ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

Том XXIII, № 8 РАДИОФИЗИКА 1980

УДК 538.56 : 519.25

ВЫЧИСЛЕНИЕ ТРЕХВРЕМЕННЫХ МОМЕНТОВ ТЕПЛОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ МЕТОДАМИ МАРКОВСКОЙ НЕЛИНЕЙНОЙ НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ

Р. Л. Стратонович, А. В. Толстопятенко

Получены формулы, позволяющие находить третий момент тепловых флуктуаций, если известен вид нелинейных феноменологических релаксационных уравнений. Флуктуационный процесс предполагается слабо негауссовым. Общие формулы, относящиеся к многокомпонентному случаю, конкретизированы для одного частного случая — LR-цепочки с нелинейным сопротивлением.

1. ВВЕДЕНИЕ

Как известно, марковская нелинейная флуктуационно-диссипационная термодинамика [1-3] позволяет частично восстанавливать коэффициенты кинетического уравнения

$$\dot{w}(B) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial B_{\alpha_1} \ldots \partial B_{\alpha_n}} [K_{\alpha_1 \ldots \alpha_n}(B) w(B)] \tag{1.1}$$

($K_{\alpha_1 \ldots \alpha_n}$ не зависят от времени) по виду феноменологических релаксационных уравнений

$$\dot{A}_\alpha = -\varphi_\alpha(A). \tag{1.2}$$

Здесь $A_\alpha = \langle B_\alpha \rangle$, $w(B)$ — плотность распределения вероятностей внутренних термодинамических параметров (например, потенциалов, токов, электромагнитных полей и т. п.). Так, в рамках трехиндексной (квадратичной) теории значения

$$\left[\frac{\partial K_{\alpha\beta}(B)}{\partial B_\gamma}\right]_{B=0} = K_{\alpha\beta,\gamma}, \qquad [K_{\alpha\beta\gamma}(B)]_{B=0} \equiv K_{\alpha\beta\gamma} \tag{1.3}$$

полностью определяются значениями $\partial K_\alpha(B)/(\partial B_\beta \partial B_\gamma)$ при $B=0$, т. е. значениями $\partial\varphi_\alpha(A)/(\partial A_\beta \partial A_\gamma)$ при $A=0$.

Функции, стоящие в правой части (1.2), задают масштаб нелинейности

$$\Delta A = \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial A_\beta}\left[\frac{\partial^2 \varphi_\alpha}{\partial A_\beta \partial A_\gamma}\right]^{-1}.$$

Среднеквадратичное отклонение $\sigma = \langle (B - \langle B \rangle)^2 \rangle^{1/2}$, которое, как известно, пропорционально $(kT)^{1/2}$, в случае макроскопических параметров A_α является малым: $\sigma \ll \Delta A$ в силу малости kT. При значениях $-\langle B_\alpha \rangle$ порядка σ или больше (но много меньших, чем ΔA) роль нелинейных членов в $\varphi_\alpha(A)$ или в $K_\alpha(A)$ будет относительно мала. Отметим явно малость нелинейности введением формального малого параметра μ в следующее разложение:

$$K_\alpha(B) = K_\alpha + K_{\alpha,\beta} B_\beta + \frac{\mu}{2} K^1_{\alpha,\beta\gamma} B_\beta B_\gamma \tag{1.4}$$

(мы ограничиваемся линейно-квадратичным приближением). Тогда значения (1.3) также будут пропорциональны μ.

В последующем для отыскания третьего момента будем решать уравнение (1.1), куда входит μ, методом малого параметра, рассматривая лишь члены нулевого и первого порядка по μ. Члены нулевого порядка будут соответствовать гауссову приближению, а члены первого порядка будут описывать первое отклонение от гауссовости. В соответствии с этим в рамках линейно-квадратичной теории следует полагать

$$K_{\alpha\beta}(B) = K_{\alpha\beta} + \mu K^{1}_{\alpha\beta,\gamma} B_\gamma, \qquad K_{\alpha\beta\gamma}(B) = \mu K^{1}_{\alpha\beta\gamma}, \tag{1.5}$$

причем в (1.4), (1.5)

$$K_\alpha = K^0_\alpha + \mu K^1_\alpha, \quad K_{\alpha,\beta} = K^0_{\alpha,\beta} + \mu K^1_{\alpha,\beta}, \quad K_{\alpha\beta} = K^0_{\alpha\beta} + \mu K^1_{\alpha\beta}. \tag{1.6}$$

Прочие коэффициенты берутся равными нулю. Для краткости удобно обозначить $D_{\alpha\beta} = -K^0_{\alpha,\beta}$. Эта матрица предполагается невырожденной.

Единовременное равновесное распределение $w_{\text{рав}}(B)$ или соответствующая характеристическая функция

$$\theta_{\text{рав}}(iv) = \int \exp(iv_\alpha B_\alpha)\, w_{\text{рав}}(B)\, dB$$

предполагается известной. В рамках описанного приближения она имеет вид

$$\theta_{\text{рав}}(u) = \exp\left(\frac{1}{2} R_{\alpha\beta} u_\alpha u_\beta + \frac{1}{6} \mu S_{\alpha\beta\gamma} u_\alpha u_\beta u_\gamma\right), \tag{1.7}$$

где $R_{\alpha\beta}$ — равновесная корреляционная матрица, а $\mu S_{\alpha\beta\gamma}$ — равновесный единовременный третий момент. Начало координат в пространстве B выбрано таким образом, чтобы равновесные средние равнялись нулю. Разделение K_α, $K_{\alpha,\beta}$, $K_{\alpha\beta}$ на два члена в (1.6) содержит некоторый малый элемент неопределенности, так как к K^0_α можно прибавить μa, а из μK^1_α — вычесть эту величину. Доопределяем это разбиение, потребовав, чтобы нулевое приближение давало равновесную характеристическую функцию $\theta_{\text{рав}}(u) = \exp\left(\frac{1}{2} R_{\alpha\beta} u_\alpha u_\beta\right)$, где $R_{\alpha\beta}$ — то же, что и в (1.7). Нетрудно понять, что при этом из условия равенства нулю равновесных средних значений будет вытекать $K^0_\alpha = 0$.

