

О.Н. ГОЛУБЕВА,¹ С.В. СИДОРОВ,¹ В.Г. БАРЬЯХТАР²

¹ Российский университет дружбы народов
(Москва, Россия; e-mail: ogol2013@gmail.com)

² Институт магнетизма НАН Украины
(Бульв. Академика Вернадского, 36, Киев 03142; e-mail: baryakhtar@gmail.com)

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РЕЛАКСАЦИИ КВАНТОВО-ТЕПЛОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ

УДК 539

Предлагается обобщение уравнений квантовой механики в гидродинамической форме путем введения в плотность лагранжиана членов, учитывающих диффузионную скорость при нулевой и конечных температурах, а также энергию диффузионного давления теплового вакуума. На этой основе для модели одномерной гидродинамики строится система уравнений, аналогичных уравнениям Эйлера, но с учетом квантовых и тепловых эффектов. Они представляют собой обобщение уравнений стохастической механики Нельсона. Численный анализ поведения решений данной системы позволяет сделать вывод о ее пригодности для описания процесса релаксации квантово-тепловых флуктуаций.

Ключевые слова: (\hbar, k) -динамика, кванто-термостат, холодный и теплый вакуумы, эффективное воздействие, самодиффузия, плотность энергии диффузионного давления, дрейфовая и диффузионная скорости, численный анализ.

1. Введение

Тепловые флуктуации в гидродинамике принимаются во внимание уже полстолетия, однако последовательной квантовой статистической теории, в которой учитывались бы совместно квантовые и тепловые эффекты, не существует до сих пор [1]. В данной работе мы излагаем вариант подхода к построению такой теории, исходя из гидродинамической формы квантовой механики. С этой целью мы предлагаем обобщить ее, приняв во внимание квантово-тепловую диффузию, которая отражает стохастический характер воздействия окружения, и плотность энергии диффузионного давления, которое имеет место при нулевой и конечной кельвиновых температурах. При этом потребуются опираться на обобщение понятия теплового равновесия на случай одновременного учета стохастического

воздействия как квантового, так и теплового типов. В итоге для одномерной модели будет получена система уравнений гидродинамики, аналогичная системе уравнений Эйлера, но отличающаяся от нее тем, что в ней учтены квантовые и тепловые эффекты.

Традиционно уравнения гидродинамики выводятся либо из статистической механики, либо из кинетики, в которых используются конкретные представления о структуре среды и взаимодействий составляющих ее частей. Соответственно, учет гидродинамических флуктуаций производится путем включения в уравнения гидродинамики случайного тензора напряжений (наряду с регуляризатором), для которого на основе флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ) задается только коррелятор.

Между тем, гидродинамика имеет концептуальное сходство с равновесной термодинамикой, ибо она также является принципиально безмодельной

© О.Н. ГОЛУБЕВА, С.В. СИДОРОВ,
В.Г. БАРЬЯХТАР, 2015

теорией. Поэтому мы предлагаем рассматривать теорию процесса рассасывания квантово-тепловых флуктуаций плотности и дрейфовой скорости при равновесии по температуре как стохастическую гидродинамику. В этом случае вывод соответствующих уравнений можно начать с обобщения гидродинамической формы квантовой механики при нулевой температуре как безмодельной теории на случай явного учета самодиффузии в холодном и теплом вакуумах. Это позволяет впервые распространить гидродинамическую форму квантовой механики на конечные температуры и учесть не только самодиффузию, но и диффузионное давление теплого вакуума.

В итоге для одномерной модели нами получена система уравнений стохастической гидродинамики, справедливая при любых температурах. Ее отличие состоит в том, что в ней неаддитивно учитываются квантовые и тепловые флуктуации. Более того, этим уравнениям удается придать форму уравнений двухскоростной гидродинамики, представляющей собой обобщение стохастической механики Нельсона.

В своем исследовании мы опираемся на результаты, полученные нами ранее в работе [2]. В ней была развита теория (\hbar, k) -динамики, позволяющая ввести последовательное квантово-тепловое описание состояния теплового равновесия, отличное от стандартной равновесной термодинамики и квантовой статистической механики (КСМ).

В основе (\hbar, k) -динамики лежит идея замены классической модели термостата с модулем распределения $\theta_{cl} = k_B T$ на адекватную квантовую модель (кванто-термостат, или “теплый” вакуум, представляющий собой совокупность нормальных мод всех частот ω) с модулем распределения $\theta_{qu} = k_B T$. Здесь величина

$$T \equiv \frac{\hbar\omega}{2k_B} \coth \frac{\hbar\omega}{2k_B T} = \varkappa \coth \left(\varkappa \frac{\omega}{T} \right) \quad (1)$$

называется эффективной температурой и для сокращения записи использовано обозначение

$$\varkappa = \hbar/2k_B.$$

Преимущество характеристики T по сравнению с кельвиновой температурой T состоит в том, что она принципиально не обращается в нуль.

Этот факт позволяет с общих позиций рассматривать контакт с окружением при $T \geq 0$, что существенно в тех ситуациях, когда одновременно имеют место флуктуации квантового и теплового происхождения. Данная величина принимается в качестве обобщенной “метки” теплового равновесия объекта, находящегося в контакте с кванто-термостатом.

Главное отличие (\hbar, k) -динамики от КСМ состоит в том, что в ней в условиях равновесия с кванто-термостатом состояние объекта описывается не матрицей плотности, а комплексной волновой функцией $\psi(q, \omega)$, амплитуда и фаза которой зависят от температуры. В координатном представлении она имеет вид

$$\psi(q, \omega) = [2\pi(\Delta q)^2]^{-1/4} \exp \left\{ -\frac{q^2}{4(\Delta q)^2} (1 - i\alpha) \right\}, \quad (2)$$

где $(\Delta q)^2$ – дисперсия координаты, α – коэффициент, определяющий фазу.

