда силы уже не могут рассматриваться как чисто потенциальные, например, при вращении системы или при наличии магнитного поля, будут существовать отклонения от общих утверждений статистики, относящихся к стационарности и независимости от начального состояния функций распределения в фазовом пространстве. Такие отклонения будут существовать и при наличии полупроницаемых перегородок: пользуясь представлениями, подобными тем, которые развивал Орнштейн [1] при рассмотрении реальных газов, можно наличие осмотического давления рассматривать как проявление непотенциального характера сил. Эти трудности отмечались в другом месте работы и связаны, в частности, с парадоксальным результатом классической статистической механики — нулевой диамагнитной восприимчивостью.

В. Приведенные результаты выясняют причины справедливости сформулированной Шредингером [39] в его работе «Об обращении законов природы» (1931) теоремы об обратимости макроскопических уравнений. В теореме Шредингера утверждается, что, подобно тому, как рассасывание флюктуаций — температуры или плотности — с подавляющей вероятностью происходит в направлении, обратном направлению градиентов, возникновение флюктуаций с подавляющей вероятностью происходит в точно противоположном направлении — направлении самих градиентов. Сформулировав эту теорему, Шредингер пишет, что она настолько противоречит некоторым нашим представлениям о вероятности макроскопических процессов, что несмотря на свою большую правдоподобность не может казаться бесспорно справедливой. Из приведенных результатов следует прямое доказательство этой теоремы, являющейся, таким образом, необходимым следствием фундаментальных принципов статистической механики.

§ 5. Пространство начальных состояний. Равномерность размешивания

Возьмем в качестве начальных и конечных областей прямоугольные параллелепипеды в $2n$-мерном фазовом пространстве объема A^n с ребрами, параллельными осям координат. Докажем равномерность процесса размешивания относительно выбора таких начальных областей, являющихся результатами исходных опытов и относительно выбора конечных областей, являющихся результатами опытов, констатирующих установление равновесного распределения вероятностей. Иными словами, докажем, что мера части начального параллелепипеда, перешедшей за время t в некоторый конечный параллелепипед, отличается от меры, соответствующей равномерному распределению, на сколь угодно малую величину ε, коль скоро время t больше соответствующим образом выбранного времени $T(\varepsilon)$, каков бы ни был и начальный и конечный параллелепипеды.

Доказательство опирается на самый факт существования размешивания (условиям которого был посвящен предыдущий параграф), т. е., во-первых, на то, что для заданной пары областей и, в частности, прямоугольных параллелепипедов объема A^n, для любого ε можно найти соответствующее $T(\varepsilon)$. Оно опирается, во-вторых, на упомянутую в § 3 финитность пространства, т. е. на принадлежность рассматриваемого пространства к типу римановых пространств, обладающих тем свойством, что угловая мера геодезических полулучей, уходящих на бесконечность, равна нулю почти везде в F. Это свойство вытекает из конечности объема, являющейся, естественно, необходимым условием возможности установления равномерного распределения вероятностей.

Рассмотрим пространство параллелепипеда заданного типа, т. е. пространство, точками которого являются такие параллелепипеды. Это пространство, если определить расстояние двух точек A и B через $\rho(A, B) = 1 - m(A, B)$ [причем принимается как условие $m(A) = m(B) = 1$], будет метрическим. При этом будут выполнены три основные аксиомы метрики:

1) $\rho(A, B) \geqslant 0$, причем $\rho(A, B) = 0$ в том и только в том случае, если A совпадает с $B: A = B$;

2) $\rho(A, B) = \rho(B, A)$,

3) $\rho(A, B) + \rho(B, C) \geqslant \rho(A, C)$.

Действительно

$$[1 - m(A, B)] + [1 - m(B, C)] \geqslant 1 - m(A, C)$$

$$1 + m(AC) \geqslant m(A \cdot B) + m(B \cdot C) = m(B[A + C]) + m(B[A \cdot C]),$$

что очевидно, так как $B[A + C] = B$ и $B[A \cdot C] = AC$ и мера аддитивная неотрицательная функция множеств.