Задачей настоящей работы является расчет третьего равновесного момента тепловых флуктуаций в произвольном многокомпонентном случае. При этом считаются известными функции $\varphi_\alpha(A)$ в (1.2) или коэффициенты в (1.4), а также моменты, входящие в (1.7). Отметим, что третий момент можно вычислять и другим способом: ввести в (1.2) силы, найти квадратичный адмитанс и применить квадратичную ФДТ Ефремова. Используемый здесь метод в обход квадратичного адмитанса имеет то преимущество, что может быть применен также для вычисления четвертого кумулянта в многокомпонентном случае. Данная статья в некоторой степени близка к работе [4], но в [4] рассматривался однокомпонентный частный случай и отыскивался не третий момент, а четвертый.

2. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ НЕРАВНОВЕСНЫХ КУМУЛЯНТОВ И ИХ РЕШЕНИЕ

Рассмотрим условную плотность распределения $w(B(t)\,|\,B(0))$, удовлетворяющую уравнению (1.1), и возьмем соответствующую ей характеристическую функцию

$$\theta(iv \mid B^0) = \int e^{ivB(t)} w(B(t) \mid B^0)\, dB(t)$$

$$(B^0 \equiv B(0)).$$

Пользуясь (1.1), получаем уравнение

$$\dot{\theta}(u \mid B^0) = \sum_{n=1}^{3} \frac{1}{n!} u_{\alpha_1} \dots u_{\alpha_n} K_{\alpha_1 \dots \alpha_n} \left(\frac{\partial}{\partial u}\right) \theta(u \mid B^0). \tag{2.1}$$

Будем искать решение этого уравнения в форме

$$\theta(u \mid B^0) = \exp\left(m_\alpha u_\alpha + \frac{1}{2} k_{\alpha\beta} u_\alpha u_\beta + \frac{\mu}{6} l_{\alpha\beta\gamma} u_\alpha u_\beta u_\gamma\right), \tag{2.2}$$

где m_α, $k_{\alpha\beta}$, $l_{\alpha\beta\gamma}$ зависят от времени. Начальное значение функции (2.2) как функции времени соответствует, как легко понять, таким начальным значениям:

$$m_\alpha = B^0_\alpha, \quad k_{\alpha\beta} = 0, \qquad l_{\alpha\beta\gamma} = 0 \qquad \text{при } t = 0. \tag{2.3}$$

Подставляя (2.2) в (2.1) и учитывая (1.4) и (1.5), находим уравнения

$$\begin{gathered} \dot{m}_\alpha = K_\alpha + K_{\alpha,\beta} m_\beta + \frac{\mu}{2} K^1_{\alpha,\beta\gamma} (k_{\beta\gamma} + m_\beta m_\gamma), \\ \dot{k}_{\alpha\beta} = K_{\alpha,\rho} k_{\rho\beta} + K_{\beta,\rho} k_{\rho\alpha} + K_{\alpha\beta} + \mu K^1_{\alpha\beta,\sigma} m_\sigma + \\ + \mu K^1_{\alpha,\rho\sigma} m_\rho k_{\sigma\beta} + \mu K^1_{\beta,\rho\sigma} m_\rho k_{\sigma\alpha} + O(\mu^2), \\ \mu \dot{l}_{\alpha\beta\gamma} = \mu K^1_{\alpha\beta\gamma} + 3\mu \{K_{\alpha\sigma} l_{\sigma\beta\gamma}\}_{\text{сим}} + \\ + 3\mu \{K^1_{\alpha\beta,\sigma} k_{\sigma\gamma}\}_{\text{сим}} + 3\mu \{K^1_{\alpha,\rho\sigma} k_{\rho\beta} k_{\sigma\gamma}\}_{\text{сим}} + O(\mu^2). \end{gathered} \tag{2.4}$$

Здесь члены, квадратичные по μ, не выписаны; $\{\dots\}_{\text{сим}}$ означает симметризацию по индексам α, β, γ (сумму трех членов, соответствующих циклическим перестановкам, деленную на три). Подставляя (1.6), а также равенства

$$m_\alpha = m^0_\alpha + \mu m^1_\alpha, \quad k_{\alpha\beta} = k^0_{\alpha\beta} + \mu k^1_{\alpha\beta}$$

в (2.4), из первых двух уравнений получаем уравнения нулевого приближения

$$\begin{gathered} \dot{m}^0_\alpha + D_{\alpha\beta} m^0_\beta = 0, \\ \dot{k}^0_{\alpha\beta} + D_{\alpha\rho} k^0_{\rho\beta} + D_{\beta\rho} k^0_{\rho\alpha} = K^0_{\alpha\beta}, \end{gathered} \tag{2.5}$$

а также уравнения первого приближения

$$\begin{gathered} \dot{m}^1_\alpha + D_{\alpha\beta} m^1_\alpha = K^1_\alpha + K^1_{\alpha,\beta} m^0_\beta + \frac{1}{2} K^1_{\alpha,\beta\gamma} (k^0_{\beta\gamma} + m^0_\beta m^0_\gamma), \\ \dot{k}^1_{\alpha\beta} + D_{\alpha\rho} k^1_{\rho\beta} + D_{\beta\rho} k^1_{\rho\alpha} = K^1_{\alpha,\rho} k^0_{\rho,\beta} + K^1_{\beta,\rho} k^0_{\rho\alpha} + \\ + K^1_{\alpha,\rho\sigma} m^0_\rho k^0_{\sigma\beta} + K^1_{\beta,\rho\sigma} m^0_\rho k^0_{\sigma\alpha} + K^1_{\alpha\beta} + K^1_{\alpha\beta,\sigma} m_\sigma. \end{gathered} \tag{2.6}$$

В соответствии с (2.3) берем для указанных уравнений такие начальные условия: $m^0_\alpha = B^0_\alpha$, $m^1_\alpha = 0$, $k^0_{\alpha\beta} = k^1_{\alpha\beta} = 0$. Первое уравнение (2.5) при соответствующем начальном условии имеет решение

$$m^0(t) = e^{-Dt}B^0 \equiv V(t)B^0. \tag{2.7}$$

Как показано в Приложении, второе уравнение (2.5) дает

$$k^0(t) = E - V(t)EV^T(t). \tag{2.8}$$

Физический смысл матрицы $E_{\alpha\beta}$ легко получить, устремляя $t \to \infty$ в (2.8). При этом неравновесная корреляционная матрица $k^0(t)$ перейдет в равновесную корреляционную матрицу R, которая входит в (1.7). Это дает $E_{\alpha\beta} = R_{\alpha\beta}$.