Одновременно в рамках (\hbar, k) -динамики нами был также введен новый макропараметр – эффективное воздействие на систему со стороны кванто-термостата как среднее от оператора кванто-теплового воздействия $\mathbb{J} = \hat{j}$:

$$\mathbb{J} = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\alpha^2 + 1} = \mathbb{J}^0 \sqrt{\alpha^2 + 1}. \quad (3)$$

Здесь $\mathbb{J}^0 = \hbar/2$ – предельное значение \mathbb{J} при кельвиновой температуре $T \rightarrow 0$, соответствующее чисто квантовому воздействию. В этом случае фазовый множитель α обращается в нуль, что соответствует частному случаю действительной волновой функции ψ . В общем случае температурная зависимость эффективного действия заключена в подкоренном выражении (3). С учетом $\varkappa = \hbar/2k_B$ и значения фазового множителя в формуле (3):

$$\alpha^2 \equiv \sinh^{-2} \left(\varkappa \frac{\omega}{T} \right),$$

эффективное воздействие \mathbb{J} (3) приобретает вид

$$\mathbb{J} = \frac{\hbar}{2} \coth \varkappa \frac{\omega}{T} = \frac{\hbar}{2} \coth \frac{\hbar\omega}{2k_B T}. \quad (4)$$

2. Эффективное воздействие как универсальная характеристика процессов переноса. Коэффициент самодиффузии

Прежде всего отметим, что через величину эффективного воздействия \mathbb{J} в равновесном случае

в соответствии с [2] выражаются наиболее важные термодинамические макропараметры – эффективная температура \mathbb{T} , эффективная внутренняя энергия \mathbb{U} и эффективная энтропия \mathbb{S} :

$$\mathbb{T} = \frac{\omega}{k_B} \mathbb{J}; \quad (5)$$

$$\mathbb{U} = \omega \mathbb{J}; \quad (6)$$

$$\mathbb{S} = -k_B \left(1 + \ln 2 \frac{\mathbb{J}}{\hbar} \right).$$

Введя при $T \rightarrow 0$ предельные значения \mathbb{S} и \mathbb{J} в виде $\mathbb{S}^0 = k_B$ и $\mathbb{J}^0 = \frac{\hbar}{2}$, что соответствует чисто квантовому воздействию, можно установить связь между эффективным действием и эффективной энтропией:

$$\mathbb{J} = \mathbb{S}^0 \left\{ 1 + \ln \frac{\mathbb{J}}{\mathbb{J}^0} \right\}. \quad (7)$$

В связи с этим за физическое определение универсальной константы \varkappa естественно было бы принять предельное значение отношения двух фундаментальных макроскопических величин – эффективного воздействия \mathbb{J} и эффективной энтропии \mathbb{S}

$$\varkappa = \frac{\hbar}{2k_B} \equiv \lim_{T \rightarrow 0} \frac{\mathbb{J}}{\mathbb{S}} = \frac{\mathbb{J}^0}{\mathbb{S}^0}. \quad (8)$$

Однако этим все не исчерпывается. Через эффективное действие \mathbb{J} , как было показано в [7], можно выразить и эффективные транспортные коэффициенты, характерные для неравновесной термодинамики. Тем самым, демонстрируется их стохастическая природа. Последнее наглядно видно на примере процесса самодиффузии, имеющего место в среде с неоднородной плотностью после установления равновесия по температуре.

Действительно, еще в теории броуновского движения при достаточно высоких температурах было показано [3], что в этом случае (при $t \gg \tau$) справедливо соотношение неопределенностей вида

$$(\Delta p) (\Delta q) = m D_T. \quad (9)$$

Здесь D_T – коэффициент чисто тепловой диффузии, причем для свободной микрочастицы $D_T = k_B T \tau / m$, где τ – время релаксации, а для броуновского осциллятора $D_T = k_B T / m \omega$ [4].

Как было показано в [5], соотношение неопределенностей Шредингера “импульс-координата” для квантового осциллятора в состоянии равновесия с теплым вакуумом имеет вид

$$(\Delta p) (\Delta q) = \mathbb{J} = \frac{\hbar}{2} \coth \left(\varkappa \frac{\omega}{T} \right). \quad (10)$$

Сопоставляя (9) и (10), этому соотношению придадим вид

$$(\Delta p) (\Delta q) = m \mathbb{D}. \quad (11)$$

Тогда величину

$$\mathbb{D} = \frac{\hbar}{2m} \coth \left(\varkappa \frac{\omega}{T} \right) \equiv \frac{\mathbb{J}}{m} \quad (12)$$

естественно назвать эффективным коэффициентом самодиффузии. Отметим, что величину $\hbar/2m$ ранее Нельсон [6] назвал квантовым коэффициентом диффузии $\hbar/2m = D_{qu}$, т.е. в ситуации контакта с холодным вакуумом, или, иными словами, в отсутствие теплового воздействия окружения.

Из (12) следует, что коэффициент \mathbb{D} приобретает физический смысл эффективного воздействия, отнесенного к единице массы. Предельные значения \mathbb{D} при высоких и низких кельвиновых температурах соответственно равны

$$\begin{aligned} \mathbb{D} \rightarrow D_T &= k_B T / m \omega; \\ \text{высокие температуры } k_B T &\gg \hbar \omega / 2 \\ \mathbb{D} \rightarrow D_{qu} &\equiv \frac{\hbar}{2m}; \end{aligned} \quad (13)$$

низкие температуры $k_B T \ll \hbar \omega / 2$.

Как было показано в [7], исходя из соотношения (12), через \mathbb{J} можно ввести и все остальные эффективные транспортные коэффициенты, такие как коэффициенты теплопроводности, сдвиговой вязкости и др., имеющие значение для неравновесных процессов. Таким образом, большинство транспортных коэффициентов может быть выражено через эффективный коэффициент самодиффузии \mathbb{D} , в принципе измеримый на опыте.

Что касается константы \varkappa , то при анализе конкретных экспериментов ее можно выражать через наблюдаемые транспортные коэффициенты соотношениями типа

$$\varkappa = \left(\frac{\mathbb{D}}{\mathbb{S}/m} \right)_{\min} = \left(\frac{\eta_{ef}}{\mathbb{S}/V} \right)_{\min} = \dots, \quad (14)$$

где \mathbb{S}/m – эффективная энтропия единицы массы, \mathbb{S}/V – эффективная энтропия единицы объема, η_{ef} – эффективный коэффициент сдвиговой вязкости.

3. Стандартная квантовая механика в гидродинамической форме

В нерелятивистской полевой форме стандартная квантовая механика (при $T = 0$) может быть получена из обращения в нуль вариации функционала действия [8]:

$$\mathcal{S} = \int_{t_1}^{t_2} dt \int dq \mathcal{L}_0[\psi^*; \psi]. \quad (15)$$

Здесь $\mathcal{L}_0[\psi^*; \psi]$ – плотность лагранжиана для одной бесспиновой частицы при $T = 0$, а $\psi(q, t)$ и $\psi^*(q, t)$ – волновая функция и комплексно сопряженная с ней функция, имеющие смысл независимых нерелятивистских полей. (Мы ограничиваемся одномерным случаем).