Рассматриваемое пространство будет полным, т. е. всякая фундаментальная последовательность [последовательность, удовлетворяющая условию $\rho(A_n, A_{n+p}) \to 0$ при $N \to \infty$ для всех $p > 0$ и $n > N$] сходится. Действительно, из выполнения признака Коши для точек нашего пространства вытекает выполнение его для каждой из 2^{2n} вершин параллелепипеда, расстояние между которыми определяется как обычное расстояние точек $2n$-мерного эвклидового пространства. В противном случае одна из вершин параллелепипеда могла бы быть для всех параллелепипедов последовательности заключена внутрь сферы некоторого радиуса ε такого, что среди сколь угодно далеких членов последовательности находились бы члены с непересекающимися сферами. Но это противоречило бы выполнению признака Коши для исходной последовательности, так как построенные сферы содержат части исходных параллелепипедов конечной, определяемой величиной ε-меры. Однако, в силу полноты эвклидова пространства, из выполнения признака Коши и для каждой последовательности соответственных вершин следует сходимость каждой последовательности вершин к некоторой своей вершине. Параллелепипед B, определяемый этими предельными вершинами, будет, очевидно, предельным для последовательности A_n т. е., очевидно,

$$\rho(A_n, B) = 1 - m(A_n, B) \to 0 \text{ при } n \to \infty.$$

Необходимость признака Коши является прямым следствием выполнения аксиомы треугольника. Действительно:

$$\rho(A_n, A_{n+p}) \leqslant \rho(A_n, B) + \rho(A_{n+p}, B) \to 0 \text{ при } n \to \infty.$$

Рассматриваемое пространство будет, очевидно, обладать счетной всюду плотной сетью. Такой сетью могут быть, например, параллелепипеды заданного объема, равного единице, с ребрами, параллельными осям координат, и с рациональными координатами вершин.

В силу дополнительного условия ограниченности всей рассматриваемой области фазового пространства, т. е. ограниченности эргодического слоя, наше пространство будет финитным и будет обладать конечной ε-сетью (т. е. конечным множеством точек $M_1, M_2, \ldots, M_{p}$, таким, что для каждой точки A нашего пространства можно найти такое M_i, что $\rho(M_i, A) < \varepsilon$ для любого ε). Для построения ε-сети достаточно, очевидно, взять множество параллелепипедов с достаточно частой сетью одной из вершин и с достаточно малыми разностями длин ребер.

Благодаря существованию конечной ε-сети и свойству полноты наше пространство компактно (т. е. из всякой бесконечной последовательности его точек можно выделить сходящуюся подпоследовательность), и даже компактно в себе, т. е. включает свои предельные точки. Действительно, как известно, первое из упомянутых свойств является необходимым, а совокупность упомянутых двух свойств является достаточным условием компактности.

Необходимость первого условия следует из возможности, в случае нарушения этого условия, беспредельного продолжения процесса построения взаимно непересекающихся сфер радиуса $\frac{\varepsilon}{2}$. Такой беспредельный процесс приведет к построению последовательности центров сфер, противоречащей предположению о наличии компактности.

Для доказательства достаточности двух названных условий из любой заданной последовательности $R(A_1, A_2, \ldots, A_n, \ldots)$ строятся следующим образом последовательности $R_1, R_2, \ldots$; R_1 определено, как то множество точек R, которое содержится в одной из включающих бесконечное множество точек R сфер конечной ε_1-сети. Из R_1 строим подпоследовательность R_2 $R_2 \subset R_1 \subset R$, определенную как то множество точек R_1, которое содержится в одной из включающих бесконечное множество точек R_1 сфер конечной ε_2-сети и т. д.; причем последовательность ε_n сходится к нулю. По построению для всяких A и B, принадлежащих R_n, $\rho(A, B) \leqslant 2\varepsilon_n$. Построенная диагональным методом, так, чтобы $B_n \in R_n$, последовательность точек $B_1, B_2, \ldots, B_n, \ldots$ образует теперь требуемую компактную сходящуюся подпоследовательность последовательности R. Действительно: $B_{n+p} \in R_{n+p} \subset R_n$, следовательно, $\rho(B_{n+p}, B_n) \leqslant 2\varepsilon_n$. Вследствие полноты пространства последовательность B_n будет сходиться к пределу.

Таким образом, в силу двух указанных свойств рассматриваемое пространство параллелепипедов будет компактным. Иначе говоря, его компактность будет следствием компактности эвклидового пространства вершин параллелепипедов.

Доказанная компактность является при наличии сходимости для каждой данной пары параллелепипедов достаточным условием сформулированной в начале этого пункта равномерности сходимости. Действительно, пусть сходимость не будет равномерной. Тогда существует бесконечная последовательность исходных параллелепипедов $A_1, A_2, \ldots, A_n, \ldots$, соответственно сопоставляемых с членами бесконечной последовательности конечных параллелепипедов $B_1, B_2, \ldots, B_n, \ldots$, обладающая следующим свойством: найдется такое достаточно малое ε и такая неограниченно-возрастающая последовательность моментов времени T_n, что при $t = T_n$ мера части A_n, перешедшей в B_n, отличается от меры, соответствующей равномерному распределению точек A_n по всем параллелепипедам, больше чем на ε. В силу компактности множества параллелепипедов последовательности A_n и B_n будут иметь точки сгущения A и B соответственно. Благодаря сходимости для каждой данной пары параллелепипедов, начиная с некоторого достаточно большого T, мера части A, переходящая в B, начинает отличаться от меры, соответствующей равномерному распределению точек A по множеству параллелепипедов, меньше чем на $\frac{\varepsilon}{2}$. Кроме того, при достаточно больших n мера различной части множеств A_n и A и B_n и B — соответственно — будет сколь угодно малой. По этим двум причинам наше предложение будет противоречивым. Это противоречие доказывает равномерность.