Перейдем теперь к первому уравнению (2.6) Подставляя в него (2.7), (2.8), записываем его в таком виде:

$$\dot{m}^1_\alpha + D_{\alpha\beta} m^1_\beta = \widetilde{K}^1_\alpha + K^1_{\alpha,\rho} V_{\rho\sigma} B^0_\sigma + \frac{1}{2} K^1_{\alpha,\beta\gamma} V_{\beta\rho} V_{\gamma\sigma} \Delta_{\rho\sigma}, \tag{2.9}$$

где обозначено

$$\widetilde{K}^1_\alpha = K^1_\alpha + \frac{1}{2} K^1_{\alpha,\beta\gamma} R_{\beta\gamma}, \qquad \Delta_{\rho\sigma} = B^0_\rho B^0_\sigma - R_{\rho\sigma}.$$

В Приложении показано, что решение этого уравнения с нулевым начальным условием имеет вид

$$\begin{aligned} m^1_\alpha(t) = ((1-V)D^{-1}\widetilde{K}^1)_\alpha + ((CV - VC)B^0)_\alpha + \\ + \frac{1}{2}[F_{\alpha\mu\nu} V_{\mu\rho} V_{\nu\sigma} - V_{\alpha\beta} F_{\beta\rho\sigma}]\,\Delta_{\rho\sigma}, \end{aligned} \tag{2.10}$$

где $C_{\alpha\beta}$, $F_{\alpha\mu\nu}$ определяются уравнениями

$$\begin{aligned} D_{\alpha\sigma} C_{\sigma\beta} - C_{\alpha\sigma} D_{\sigma\beta} = K^1_{\alpha,\beta}, \\ D_{\alpha\sigma} F_{\sigma\beta\gamma} - F_{\alpha\rho\gamma} D_{\rho\beta} - F_{\alpha\beta\tau} D_{\tau\gamma} = K^1_{\alpha,\beta\gamma}. \end{aligned} \tag{2.10a}$$

Устремляя $t \to \infty$ в (2.10), получаем поправку к равновесному среднему, равную $D^{-1}\widetilde{K}^1$. Как отмечалось во Введении, она должна быть равна нулю (т. е. $\widetilde{K}^1_\alpha = 0$), так что первый член в правой части (2.10) можно опустить.

Найдем решение второго уравнения (2.6). Подставляя в него (2.7), (2.8), получаем

$$\begin{aligned} \dot{k}^1_{\alpha\beta} + D_{\alpha\rho} k^1_{\rho\beta} + D_{\beta\rho} k^1_{\rho\alpha} = \widetilde{K}^1_{\alpha\beta} + \widetilde{K}^1_{\alpha\beta,\sigma} V_{\sigma\tau} B^0_\tau - \\ - K^1_{\alpha,\rho} V_{\rho\sigma} R_{\sigma\tau} V_{\beta\tau} - K^1_{\alpha,\rho\sigma} V_{\rho\varphi} B^0_\varphi V_{\sigma\mu} R_{\mu\nu} V_{\beta\nu} + \text{пер.}, \end{aligned} \tag{2.11}$$

где «пер.» обозначает, что нужно дописать члены, аналогичные двум последним, но с переставленными индексами α, β. В (2.11) обозначено также

$$\begin{aligned} \widetilde{K}^1_{\alpha\beta} = K^1_{\alpha\beta} + K^1_{\alpha,\rho} R_{\rho\beta} + K^1_{\beta,\rho} R_{\rho\alpha}, \\ \widetilde{K}^1_{\alpha\beta,\gamma} = K^1_{\alpha\beta,\gamma} + K^1_{\alpha,\rho\gamma} R_{\rho\beta} + K^1_{\beta,\rho\gamma} R_{\rho\alpha}. \end{aligned} \tag{2.12}$$

Из условия исчезновения равновесной добавки $\lim\limits_{t\to\infty} k^1_{\alpha\beta}(t)$ к равновесной корреляционной матрице $R_{\alpha\beta}$ находим, что $\widetilde{K}^1_{\alpha\beta}$ должна исчезать.

подобно $\widetilde{K}^1_\alpha$. Итак, мы получили, что произвол в выборе K^1_α, $K^1_{\alpha,\beta}$, $K^1_{\alpha\beta}$, о котором говорилось во Введении, должен быть ограничен условиями

$$\widetilde{K}^1_\alpha = K^1_\alpha + \frac{1}{2} K^1_{\alpha,\,\beta\gamma} R_{\beta\gamma} = 0,$$

$$\widetilde{K}^1_{\alpha\beta} = K^1_{\alpha\beta} + K^1_{\alpha,\,\rho} R_{\rho\beta} + K^1_{\beta,\,\rho} R_{\rho\alpha} = 0.$$

Первое из этих условий однозначно определяет K^1_α. Второе же из этих условий еще оставляет свободу в выборе $K^1_{\alpha,\beta}$. Устраним полностью произвол, положив $K^1_{\alpha,\beta}=0$. При этом обратятся в нуль и $K^1_{\alpha\beta}$ и $C_{\alpha\beta}$. В формуле (2.10) останется, следовательно, только последний из трех членов в правой части. Уменьшится число членов в (2.11).