Очевидно, что функционал $\mathcal{L}_0[\psi^*; \psi]$ в общем случае следует выбрать в виде

$$\mathcal{L}_0[\psi^*; \psi] = \psi^*(q, t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} \right) \psi(q, t) - \psi^*(q, t) U(q) \psi(q, t), \quad (16)$$

где в круглых скобках справа стоит нерелятивистский предел оператора Клейна–Гордона, а оператор потенциальной энергии $U(q)$ характеризует энергию регулярного воздействия.

Независимое варьирование действия вида (16) по полю ψ^* приводит к условию

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \int dq \frac{\delta \mathcal{L}_0[\psi^*; \psi]}{\delta \psi} = \int_{t_1}^{t_2} dt \int dq \left(i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} - U(q) \psi \right) = 0 \quad (17)$$

ведущему к уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} + U(q) \psi. \quad (18)$$

Соответственно, комплексно сопряженное ему уравнение получается при варьировании действия

вида (16) по ψ и отличается от формулы (18) заменой i на $-i$ и ψ на ψ^* . Подчеркнем, что уравнения Шредингера для комплексных волновых функций ψ и ψ^* имеют смысл уравнений Лагранжа–Эйлера, причем в полномасштабной квантовой механике волновые функции всегда комплексны.

Представим теперь волновую функцию в виде

$$\psi(q, t) = \sqrt{\rho(q, t)} \exp\{i\theta(q, t)\}, \quad (19)$$

где $\rho(q, t) = |\psi(q, t)|^2$. Это выражение наряду с комплексно сопряженным ему выражением можно было бы подставить непосредственно в уравнения Шредингера для ψ и ψ^* и получить систему уравнений для функций $\rho(q, t)$ и $\theta(q, t)$, давно известную в литературе под названием квантовой механики в гидродинамической форме [8, 9].

Поскольку мы ставим целью построение модифицированной гидродинамики на основе микроописания, мы предлагаем иной подход к проблеме. Он диктует требование развить теорию изначально в лагранжевой формулировке. Поэтому начнем его с преобразования плотности лагранжиана \mathcal{L}_0 к переменным, наиболее приспособленным к гидродинамическому описанию. В качестве функциональных аргументов плотности лагранжиана вместо комплексных волновых функций ψ и ψ^* выберем две независимые вещественные функции – плотность вероятности ρ и фазу θ . По существу они близки к функциям плотности массы ρ_m и дрейфовой скорости $v \sim \frac{\partial \theta}{\partial q}$, характерным для стандартной гидродинамики.

Для этого в плотности лагранжиана (16) совершим замену аргументов, подставив в нее выражение (19) и соответствующее выражение для ψ^* . После подстановок получим

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_0[\psi; \psi^*] &= \mathcal{L}_0[\rho; \theta] = \\ &= -\hbar \frac{\partial \theta}{\partial t} \rho - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \theta}{\partial q} \right)^2 \rho - \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{\partial \rho}{\partial q} \right)^2 \frac{1}{\rho} - \\ &- U(q) \rho + i \frac{\hbar}{2} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{1}{2} \frac{\partial \rho}{\partial q} + i \rho \frac{\partial \theta}{\partial q} \right). \end{aligned} \quad (20)$$

Здесь член, содержащий $\frac{\partial \rho}{\partial t}$, можно не учитывать, поскольку в дальнейшем при варьировании действия \mathcal{S} вида (15) и по θ и по ρ он даст нулевой вклад. Последний член в (20) представляет собой полную производную по q , так что из определения $\mathcal{L}_0[\rho; \theta]$ его также можно исключить. Поэтому

окончательно в качестве выражения для плотности лагранжиана $\mathcal{L}_0[\rho; \theta]$ примем

$$\mathcal{L}_0[\rho; \theta] = -\hbar \frac{\partial \theta}{\partial t} \rho - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \theta}{\partial q} \right)^2 \rho - \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{\partial \rho}{\partial q} \right)^2 \frac{1}{\rho} - U(q)\rho. \quad (21)$$

Варьируя последовательно по переменным θ и ρ действие \mathbb{S} вида (15), в котором теперь $\mathcal{L}_0[\rho; \theta]$ имеет вид (21), получим уравнения для вещественных функций $\rho(q, t)$ и $\theta(q, t)$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q} \left(\rho \frac{\hbar}{m} \frac{\partial \theta}{\partial q} \right) = 0, \quad (22)$$

$$\hbar \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \theta}{\partial q} \right)^2 + U(q) - \frac{\hbar^2}{8m} \left[\frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial q} \right)^2 + 2 \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q} \right) \right] = 0. \quad (23)$$

Эти уравнения совпадают с уравнениями, которые могли бы быть получены для функций ρ и θ непосредственно из уравнений Шредингера. Однако теперь понятно, что они имеют смысл уравнений Лагранжа–Эйлера для действия \mathbb{S} вида (15) в переменных ρ и θ .

Традиционно считается, что уравнение (22) – это уравнение непрерывности для $\rho(q, t)$. В свою очередь, уравнение (23) с учетом того, что величина $\hbar \theta(q, t)$ имеет размерность действия, представляет собой аналог уравнения Гамильтона–Якоби. При этом член в квадратных скобках в формуле (23) иногда трактуют как некую дополнительную энергию квантовой природы $U_{\text{qu}}(q)$, исчезающую в квазиклассическом пределе при $\hbar \rightarrow 0$.

Разумеется, уравнения (22) и (23) для ρ и θ и уравнения Шредингера для ψ и ψ^* формально эквивалентны. Однако вывод уравнений квантовой механики в гидродинамической форме (22) и (23) непосредственно из принципа наименьшего действия является физически более предпочтительным для построения стохастической гидродинамики. Вместе с тем, для получения искомого результата остается открытым вопрос о форме плотности лагранжиана, в которой, по нашему мнению, должно быть последовательно учтено стохастическое воздействие окружения (кванто-термостата).

4. Квантовая самодиффузия в “холодном” вакууме

Чтобы выявить возможности для нужного нам обобщения $\mathcal{L}_0[\rho; \theta]$, рассмотрим сначала ситуацию холодного вакуума. Для этого придадим физический смысл второму и третьему членам справа в выражении (21). В соответствии с терминологией, введенной еще Колмогоровым [10] для марковских процессов в общей теории стохастических процессов и использованной Нельсоном [6] в его стохастической механике, величину

$$v \equiv \frac{\hbar}{m} \frac{\partial \theta}{\partial q} \quad (24)$$

будем называть дрейфовой скоростью. Соответственно, величину

$$u \equiv -D_{\text{qu}} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q} \quad (25)$$

назовем диффузионной скоростью в холодном вакууме и подчеркнем ее стохастическую квантовую природу.