Примером неравномерной сходимости при отсутствии компактности может служить случай бесконечных линейных размеров системы (см. относящийся к идеальному газу параграф), т. е. случай систем, допускающих сколь угодно малые Δp.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ehrenfest P. u. T. Encykl. d. math. Wissensch. IV, 4 (1914).
2. Poincaré H. «Leçons sur la Thermodynamique». Paris (1908).
3. Poincaré H. «Reflexions sur la theorie cinetique des gaz». J. d. Phys. (4) **5**, 369 (1906).
4. Zermelo. Phys. Zeitschr., **1**, 317 (1900).
5. Planck M. Sitz. Ber. d. Preuss. Akad. d. Wiss. Ph.-Math. 653 (1916).
6. Planck M. Ann. d. Phys. **66**, 366 (1921).
7. Гиббс Дж. В. «Основные принципы статистической механики». ГТТИ (1946).
8. Borel E. a) «Mecanique statistique classique» (1925). b) «Valeur pratique et philosophique des probabilités» (1939).
9. Fowler. «Statistical Mechanics». Cambridge (1936).
10. Hopf. «Ergodentheorie». Berlin (1937). Усп. мат. наук, IV, вып. 1 (29), 113 (1949).
11. Биркгоф. «Динамические системы». ГТТИ (1941).
12. Lorentz H. A. «Über den II Hauptsatz d. Thermodyn.». Ges. Abh., **1**, 202.
13. Mises R. «Warscheinlichkeitsrechnung». Leipzig u. Wien (1931).
14. Марков А. А. «Исчисление вероятностей». СПб. (1913).
15. Yeans Y. H. a) «Dynamical theory of gases». Cambridge (1904). b) «Kinetic theory of gases». Phil. mag. (6) **5**, 597 (1903).
16. Пуанкаре А. «Ценность науки». Москва (1906).
17. Пуанкаре А. «Наука и гипотеза». СПб. (1906).
18. Hadamard. Atti del Congr. del Mathem. Bologna. **5**, 133—139 (1928).
19. Ehrenfest P. u. T. a) Phys. Ztschr. **8**, 311 (1907). b) Ann. d. Phys. **65**, 609 (1921).
20. Бернштейн С. Н. «Теория вероятностей». ГТТИ (1946).
21. Neumann J. Ztzchr. f. Phys. **57**, H. 1—2 (1929).
22. Pauli W., Fierz M. Ztschr. f. Phys. **106**, H. 9—10 (1937).
23. Хинчин А. Я. «Математические основания статистической механики». ГТТИ (1943).
24. Mises R. Phys. Ztschr. **9**, 225—256 (1920).

25. Смолуховский М. Сборник «Броуновское движение». ОНТИ (1936).
26. Понтрягин, Андронов, Витт. Phys. Ztschr. d. Sow. Un. **6**, H. 1—2 (1934).
27. Бор Н. УФН, **16**, 436 (1936).
28. Паули В. «Общие принципы волновой механики». ГТТИ (1947).
29. Neumann J. «Mathem. Grundlagen d. Quantenmechanik». Dover publications (1943).
30. Schroedinger E. Sitz. Ber. d. Preuss. Akad. d. Wiss. Ph.-Math. 435 (1925).
31. Ляпунов А. М. «Общая задача об устойчивости движения». ОНТИ (1935).
32. Pauli W. «Sommerfeld's Festschrift» (1928).
33. Rosenthal. Ann. d. Phys. **42**, 796 (1913).
34. Planscherel. Ann. d. Phys. **42**, 1061 (1913).
35. Rosenthal. Ann. d. Phys. **43**, 894 (1914).
36. Neumann J. Proc. of the National Acad. of Sciences of the USA, **18**, 70, 263 (1932).
37. Hopf E. Proc. of the National Acad. of Sciences of the USA, **18**, 93, 204, 333 (1932).
38. Каган В. Ф. «Основы теории поверхностей». ГТТИ (1948).
9. Schroedinger. Preuss. Akad. Wiss. Berlin, **9**, 144 (1931).