Решая уравнение (2.11) методом, описанным в Приложении, будем иметь

$$\begin{gathered} k_{\alpha\beta}(t) = [G_{\alpha\beta\rho} V_{\rho\gamma} - V_{\alpha\sigma} V_{\beta\tau} G_{\sigma\tau\gamma}]\, B^0_\gamma - \\ - [F_{\alpha\rho\sigma} V_{\rho\mu} V_{\sigma\nu} - V_{\alpha\tau} F_{\tau\mu\nu}]\, R_{\mu\gamma} V_{\beta\gamma} B^0_\nu + \text{пер.} \end{gathered} \tag{2.13}$$

Входящая сюда матрица $G_{\alpha\beta\gamma}$ определяется уравнением

$$D_{\alpha\sigma} G_{\sigma\beta\gamma} + D_{\beta\sigma} G_{\alpha\sigma\gamma} - G_{\alpha\beta\tau} D_{\tau\gamma} = \widetilde{K}^1_{\alpha\beta,\,\gamma}. \tag{2.14}$$

Уравнения вида (2.10а), (2.14) можно решать, в частности, приводя матрицу D к диагональному виду.

Остается решить третье уравнение (2.4). Однако это излишне. Как видно из дальнейшего, значения $l_{\alpha\beta\gamma}$ не влияют на искомый третий момент.

Итак, все необходимые кумулянты найдены. Подставляя (2.7), (2.8), (2.10), (2.13) в (2.2), получаем

$$\begin{gathered} \theta(u \mid B^0) = \exp\Big\{ u^T V B^0 + \frac{1}{2} u^T (R - VRV^T)\, u + \mu L(u) + \\ + \mu P_\alpha(u) B^0_\alpha + \mu Q_{\alpha\beta}(u)\, [B^0_\alpha B^0_\beta - R_{\alpha\beta} - 2R_{\alpha\gamma} V_{\mu\gamma} u_\mu B^0_\beta] \Big\}, \end{gathered} \tag{2.15}$$

где обозначено

$$L(u) = \frac{1}{6} l_{\alpha\beta\gamma}(t)\, u_\alpha u_\beta u_\gamma,$$

$$P_\alpha(u) = \frac{1}{2} (G_{\gamma\beta\rho} V_{\rho\alpha} - V_{\gamma\tau} V_{\beta\tau} G_{\sigma\tau\alpha})\, u_\gamma u_\beta = \frac{1}{2} Z_{\gamma\beta\alpha} u_\gamma u_\beta, \tag{2.16}$$

$$Q_{\alpha\beta}(u) = \frac{1}{2} (F_{\gamma\mu\nu} V_{\mu\alpha} V_{\nu\beta} - V_{\gamma\sigma} F_{\sigma\alpha\beta})\, u_\gamma = \frac{1}{2} Y_{\gamma\alpha\beta} u_\gamma.$$

Будем использовать также обозначение $\overline{S}(u) = \frac{1}{6} S_{\alpha\beta\gamma} u_\alpha u_\beta u_\gamma$, при котором (1.7) примет вид

$$\theta_{\text{рав}}(u) = \exp\left(\frac{1}{2} u^T R u + \mu \overline{S}(u)\right). \tag{2.17}$$

3. ТРЕХВРЕМЕННАЯ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ И ТРЕТИЙ МОМЕНТ

Если функцию $f(B)$ можно разложить в ряд Тейлора, то

$$\langle f(B)\rangle \equiv \int f(B)\, w(B)\, dB = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f_{\alpha_1 \ldots \alpha_n} \langle B_{\alpha_1} \ldots B_{\alpha_n} \rangle .$$

Подставляя сюда известное равенство

$$\langle B_{\alpha_1} \ldots B_{\alpha_n} \rangle = \left[\frac{\partial^n}{\partial u_{\alpha_1} \ldots \partial u_{\alpha_n}} \theta(u) \right]_{u=0},$$

находим

$$\int f(B)\, w(B)\, dB = \\ = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f_{\alpha_1 \ldots \alpha_n} \left[\frac{\partial^n}{\partial u_{\alpha_1} \ldots \partial u_{\alpha_n}} \theta(u) \right]_{u=0} = \left[f\left(\frac{\partial}{\partial u}\right) \theta(u) \right]_{u=0}. \tag{3.1}$$

В частности, при $f(B) = f_0(B) \exp(c^T B)$, как легко видеть, будем иметь

$$\int f_0(B) \exp(c^T B)\, w(B)\, dB = f_0\left(\frac{\partial}{\partial c}\right) \theta(c), \tag{3.2}$$

поскольку $\exp(c^T \partial/\partial u)\, \theta(u) = \theta(u + c)$.

Применим эту формулу для вычисления двухвременной характеристической функции

$$\theta_t(u, z) = \int \exp(u^T B + z^T B^0)\, w(B \mid B^0)\, w_{\text{рав}}(B^0)\, dB\, dB^0 = \\ = \int \theta(u \mid B^0) \exp(z^T B^0)\, w_{\text{рав}}(B^0)\, dB^0.$$

С учетом (2.15) видим, что удобно положить $c = V^T u + z$ и применить формулу (3.2). Получаем

$$\theta_t(u, z) = \exp\left[\frac{1}{2} u^T (R - VRV^T)\, u + \mu L(u) + \mu P_\alpha(u) \frac{\partial}{\partial z_\alpha} + \right. \\ \left. + \mu Q_{\alpha\beta}(u) \left(\frac{\partial^2}{\partial z_\alpha \partial z_\beta} - R_{\alpha\beta} - 2 (u^T V R)_\alpha \frac{\partial}{\partial z_\beta} \right) \right] \theta_{\text{рав}}(z + V^T u).$$

Подставляя сюда (2.17) и пренебрегая членами порядка μ^2 и выше, будем иметь

$$\theta_t(u, z) = \exp\left(\frac{1}{2} u^T R u + \frac{1}{2} z^T R z + u^T V R z \right) [1 + \mu L(u) + \\ + \mu (z^T + u^T V) R P(u) + \mu (z^T - u^T V) R Q(u) R (z + V^T u) + \mu \bar{S}(z + V^T u)]. \tag{3.3}$$

Рассмотрим теперь трехвременную характеристическую функцию

$$\theta_{t't}(x, y, z) = \int \exp(x^T B' + y^T B + z^T B^0)\, w_{t'}(B' \mid B) \times \\ \times w_t(B \mid B^0)\, w_{\text{рав}}(B^0)\, dB' dB dB^0, \tag{3.4}$$

где t' и t — интервалы между последовательными моментами времени, т. е. $t = t_2 - t_1 > 0$, $t' = t_3 - t_2 > 0$. Используя (3.1), запишем (3.4) в виде

$$\theta_{t't}(x, y, z) = \theta_{t'}\left(x \left| \frac{\partial}{\partial u}\right.\right) \exp\left(y \frac{\partial}{\partial u}\right) \theta_t(u, z) \qquad (u = 0).$$

Величины, относящиеся к интервалу $t' = t_3 - t_2$, будем отмечать штрихом.