При использовании скоростей v и u формулам (21)–(23) можно придать вид

$$\mathcal{L}_0[\rho, \theta] = -\hbar \frac{\partial \theta}{\partial t} \rho - \frac{m}{2} (v^2 + u^2) \rho - U \rho, \quad (21a)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q} (\rho v) = 0, \quad (22a)$$

$$\hbar \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{m}{2} v^2 + U - \frac{m}{2} \left[u^2 - \frac{\hbar}{m} \frac{\partial u}{\partial q} \right] = 0, \quad (23a)$$

открывающий возможности для обобщения.

Из формулы (22a) следует, что стандартное уравнение непрерывности (22) носит квазиклассический характер, ибо в нем плотность потока вероятности зависит только от дрейфовой скорости v , в то время как диффузионная скорость u , порождаемая стохастическим воздействием холодного вакуума, в нем не учитывается.

Напомним в связи с этим, что уравнение Фоккера–Планка:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q} (\rho V) = 0, \quad (26)$$

в которое входит полная скорость плотности потока вероятности

$$V = v + u, \quad (27)$$

представляет собой, согласно Колмогорову [10], наиболее общее уравнение непрерывности. Мы покажем, что оно позволяет описать приближение к состоянию теплового равновесия за счет самодиффузии, в том числе и в холодном вакууме.

Обращаем внимание, что входящая в выражение (21а) для $\mathcal{L}_0[\rho, \theta]$ комбинация $\frac{m}{2}(v^2 + u^2)$ представляет собой сумму независимых вкладов кинетических энергий дрейфового и диффузионного движений. В то же время поток вероятности зависит от полной скорости вида (27). В связи с этим для получения уравнения Фоккера–Планка в выражении (21а) напрашивается естественная замена $(v^2 + u^2)$ на V^2 , что позволит принять во внимание полное выражение для кинетической энергии, связанной с потоком вероятности. Таким образом, даже стандартная квантовая механика (при $T = 0$) допускает возможность обобщения.

Итак, обобщим плотность лагранжиана $\mathcal{L}_0[\rho, \theta]$ вида (21а), произведя соответствующую замену. Тогда получим

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{L}}_0[\rho, \theta] &= -\hbar \frac{\partial \theta}{\partial t} \rho - \frac{m}{2} V^2 \rho - U \rho = \\ &= \mathcal{L}_0[\rho; \theta] - m v u \rho = \mathcal{L}_0[\rho; \theta] + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial \theta}{\partial q} \frac{\partial \rho}{\partial q}. \end{aligned} \quad (28)$$

Варьирование по θ функционала действия \mathcal{S} вида (15) с $\tilde{\mathcal{L}}_0[\rho, \theta]$ автоматически приводит к уравнению Фоккера–Планка, с квантовым коэффициентом диффузии D_{qu} :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q}(\rho V) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q} \left(\rho \frac{\hbar}{m} \frac{\partial \theta}{\partial q} \right) - D_{\text{qu}} \frac{\partial^2 \rho}{\partial q^2} = 0. \quad (29)$$

В то же время варьирование S по ρ практически не меняет уравнения Гамильтона–Якоби, в котором по сравнению с (23а) появляется еще одно несущественное слагаемое $\frac{\hbar}{2} \frac{\partial v}{\partial q}$. В итоге аналог формулы (23а) имеет вид

$$\hbar \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{m}{2} v^2 + U - \frac{m}{2} \left(u^2 - \frac{\hbar}{m} \frac{\partial u}{\partial q} \right) + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial v}{\partial q} = 0. \quad (30)$$

Полученные уравнения (29) и (30) обобщают уравнения (22а) и (23а), позволяя последовательно учесть квантовое стохастическое воздействие холодного вакуума.

5. Самодиффузия

в кванто-термостате при $T \neq 0$

Применим теперь развитый выше подход к описанию самодиффузии при совместном учете квантовых и тепловых эффектов. С этой целью введем плотность лагранжиана $\tilde{\mathcal{L}}_T[\rho, \theta]$, зависящую от температуры, потребовав, чтобы при $T \rightarrow 0$ она переходила бы в выражение $\tilde{\mathcal{L}}_0[\rho, \theta]$ вида (28). Для этого достаточно в выражении (28) для диффузионной скорости заменить коэффициент диффузии D_{qu} на \mathbb{D} вида (8) и ввести в выражение для плотности лагранжиана дополнительный член $U_T(q)\rho$, учитывающий плотность энергии диффузионного давления за счет теплового стохастического воздействия окружения.

По нашим соображениям, выражение для U_T должно иметь вид, аналогичный множителю $-mu^2/2$ в холодном вакууме (21а). Однако оно должно быть модифицировано таким образом, чтобы $U_T \rightarrow 0$ при $T \rightarrow 0$. Мы вводим его следующим образом:

$$U_T(q) = -\frac{m}{2} \left[\frac{\alpha}{\Upsilon} \right]^2 u_{\text{ef}}^2 = -\frac{\hbar^2}{8m} \alpha^2 \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q} \right)^2, \quad (31)$$

где использованы обозначения

$$\alpha^2 \equiv \sinh^{-2} \varkappa \frac{\omega}{T}, \quad \Upsilon = \coth \left(\varkappa \frac{\omega}{T} \right),$$

а также

$$u_{\text{ef}} \equiv -\mathbb{D} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q}$$

– эффективная диффузионная скорость в теплом вакууме. Эта величина определяется аналогично скорости u в (25), но выразится теперь через эффективный коэффициент диффузии \mathbb{D} вида (12).

Таким образом, в качестве плотности лагранжиана при $T \neq 0$ выберем выражение

$$\tilde{\mathcal{L}}_T(\rho, \theta) = -\hbar \frac{\partial \theta}{\partial t} \rho - \frac{m}{2} (v + u_{\text{ef}})^2 \rho - U \rho - U_T \rho. \quad (32)$$

Для удобства дальнейшего варьирования перепишем выражение (32) в явном виде через случайные функции θ и ρ :

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{L}}_T(\rho, \theta) &= -\hbar \frac{\partial \theta}{\partial t} \rho - \\ &- \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \theta}{\partial q} \right)^2 \rho - \frac{\hbar^2}{2m} \Upsilon \frac{\partial \theta}{\partial q} \frac{\partial \rho}{\partial q} + \frac{\hbar^2}{8m} \Upsilon^2 \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial q} \right)^2 \right\} - \end{aligned}$$

$$-U\rho - \frac{\hbar^2}{8m} \alpha^2 \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial q} \right)^2. \quad (33)$$

Варьирование действия \mathcal{S} с $\tilde{\mathcal{L}}_T$ вида (33) по θ вновь приводит к уравнению Фоккера–Планка, аналогичному (29), но с заменой в нем D_{qu} на эффективный коэффициент диффузии \mathbb{D}_{ef} :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q} \left(\rho \frac{\hbar}{m} \frac{\partial \theta}{\partial q} \right) - \mathbb{D} \frac{\partial^2 \rho}{\partial q^2} = 0. \quad (34)$$

Соответственно, варьирование \mathcal{S} по ρ приводит к уравнению Гамильтона–Якоби, обобщенному на случай стохастического воздействия теплового вакуума:

$$\begin{aligned} & \hbar \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \theta}{\partial q} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \Upsilon \frac{\partial^2 \theta}{\partial q^2} + U(q) - \\ & - \frac{\hbar^2}{8m} \Xi_T \left[\frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial q} \right)^2 + 2 \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q} \right) \right] = 0, \end{aligned} \quad (35)$$

где для удобства введены обозначения

$$\Xi_T = 2\Upsilon^2 - 1 = 2 \coth^2 \left(\varkappa \frac{\omega}{T} \right) - 1;$$

при этом

$$\Xi_T \Big|_{T=0} \equiv \Xi_0 = 1. \quad (36)$$

Полученные уравнения (34) и (35) обобщают, в свою очередь, уравнения (29) и (30), позволяя последовательно учесть стохастическое воздействие теплового вакуума. Оно косвенно представлено в величинах \mathbb{D} , Ξ_T и Υ , входящих в эти уравнения и зависящих от мировых постоянных \hbar и k_B . Физически это означает, что одновременно принимаются во внимание оба типа стохастического воздействия окружения: квантовое, характеризующееся постоянной Планка \hbar , и тепловое, характеризующееся постоянной Больцмана k_B .

Совокупность уравнений Фоккера–Планка (34) и Гамильтона–Якоби (35), разумеется, является нетривиальным обобщением уравнения Шредингера. Их дальнейшее использование возможно двумя путями. Можно непосредственно решать эту систему для неизвестных разнородных функций ρ и θ . Как нами было недавно показано [12], это позволяет получить неравновесные волновые функции, амплитуды и фазы которых зависят от температуры, и с их помощью вычислять макропараметры в неравновесных состояниях.

Но эти уравнения также можно модифицировать, придав им форму уравнений двухскоростной стохастической гидродинамики для характерных скоростей v и u .

6. Одномерная модель двухскоростной стохастической гидродинамики

Для модификации уравнений (34) и (35) придадим им форму уравнений для однородных переменных – скоростей v и u_{ef} , характерных для любых марковских процессов. В этом случае получим систему уравнений двухскоростной стохастической гидродинамики, обобщающую уравнения стохастической механики Нельсона на случай квантово-теплового воздействия окружения.

Покажем теперь, что уравнения (34) и (35) действительно позволяют получить уравнения стохастической гидродинамики в наиболее удобной форме. С учетом изложенного выше, пока речь идет только об одномерной модели. Чтобы осуществить соответствующее преобразование, прежде всего, придадим уравнению непрерывности (34) форму уравнения для диффузионной скорости, которую, согласно (25), можно записать в виде

$$u_{ef} = -\mathbb{D} \frac{\partial \ln \rho}{\partial q}.$$

С этой целью преобразуем сначала уравнение (34), введя в него явно v и u_{ef} , а затем домножим его на $(-\mathbb{D}/\rho)$:

$$-\frac{\mathbb{D}}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} - \frac{\mathbb{D}}{\rho} \left[\rho \frac{\partial(v + u_{ef})}{\partial q} + \frac{\partial \rho}{\partial q} (v + u_{ef}) \right] = 0. \quad (37)$$

Далее продифференцируем результат по q , изменим порядок дифференцирования в первом члене, учтем, что $\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q} = \frac{\partial}{\partial \rho} \ln \rho$, и введем всюду u_{ef} . В результате получим

$$\frac{\partial u_{ef}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q} (v u_{ef}) + \frac{\partial}{\partial q} u_{ef}^2 - \mathbb{D} \frac{\partial^2}{\partial q^2} (v + u_{ef}) = 0. \quad (38)$$

Ему можно придать наиболее элегантный вид, образовав типичную для гидродинамики субстанциональную производную от диффузионной скорости u_{ef} :

$$\begin{aligned} \frac{du_{ef}}{dt} & \equiv \frac{\partial u_{ef}}{\partial t} + u_{ef} \frac{\partial u_{ef}}{\partial q} = \\ & = -\frac{\partial}{\partial q} (v u_{ef}) - \frac{\partial}{\partial q} \frac{u_{ef}^2}{2} + \mathbb{D}_{ef} \frac{\partial^2}{\partial q^2} (v + u_{ef}). \end{aligned} \quad (39)$$

Чтобы придать явную гидродинамическую форму уравнению (35), перепишем его также в переменных v и u_{ef} :

$$\begin{aligned} & \hbar \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{m}{2} v^2 + \frac{\hbar}{2} \Upsilon \frac{\partial v}{\partial q} + U(q) - \\ & - \frac{m}{2} \Xi_T \left(u_{\text{ef}}^2 - \frac{\hbar}{m} \frac{\partial u_{\text{ef}}}{\partial q} \right) = 0. \end{aligned} \quad (40)$$

Для исключения функции θ продифференцируем уравнение (40) по q , изменим в первом члене порядок дифференцирования и введем в нем явно функцию v согласно (24). В итоге, образовав в нем также субстанциональную производную от дрейфовой скорости v , получим:

$$\begin{aligned} \frac{dv}{dt} & \equiv \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial q} \right) = -\frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial q} + \\ & + \Xi_T \frac{\partial}{\partial q} \frac{u_{\text{ef}}^2}{2} - \frac{\hbar}{2m} \left(\Xi_T \frac{\partial^2 u_{\text{ef}}}{\partial q^2} + \Upsilon \frac{\partial v^2}{\partial q^2} \right). \end{aligned} \quad (41)$$

Напомним, что в качестве скорости v в эти уравнения входит только величина Δv , порождаемая стохастическим воздействием. В рассматриваемом нами случае, как и при $T = 0$, выражения для ρ и θ относятся к волновым функциям тепловых коррелированнокогерентных состояний, в которых показатель экспоненты зависит от q^2 [2, 13]. Отсюда следует, что последние члены в уравнениях (39), (41) и (42), содержащие вторые производные от $v \equiv \Delta v$ и u_{ef} по q , обращаются в нуль.