Используя (2.15) и (3.3), по формуле (3.2), где удобно положить $c = y + V'^T x$, получаем

$$\begin{gathered} \ln \theta_{t't}(x, y, z) = \ldots + \mu L'(x) + \mu (Ry + RV'^T x + VRz)^T P'(x) + \\ + \mu (Ry - RV'^T x + VRz)^T Q'(x) (Ry + RV'^T x + VRz) + \\ + \mu L(y + V'^T x) + \mu (z^T + y^T V + x^T V'V) RP(y + V'^T x) + \mu (z^T - y^T V - \\ - x^T V'V) RQ(y + V'^T x) R(z + V^T y + V^T V'^T x) + \mu \bar{S}(z + V^T y + V^T V'^T x). \end{gathered} \tag{3.5}$$

Здесь точки обозначают гауссовы члены, которые для нас несущественны. Из числа выписанных членов также многие члены несущественны для определения третьего трехвременного момента, скажем, $\mu L'(x)$, $\mu y^T RP'(x)$ и другие.

Отставляя только те члены, в каждый из которых входят все три аргумента x, y, z, из (3.5) имеем

$$\begin{gathered} \ln \theta_{t't}(x, y, z) = 2\mu y^T RQ'(x) VRz + \\ + \mu z^T RP(y + V'^T x) + \mu \bar{S}(z + V^T y + V''^T x) \\ (V'' = V'V). \end{gathered}$$

Используя (2.16), отсюда получаем искомый момент

$$\begin{gathered} \langle B'_\alpha B_\beta B^0_\gamma \rangle = \mu Y'_{\alpha\mu\nu} R_{\mu\beta} V_{\nu\rho} R_{\rho\gamma} + \\ + \mu V'_{\alpha\sigma} Z_{\sigma\beta\rho} R_{\rho\gamma} + \mu V''_{\alpha\rho} V_{\beta\sigma} S_{\rho\sigma\gamma}. \end{gathered} \tag{3.6}$$

4. ПРИМЕНЕНИЕ ФОРМУЛ МАРКОВСКОЙ НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ

Как известно [1–3], точные формулы марковской неравновесной термодинамики связывают между собой значения и производные (в нулевой точке) функций

$$\begin{gathered} \varkappa_{\alpha_1 \ldots \alpha_n}(a) = \int K_{\alpha_1 \ldots \alpha_n}(B)\, w_a(B)\, dB = \\ = \left[\int e^{\beta a B} w_{\text{рав}}(B)\, dB\right]^{-1} \int K_{\alpha_1 \ldots \alpha_n}(B)\, e^{\beta a B} w_{\text{рав}}(B)\, dB \\ (\beta = (kT)^{-1}). \end{gathered} \tag{4.1}$$

Используя формулы (3.1), (3.2), равенство (4.1) можно записать в виде

$$\varkappa_{\alpha_1 \ldots \alpha_n}(a) = \theta^{-1}_{\text{рав}}(\beta a)\, K_{\alpha_1 \ldots \alpha_n}\left(\frac{\partial}{\partial \beta a}\right) \theta_{\text{рав}}(\beta a).$$

Подставляя (1.4), (1.5), (1.7) и используя (1.6), в нашем случае получаем

$$\begin{gathered} \varkappa_\alpha(a) = K^0_\alpha + \beta K^0_{\alpha,\rho} R_{\rho\sigma} a_\sigma + \mu \left[\tilde{K}^1_\alpha + \beta K^1_{\alpha,\rho} R_{\rho\sigma} a_\sigma + \right. \\ \left. + \frac{\beta^2}{2} K^0_{\alpha,\rho} S_{\rho\sigma\tau} a_\sigma a_\tau + \frac{\beta^2}{2} K^1_{\alpha,\rho\sigma} R_{\rho\mu} R_{\sigma\nu} a_\mu a_\nu\right] + O(\mu^2), \end{gathered} \tag{4.2}$$

$$\varkappa_{\alpha\beta}(a) = K^0_{\alpha\beta} + \mu(K^1_{\alpha\beta} + \beta K^1_{\alpha\beta,\,\rho} R_{\rho\sigma} a_\sigma) + O(\mu^2),$$

$$\varkappa_{\alpha\beta\gamma}(a) = \mu K^1_{\alpha\beta\gamma}.$$

Часть членов в правых частях (4.2) выпадает, если положить $K^0_\alpha = 0$, $\tilde{K}^1_\alpha = 0$, $K^1_{\alpha,\,\beta} = K^1_{\alpha\beta} = 0$ равными нулю, как это было сделано ранее.

Функции $\varphi_\alpha(A)$, входящие в (1.2), связаны с $\varkappa_\alpha(a)$ соотношением

$$-\varphi_\alpha(A) = \varkappa_\alpha(a(A)), \tag{4.3}$$

где зависимость $a(A)$ обратна зависимости $A(a)$, которая определяется формулой

$$A_\alpha(a) = \int B_\alpha w_a(B)\,dB = \left[\int e^{\beta a B} w_{\text{рав}}(B)\,dB\right]^{-1} \int B_\alpha e^{\beta a B} w_{\text{рав}}(B)\,dB.$$

Применяя (3.1), (3.2), последнюю формулу можно записать:

$$A_\alpha(a) = \theta^{-1}_{\text{рав}}(\beta a) \frac{\partial}{\partial(\beta a)} \theta_{\text{рав}}(\beta a). \tag{4.4}$$

В рассматриваемом случае в силу (1.7) равенство (4.4) дает

$$A_\alpha(a) = \beta R_{\alpha\gamma} a_\gamma + \frac{\beta^2}{2} \mu S_{\alpha\gamma\tau} a_\gamma a_\tau.$$

Разрешая последнее равенство относительно a и подставляя в (4.3), при учете (4.2) находим

$$-\varphi_\alpha(A) = K^0_{\alpha,\,\rho} A_\rho + \frac{\mu}{2} K^1_{\alpha,\,\rho\sigma} A_\rho A_\sigma + O(\mu^2).$$

Итак, матрицы $K^0_{\alpha,\,\beta} \equiv -D_{\alpha\beta} K^1_{\alpha,\,\beta\gamma}$ определяются феноменологическим релаксационным уравнением (1.2), и их можно считать известными.