В результате система уравнений для одномерной модели двухскоростной стохастической гидродинамики в общем случае принимает вид

$$\begin{cases} \frac{du_{\text{ef}}}{dt} \equiv \frac{\partial u_{\text{ef}}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q} \frac{u_{\text{ef}}^2}{2} = -\frac{\partial}{\partial q} (v u_{\text{ef}}) - \frac{\partial}{\partial q} \frac{u_{\text{ef}}^2}{2}; \\ \frac{dv}{dt} = -\frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial q} + \Xi_T \frac{\partial}{\partial q} \frac{u_{\text{ef}}^2}{2}. \end{cases} \quad (42)$$

Отметим, что в общем случае предложенные нами уравнения (42) справедливы при любой температуре.

В обоих уравнениях данной системы учитывается самодиффузия в теплом вакууме, характеризуемая коэффициентом D_{ef} , входящим в u_{ef} . Кроме того, в правую часть нижнего уравнения системы, помимо градиента классического потенциала $U(q)$, входит градиент плотности энергии диффузионного давления, отражающий стохастическое

воздействие кванто-термостата, в том числе и при $T = 0$. Аналогичный вклад энергии диффузионного давления кванто-термостата входит и в правую часть верхнего уравнения (42), причем он не исчезает даже при $v = 0$.

Для сопоставления с уравнениями стохастической механики Нельсона:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q} (vu); \\ \frac{dv}{dt} = -\frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial q} + \frac{\partial}{\partial q} \frac{u^2}{2}, \end{cases} \quad (43)$$

которые справедливы при $T = 0$, рассмотрим систему уравнений (42) в случае холодного вакуума ($T = 0$).

В этом случае u_{ef} переходит в u . Кроме того, для удобства сравнения в верхнем уравнении этой системы мы возвращаемся к частной производной по времени, для чего в формуле (42) мы объединяем подобные члены. В результате имеем

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q} (vu) - \frac{\partial}{\partial q} u^2; \\ \frac{dv}{dt} = -\frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial q} + \frac{\partial}{\partial q} \frac{u^2}{2}. \end{cases} \quad (44)$$

Как видно, нижние уравнения систем (43) и (44) полностью идентичны. Однако между данными системами уравнений в целом имеется существенное отличие, заметное при сопоставлении верхних уравнений. Как и ожидалось, оно связано с тем, что в нашей теории принимается во внимание самодиффузия, имеющая место даже в холодном вакууме. Вследствие этого в уравнение для диффузионной скорости входит градиент плотности энергии диффузионного давления.

Ниже будет проведено сопоставление решений систем уравнений (43) и (44) в целях установления важных физических различий ними, имеющих место при $T = 0$. Фактически, представляет интерес выяснить, как влияет учет самодиффузии в холодном вакууме ($T = 0$) в уравнениях (44) на вид получаемых решений по сравнению с решениями системы (43).

7. Исследование решений уравнений (43) и (44)

Отметим, что как было показано в п. 6, система (42) получена с учетом самодиффузии при прои-

звольных температурах, в то время как (44) справедлива только при $T = 0$. Поэтому корректному сопоставлению можно подвергнуть лишь системы уравнений (43), представляющей собой частный случай (42) для $T = 0$, и (44).

7.1. Аппарат для определения класса уравнений

Отметим, что полная производная

$$\frac{dv}{dt} = \frac{\partial v}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial v}{\partial t} = v \frac{\partial v}{\partial q} + \frac{\partial v}{\partial t}, \quad (45)$$

и перепишем уравнения (43) и (44) полностью в частных производных, обозначив для удобства $\frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial q} = \alpha(q)$. Тогда системы уравнений (43) и (44) примут вид соответственно

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial q} + u \frac{\partial v}{\partial q} &= 0, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial q} - u \frac{\partial u}{\partial q} &= \alpha(q), \end{aligned} \quad (46)$$

и

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + (v + 2u) \frac{\partial u}{\partial q} + u \frac{\partial v}{\partial q} &= 0, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial q} - u \frac{\partial u}{\partial q} &= \alpha(q), \end{aligned} \quad (47)$$

где u – диффузионная скорость, v – дрейфовая скорость. Отметим, что основное отличие системы (46) от системы (47) состоит в том, что при выводе последней использовалось предположение о самодиффузии.

В данной работе мы остановимся только на исследовании однородных системы (46) и (47) и положим $\alpha(q) = 0$. Важнейшим обстоятельством, определяющим решение данных уравнений, является установление типа – эллиптического, гиперболического или параболического, к которому относится уравнение. Для решения гиперболических уравнений, как известно, используется понятие характеристики – интеграла некоторого характеристического уравнения. Эллиптический оператор не имеет характеристик в вещественной области и эллиптическим дифференциальным уравнениям в физике, вообще говоря, соответствуют стационарные равновесные состояния. Таким образом, установление класса, к которому относится

соответствующая система, позволяет сделать заключение о характере решений уравнения и сопоставить им определенную физическую интерпретацию.

Исходя из изложенного выше, приступим к исследованию. Уравнения (46) и (47) представляют собой системы квазилинейных уравнений первого порядка в частных производных относительно двух неизвестных функций $u(t, q)$ и $v(t, q)$. Поэтому, следуя [14], представим каждое из уравнений в системах (46) и (47) в виде

$$\begin{aligned} L_1 &= A_1 u_t + B_1 u_q + C_1 v_t + D_1 v_q, \\ L_2 &= A_2 u_t + B_2 u_q + C_2 v_t + D_2 v_q, \end{aligned} \quad (48)$$

где A_i, B_i, C_i, D_i – известные функции переменных $t, q, u, v, i = 1, 2$. Положим, что все рассматриваемые функции непрерывны и имеют непрерывные производные необходимого порядка. Известно, что линейная комбинация $a f_x + b f_y$ частных производных функции двух переменных $f(x, y)$ есть производная в данном направлении, заданном отношением $\frac{dx}{dy} = \frac{a}{b}$. Если $x(l), y(l)$ представляют кривую с $\frac{x_l}{y_l} = \frac{a}{b}$, то $a f_x + b f_y$ есть производная функции f вдоль этой кривой. Данное обстоятельство позволяет нам элегантно перейти от систем (46) и (47) в частных производных к исследованию алгебраических уравнений.