Чтобы определить неизвестные матрицы $K^0_{\alpha\beta}$, $K^1_{\alpha\beta,\,\gamma}$, $K^1_{\alpha\beta\gamma}$, следует воспользоваться соотношениями марковской неравновесной термодинамики [1–3]. Одноиндексные соотношения имеют вид $\varkappa_\alpha(0) = 0$, что согласуется в силу (4.2) с принятыми ранее значениями $K^0_\alpha = \tilde{K}^1_\alpha = 0$. Далее, точные двухиндексные соотношения имеют вид

$$\varkappa_{\alpha\beta} = -2kT\,\vartheta^+_{\alpha\beta} \varkappa_{\alpha,\,\beta} \quad \text{при} \quad a = 0$$
$$(\vartheta^+_{\alpha\beta} = (1 + \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta)/2), \tag{4.5}$$

ε_α — числа, равные 1 или —1 в зависимости от того, является ли параметр B_α четным по времени или нечетным. Согласно (4.2) при равных нулю $K^1_{\alpha,\,\beta}$ и $K^1_{\alpha\beta}$ из (4.5) получаем

$$K^0_{\alpha\beta} = -2\vartheta^+_{\alpha\beta} K^0_{\alpha,\,\rho} R_{\rho\beta} = 2\vartheta^+_{\alpha\beta} D_{\alpha\rho} R_{\rho\beta}.$$

Наконец, точные трехиндексные соотношения имеют вид

$$\varkappa_{\alpha\beta,\,\gamma} = kT(\varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \varepsilon_\gamma \varkappa_{\gamma,\,\alpha\beta} - \varkappa_{\alpha,\,\beta\gamma} - \varkappa_{\beta,\,\alpha\gamma}) \qquad (a = 0),$$
$$\varkappa_{\alpha\beta\gamma} = -2kT\,\vartheta^-_{\alpha\beta\gamma} \varkappa_{\alpha\beta,\,\gamma} \qquad (a = 0), \tag{4.6}$$
$$\vartheta^-_{\alpha\beta\gamma} = (1 - \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \varepsilon_\gamma)/2.$$

Используя (4.2), отсюда получаем

$$K^1_{\alpha\beta,\sigma} R_{\sigma\gamma} = \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \varepsilon_\gamma (K^1_{\gamma,\rho\sigma} R_{\rho\alpha} R_{\sigma\beta} - D_{\gamma\rho} S_{\rho\alpha\beta}) - \\ - (K^1_{\alpha,\rho\sigma} R_{\rho\beta} R_{\sigma\gamma} - D_{\alpha\rho} S_{\rho\beta\gamma}) - (K^1_{\beta,\rho\sigma} R_{\rho\alpha} R_{\sigma\gamma} - D_{\beta\rho} S_{\rho\alpha\gamma}); \tag{4.7}$$

$$K^1_{\alpha\beta\gamma} = -2\vartheta^-_{\alpha\beta\gamma} K^1_{\alpha\beta,\rho} R_{\rho\gamma}. \tag{4.8}$$

Тем самым, определены все нужные матрицы и трехвременной момент можно вычислять по формуле (3.6).

Однако полезно, с помощью термодинамических соотношений, преобразовать выражение (3.6) к более удобному для приложений виду. Для этого нам понадобится еще хорошо известное двухиндексное соотношение

$$\varkappa_{\alpha,\beta} = \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \varkappa_{\beta,\alpha}, \qquad a = 0. \tag{4.9}$$

Подставляя (4.2) (при равных нулю $K^1_{\alpha,\beta}$ и $K^1_{\alpha\beta}$) в (4.9), получим

$$K_{\alpha,\rho} R_{\rho\beta} = \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta K_{\beta,\rho} R_{\rho\alpha}. \tag{4.10}$$

Кроме того, из инвариантности гамильтониана относительно обращения времени следует, что

$$R_{\alpha\beta} = \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta R_{\beta\alpha}. \tag{4.11}$$

Вспоминая определение матриц D и $V = e^{-Dt}$, из (4.10) и (4.11) можно также получить соотношение

$$\varepsilon D^T \varepsilon = R^{-1} D R. \tag{4.12}$$

Взяв экспоненту от обеих частей равенства (4.12) и воспользовавшись формулой $f(SAS^{-1}) = Sf(A)S^{-1}$, получаем

$$\varepsilon V^T \varepsilon = R^{-1} V R. \tag{4.13}$$

Воспользуемся теперь найденными соотношениями. Для этого вспомним определение $Z_{\alpha\beta\gamma}$, т. е. формулу (П.10). С помощью (4.7), а также (2.12) и (4.10), (4.11) найдем входящую в нее матрицу:

$$\tilde{K}^1_{\alpha\beta,\gamma} = \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \varepsilon_\gamma R^{-1}_{\gamma\tau} K_{\tau,\mu\nu} R_{\mu\alpha} R_{\nu\beta} + [D_{\alpha\rho} S_{\rho\beta\tau} + \\ + D_{\beta\rho} S_{\rho\alpha\tau} - \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \varepsilon_\gamma D_{\tau\rho} S_{\rho\alpha\beta}] R^{-1}_{\tau\gamma}. \tag{4.14}$$

Воспользовавшись (4.11), (4.12) и соотношением $S_{\alpha\beta\gamma} = \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \varepsilon_\gamma S_{\alpha\beta\gamma}$, так же как и в (4.11) вытекающим из инвариантности гамильтониана относительно обращения времени, выражение в квадратных скобках в (4.14) можно привести к виду $(D + \overline{D} - \underline{D}^T) R^{-1} S$. (Здесь мы воспользовались модифицированными обозначениями, введенными в Приложении.)

Подставляя теперь (4.14) в (П.10)—(П.12) и используя (П.6), (П.7), а также (4.12), (4.13), мы можем преобразовать выражение для $Z_{\alpha\beta\gamma}$ к виду

$$Z_{\alpha\beta\gamma} = \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \varepsilon_\gamma R^{-1}_{\gamma\tau} Y_{\tau\mu\nu} R_{\mu\beta} R_{\nu\alpha} + (VR^{-1})_{\gamma\rho} S_{\rho\alpha\beta} - V_{\alpha\rho} V_{\beta\mu} S_{\rho\mu\nu} R^{-1}_{\nu\gamma}. \tag{4.15}$$

Подставляя (4.15) в (3.6), получим (положив $\mu = 1$)

$$\langle B'_\alpha B_\beta B^0_\gamma \rangle = Y'_{\alpha\mu\nu} R_{\mu\beta} (VR)_{\nu\gamma} + \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \varepsilon_\gamma Y_{\gamma\mu\nu} R_{\mu\beta} (V'R)_{\nu\alpha} + V'_{\alpha\sigma} \varepsilon_\gamma V_{\gamma\rho} \varepsilon_\rho S_{\sigma\beta\rho} \tag{4.16}$$

при $t_3 \geqslant t_2 \geqslant t_1$. Напомним, что $V = V(t_2 - t_1)$, $V' = V(t_3 - t_2)$.

Легко заметить, что выражение (4.16) обладает определенной временной симметрией: оно инвариантно относительно замены $t' \leftrightarrow t$, $\alpha \leftrightarrow \gamma$ и одновременного умножения на $\varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \varepsilon_\gamma$. Это согласуется с общей симметрией, указанной в [5]. Подставляя в (4.16) выражение для $Y_{\alpha\beta\gamma}$ из (П.7), можно вскрыть временную зависимость найденного момента. Получим

$$\begin{aligned} \langle B_\alpha(t_3) B_\beta(t_2) B_\gamma(t_1) \rangle &= F_{\alpha\mu\nu} V'_{\mu\sigma} R_{\sigma\beta} V''_{\nu\tau} R_{\tau\gamma} + \\ &+ \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \varepsilon_\gamma F_{\gamma\mu\nu} V_{\mu\sigma} R_{\sigma\beta} V''_{\nu\tau} R_{\tau\alpha} - V'_{\alpha\rho} F_{\rho\mu\nu} R_{\mu\beta} V_{\nu\tau} R_{\tau\gamma} - \\ &- \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \varepsilon_\gamma V_{\gamma\rho} F_{\rho\mu\nu} R_{\mu\beta} V'_{\nu\tau} R_{\tau\alpha} + V'_{\alpha\sigma} \varepsilon_\gamma V_{\gamma\rho} \varepsilon_\rho S_{\sigma\beta\rho} \end{aligned} \tag{4.17}$$

при $t_3 \geqslant t_2 \geqslant t_1$. Здесь $V'' = V(t_3 - t_1)$. Значения $F_{\alpha\mu\nu}$ определяются путем решения второго уравнения (2.10а). Решение проводится алгебраически или приведением матрицы $D_{\alpha\beta}$ к диагональному виду.

Отметим, что найденные формулы справедливы при любом числе компонент и поэтому непосредственно распространяются на полевой случай.

5. ПРИМЕР: ФЛУКТУАЦИИ В ЦЕПОЧКЕ LR С НЕЛИНЕЙНЫМ СОПРОТИВЛЕНИЕМ

Из обширного числа возможных примеров рассмотрим здесь лишь один иллюстративный пример. Пусть есть нелинейное сопротивление, имеющее характеристику $U = RJ + aJ^2 + \ldots$, и пусть оно присоединено к индуктивности L. Такая LR-цепочка описывается уравнением

$$L\dot{J} = -RJ - aJ^2,$$

которое представляет собой конкретизацию уравнения (1.2) в данном одномерном случае. В роли внутреннего параметра B_1 выступает ток J. При этом $D_{11} = R/L \equiv \gamma$, $K^1_{1,11} = -2a/L$. Поскольку $V(t) = e^{-Dt}$, имеем $V_{11}(t) = e^{-\gamma t}$. Равновесное распределение на линейной индуктивности гауссово, причем $R_{11} = kT/L$, $S_{111} = 0$. Используя второе уравнение (2.10а), для данного примера находим

$$F_{111} = -K^1{}_{1,11}/D_{11} = 2a/R.$$

Поскольку $\varepsilon_1 = -1$ при $B_{11} = J$, используя (4.17), нетрудно найти третий момент

$$\langle J(t_3) J(t_2) J(t_1) \rangle = \frac{2a}{R} \left(\frac{kT}{L} \right)^2 e^{-\gamma(t_3 - t_1)} \left[e^{-\gamma(t_3 - t_2)} - e^{-\gamma(t_2 - t_1)} \right]$$

при $t_3 \geqslant t_2 \geqslant t_1$. Из этого выражения видно, что третий момент обращается в нуль не только при $t_3 = t_2 = t_1$, но и при $t_3 - t_2 = t_2 - t_1 \neq 0$. Значения, максимальные по абсолютной величине и равные $\pm (a/2R)(kT/L)^2$, момент принимает в точках $t_2 - t_1 = \gamma^{-1} \ln 2$, $t_3 - t_2 = 0$ и $t_2 - t_1 = 0$, $t_3 - t_2 = \gamma^{-1} \ln 2$.