Рассмотрим такие функции $u(t, x), v(t, x)$, для которых коэффициенты в дифференциальных уравнениях (48) зависят только от t и x . Найдем такую линейную комбинацию

$$L = \lambda_1 L_1 + \lambda_2 L_2, \quad (49)$$

чтобы в дифференциальном выражении L были производные только по одному направлению. Такое направление, зависящее как от точки (t, x) , так и от значений функций $u(t, x)$ и $v(t, x)$ в этой точке, называется характеристическим. Пусть это направление задается отношением $t_l : x_l$. Тогда, как отмечено выше, условие того, что в дифференциальном выражении L функции $u(t, x), v(t, x)$ дифференцируются в этом же направлении, выглядит следующим образом

$$\frac{\lambda_1 A_1 + \lambda_2 A_2}{\lambda_1 B_1 + \lambda_2 B_2} = \frac{\lambda_1 C_1 + \lambda_2 C_2}{\lambda_1 D_1 + \lambda_2 D_2} = \frac{t_l}{x_l}, \quad (50)$$

так как коэффициенты при производных u_t, u_x и v_t, v_x в выражении L определяются соответствующе-

щими членами в пропорциях (50). Умножив выражение (49) на t_l получим

$$\begin{aligned} Lt_l &= (\lambda_1 A_1 + \lambda_2 A_2)u_t t_l + (\lambda_1 B_1 + \lambda_2 B_2)u_q t_l + \\ &+ (\lambda_1 C_1 + \lambda_2 C_2)v_t t_l + (\lambda_1 D_1 + \lambda_2 D_2)v_q t_l = \\ &= (\lambda_1 A_1 + \lambda_2 A_2)(u_l - u_q q_l) + (\lambda_1 B_1 + \lambda_2 B_2)u_q t_l + \\ &+ (\lambda_1 C_1 + \lambda_2 C_2)(v_l - v_q q_l) + (\lambda_1 D_1 + \lambda_2 D_2)v_q t_l = \\ &= (\lambda_1 A_1 + \lambda_2 A_2)u_l + (\lambda_1 C_1 + \lambda_2 C_2)v_l - \\ &- [(\lambda_1 A_1 + \lambda_2 A_2)q_l - (\lambda_1 B_1 + \lambda_2 B_2)t_l]u_q - \\ &- [(\lambda_1 C_1 + \lambda_2 C_2)q_l - (\lambda_1 D_1 + \lambda_2 D_2)t_l]v_q = \\ &= (\lambda_1 A_1 + \lambda_2 A_2)u_l + (\lambda_1 C_1 + \lambda_2 C_2)v_l, \end{aligned} \quad (51)$$

так как в силу (48)

$$\begin{aligned} (\lambda_1 A_1 + \lambda_2 A_2)q_l - (\lambda_1 B_1 + \lambda_2 B_2)t_l &= \\ = (\lambda_1 C_1 + \lambda_2 C_2)q_l - (\lambda_1 D_1 + \lambda_2 D_2)t_l &= 0. \end{aligned} \quad (52)$$

Аналогично при умножении L на q_l получим

$$Lq_l = (\lambda_1 B_1 + \lambda_2 B_2)u_l + (\lambda_1 D_1 + \lambda_2 D_2)v_l. \quad (53)$$

Если функции $u(t, q)$, $v(t, q)$ являются решениями системы (48) и выражение L имеет производную в направлении l , заданном отношением $t_l : q_l$, то из (50) легко получить систему двух линейных однородных алгебраических уравнений относительно λ_1 и λ_2

$$\begin{aligned} \lambda_1(A_1 q_l - B_1 t_l) + \lambda_2(A_2 q_l - B_2 t_l) &= 0, \\ \lambda_1(C_1 q_l - D_1 t_l) + \lambda_2(C_2 q_l - D_2 t_l) &= 0. \end{aligned} \quad (54)$$

Система (54) имеет нетривиальное решение, если она имеет определитель, равный нулю, т.е.

$$\begin{vmatrix} A_1 q_l - B_1 t_l & A_2 q_l - B_2 t_l \\ C_1 q_l - D_1 t_l & C_2 q_l - D_2 t_l \end{vmatrix} = 0, \quad (55)$$

что удобно записать в виде квадратичной формы

$$at_l^2 - 2bt_l q_l + cq_l^2 = 0, \quad (56)$$

где

$$a = [BD], \quad 2b = [AD] + [BC],$$

$$c = [AC], \quad [XY] = X_1 Y_2 - X_2 Y_1.$$

В зависимости от знака детерминанта формы (56) можно классифицировать уравнения следующим образом:

1. Если $b^2 - ac < 0$, то квадратичная форма (56) не равна нулю ни при каких вещественных t_l , q_l и, следовательно, не существует никакого действительного характеристического направления, и система дифференциальных уравнений является эллиптической.

2. Если $b^2 - ac > 0$, то в каждой точке имеются два характеристических направления, заданных отношением $t_l : q_l$, которые соответствуют двум различным корням λ_1 и λ_2 квадратичной формы (56). В этом случае система дифференциальных уравнений является гиперболической.

3. В том случае, когда $b^2 - ac = 0$, выражение (56) имеет один корень кратности два и имеет место одно вырожденное направление, соответствующее этому корню, и система дифференциальных уравнений является параболической.

7.2. Исследование уравнений (46) и (47)

Исходя из изложенного, проанализируем класс системы уравнений Нельсона (46). Для данной системы значения коэффициентов имеют вид:

$$\begin{aligned} A_1 &= 1, \quad B_1 = v, \quad C_1 = 0, \quad D_1 = u, \\ A_2 &= 0, \quad B_2 = -u, \quad C_2 = 1, \quad D_2 = v, \end{aligned} \quad (57)$$

откуда следует, что

$$b^2 - ac = -u^2 < 0.$$

Таким образом, гидродинамическая система уравнений Нельсона является эллиптической и непригодна для исследования эволюции флуктуаций при квантово-механическом описании системы.