В данном примере масштаб нелинейности таков: $\Delta J = dU/dJ (d^2 U/dJ^2)^{-1} = R/2a$. Поэтому малый параметр $\sigma/\Delta J$, где $\sigma = R_{11}^{1/2}$, равен $(kT/L)^{1/2} 2a/R$. Если образовать матрицу асимметрии $\langle J(t_1) J(t_2) J(t_3) \rangle \sigma^{-3}$, характеризующую относительную негауссовость флуктуаций, то по порядку величины она как раз будет равна указанному малому параметру.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Решение матричных уравнений

1. Второе уравнение (2.6) в матричной форме имеет вид

$$\dot{k}^0 + Dk^0 + k^0 D^T = K^0. \qquad (\text{П.1})$$

Перейдем к модифицированной форме записи, в которой все элементы $k^0_{\alpha\beta}$ и $K^0_{\alpha\beta}$ расположены в столбец, и введем обозначение $\overline{D} = D \times I$; $\underline{D} = I \times D$ (I — тождественный оператор). Тогда (П.1) запишется так:

$$\dot{k}^0 + (\overline{D} + \underline{D}) k^0 = K^0. \qquad (\text{П.2})$$

Действуя на обе части равенства (П.2) оператором $e^{-\overline{D}+\underline{D})t}$ и интегрируя по времени от 0 до t, получаем решение указанного уравнения:

$$k^0(t) = \int\limits_0^t \exp[-(\overline{D} + \underline{D})(t - \tau)]\, d\tau\, K^0 =$$

$$= (1 - \exp[-(\overline{D} + \underline{D})t])(\overline{D} + \underline{D})^{-1} K^0.$$

Обозначая $E = (\overline{D} + \underline{D})^{-1} K^0$, имеем

$$k^0(t) = E - \exp[-(\overline{D} + \underline{D})t]E. \qquad (\text{П.3})$$

Переходя от модифицированной матричной записи к обычной, получим (2.8).

2. Действуя на вектор (2.9) оператором e^{Dt}, интегрируя по времени, а затем действуя оператором e^{-Dt}, находим

$$m^1_\alpha(t) = ((1 - e^{-Dt}) D^{-1} \widetilde{K}^1)_\alpha + X_{\alpha\gamma} B^0_\gamma + \frac{1}{2} Y_{\alpha\rho\gamma} \Delta_{\rho\gamma}, \qquad (\text{П.4})$$

где

$$X_{\alpha\gamma} = \int\limits_0^t d\tau\, (e^{-D(t-\tau)})_{\alpha\rho} K^1_{\rho,\sigma} (e^{-D\tau})_{\sigma\gamma}; \qquad (\text{П.5})$$

$$Y_{\alpha\beta\gamma} = \int\limits_0^t d\tau\, (e^{-D(t-\tau)})_{\alpha\rho} K^1_{\rho,\mu\nu} (e^{-D\tau})_{\mu\beta} (e^{-D\tau})_{\nu\gamma}. \qquad (\text{П.6})$$

Вычисление интеграла (П.5) проводится аналогично (П.3). Чтобы взять интеграл по времени в (П.6), также перейдем к модифицированной матричной записи, располагая элементы $K^1_{\alpha,\beta\gamma}$ и $Y_{\alpha\beta\gamma}$ в столбец и обозначая $D = D \times I \times I$, $\overline{D} = I \times D \times I$, $\underline{D} = I \times I \times D$. В этих обозначениях имеем

$$Y = e^{-Dt} \int\limits_0^t \exp[(D - \overline{D}^T - \underline{D}^T)\tau]\, d\tau\, K^1_{1,11},$$

или

$$Y = \exp(-\overline{D}^T t - \underline{D}^T t) F - e^{-Dt} F, \qquad (\text{П.7})$$

если обозначить

$$F = (D - \overline{D}^T - \underline{D}^T)^{-1} K^1_{1,11}. \qquad (\text{П.8})$$

Подстановка (П.7), а также соответствующего значения для $X_{\alpha\gamma}$

в (П.4) приводит к (2.10), причем (П.8) эквивалентно равенству $(D - \overline{D}^T - \underline{D}^T)F = K^1{}_{1,\,11}$, т. е. второму уравнению (2.10а).

3. Аналогичным образом, решая уравнение (2.11), находим

$$k^1_{\alpha\beta}(t) = Z_{\alpha\beta\tau} B^0_\tau - Y_{\alpha\mu\tau} B^0_\mu R_{\tau\nu} V^T_{\nu\beta} + \text{пер.}, \tag{П.9}$$

где $Y_{\alpha\mu\tau}$ имеет прежний смысл (П.6), а

$$Z_{\alpha\beta\gamma} = \int\limits_0^t d\tau\, (e^{-\dot{D}(t-\tau)})_{\alpha\rho}\, (e^{-D(t-\tau)})_{\beta\sigma}\, \widetilde{K}^1_{\rho\sigma,\,\tau}\, (e^{-D\tau})_{\tau\gamma}\,. \tag{П.10}$$

Переходя к модифицированной матричной записи и интегрируя, получаем

$$Z = \exp(-\underline{D}^T t)\, G - \exp(-Dt - \overline{D}t)\, G, \tag{П.11}$$

где

$$G = (D + \overline{D} - \underline{D}^T)^{-1}\, \widetilde{K}^1_{11,\,1}. \tag{П.12}$$

Из (П.9), (П.11), П.7) вытекают (2.13), (2.14).

ЛИТЕРАТУРА

1. Стратонович Р. Л. — Вестник МГУ. Физика, астрономия, 1967, № 4, с. 84.
2. Стратонович Р. Л. — Вестник МГУ. Физика, астрономия, 1970, № 5, с. 479.
3. Стратонович Р. Л. — Изв. вузов — Радиофизика, 1970, 13, № 10, с. 1512.
4. Крупенников Н. А. — Изв. вузов — Радиофизика, 1975, 18, № 3, с. 383.
5. Ефремов Г. Ф. — ЖЭТФ, 1966, 51, с. 156.

Московский государственный университет

Поступила в редакцию 22 января 1979 г., после доработки 23 января 1980 г.

CALCULATION OF THREE-TIME MOMENTS OF THERMAL FLUCTUATIONS BY METHODS OF MARKOV NONLINEAR NONEQUILIBRIUM THERMODYNAMICS

R. L. Stratonovich, A. V. Tolstopyatenko

Formulas have been obtained permitting to find the third moment of thermal fluctuations if the form of nonlinear phenomenological relaxation equations is known. The fluctuation process is assumed to be weakly nongaussian. General formulas referred to multicomponent case are concretized for one particular case of LR-chain with nonlinear resistance.