Для системы (47) коэффициенты имеют несколько иной вид:

$$\begin{aligned} A_1 &= 1, \quad B_1 = 2u + v, \quad C_1 = 0, \quad D_1 = u, \\ A_2 &= 0, \quad B_2 = -u, \quad C_2 = 1, \quad D_2 = v, \end{aligned} \quad (58)$$

что приводит к

$$b^2 - ac = 0.$$

Последнее свидетельствует о том, что система уравнений (47) является параболической, т.е. системой эволюционного типа и может, следовательно, использоваться для описания эволюции возмущений, возникающих при флуктуациях.

Найдем характеристическое направление для системы (47). Согласно изложенному выше, образуем линейную комбинацию из двух уравнений этой системы и потребуем, чтобы она содержала производные только в одном направлении u_l , v_l от функций $u(q, t)$ и $v(q, t)$, заданном посредством (t_l, q_l) :

$$L = u_t + (2u + v - \lambda u)u_q + \lambda v_t(u + \lambda v)v_q = 0. \quad (59)$$

Тогда согласно (50), условия, определяющие направление (t_l, q_l) , выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} q_l &= (2u + v - \lambda u)t_l, \\ \lambda q_l &= (u + \lambda v)t_l, \end{aligned} \quad (60)$$

откуда

$$(\lambda - 1)^2 = 0. \quad (61)$$

Следовательно, в задаче (47) существует одно характеристическое направление, определяемое условием

$$q_l = (u + v)t_l. \quad (62)$$

Из (60) – (62) получаем характеристическое уравнение для u и v

$$u_l + v_l = 0. \quad (63)$$

Смысл уравнения (62) заключается в том, что характеристика в плоскости (q, t) представляет движение возможных возмущений, скорость которых

$$\frac{dq}{dt} = u + v \quad (64)$$

складывается из дрейфовой и диффузионной скорости.

В контексте использования данной системы имеется в виду следующее обстоятельство. Флуктуации макропараметров, например, температуры, плотности, давления, непременно вызывают возмущения переменных u и v в уравнениях гидродинамики. Эволюцию этих возмущений можно описывать и исследовать с помощью системы уравнений (47).

7.3. Численное моделирование решений уравнений (46) и (47)

Приведенные соображения нами проиллюстрированы с помощью численного моделирования решений систем (46) и (47). Модельным уравнением для этих систем является записанное в векторной форме уравнение переноса

$$\frac{\partial y}{\partial t} + A(y) \frac{\partial y}{\partial q} = f, \quad (65)$$

где $y = (u, v)^T$, $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ – матрица системы, $f \in \mathbb{R}^2$. Для систем (46) и (47) рассмотрим задачу Коши:

$$\begin{aligned} y(q, 0) &= y_0(q), \\ q &\in \mathbb{R}, \quad t > 0. \end{aligned}$$

на вещественной прямой. Для решения задачи на плоскости (q, t) использовалась сетка

$$\begin{aligned} \omega_{h\tau} &= \omega_h \times \omega_\tau, \\ \omega_h &= \{q_k = kh, k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots\}, \\ \omega_\tau &= \{t_n = n\tau, n = 0, 1, 2, \dots\} \end{aligned}$$

с шагом h по q и с шагом τ по t . Решение задачи исследовалось с помощью неявной трехслойной схемы

$$\frac{3y_k^{n+1} - 4y_k^n + y_k^{n-1}}{2\tau} = A(y) \frac{y_{k+1}^{n+1} - y_{k-1}^{n+1}}{2h} + \varphi, \quad (66)$$

имеющей порядок аппроксимации $O(\tau^2 + h^2)$. Задача (65) решалась итерационным методом. Покажем, что схема (66) абсолютно устойчива. Для однородного скалярного уравнения

$$\frac{\partial y}{\partial t} + a(y) \frac{\partial y}{\partial q} = 0,$$

ищем решение задачи (66) в виде

$$y_k^n = \eta^n e^{ikh\theta}, \quad (67)$$

где $i = \sqrt{-1}$, $\theta \in \mathbb{R}$. Подставляя (67) в уравнение

$$\frac{3y_k^{n+1} - 4y_k^n + y_k^{n-1}}{2\tau} = a(y) \frac{y_{k+1}^{n+1} - y_{k-1}^{n+1}}{2h},$$

получаем после несложных преобразований уравнение относительно η

$$\mu\eta^2 - 4\eta + 1 = 0, \quad (68)$$

где $\mu = 3 + 2a\gamma i \sin \theta$, $\gamma = \frac{\tau}{h}$.

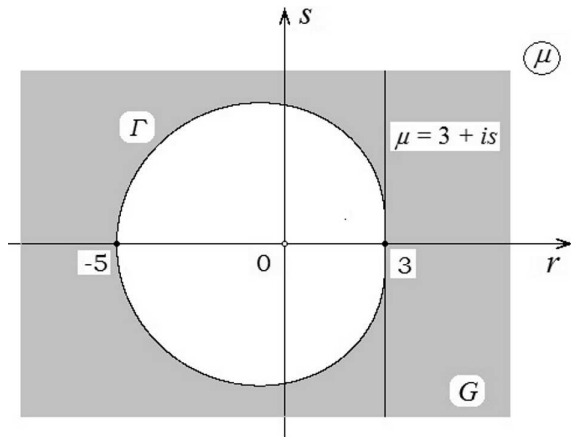


Рис. 1. Граница устойчивости схемы (66)

Найдем множество точек G комплексной плоскости $\mu = r + is$, для которых корни уравнения (68) не превосходят по модулю единицу. Границей области G является множество таких точек μ , для которых $|\eta| < 1$. Выразим из уравнения (68) параметр μ через переменную η :

$$\mu = \frac{4}{\eta} - \frac{1}{\eta^2}.$$

Очевидно, что если $|\eta| = 1$, то положив $\eta = e^{-i\varphi}$, получим

$$\mu = 4e^{i\varphi} - e^{2i\varphi}.$$

При изменении аргумента φ от 0 до 2π точки μ описывают замкнутую кривую Γ , уравнение которой на плоскости $\mu = r + is$ удобно представить в параметрическом виде

$$\begin{aligned} r &= 4 \cos \varphi - \cos 2\varphi, \\ s &= 4 \sin \varphi - \sin 2\varphi. \end{aligned} \tag{69}$$

Из (69) видно, что кривая Γ симметрична относительно вещественной оси r . Она пересекает ось r в точках $\mu(0) = 3$, $\mu(\pi) = -5$. В этих точках производные

$$\frac{ds}{dr} = \frac{\cos 2\varphi - \cos 2\varphi}{2 \sin \varphi - \sin 2\varphi}, \quad \frac{d^2s}{dr^2} = \frac{6 \sin^2 \frac{\varphi}{2}}{(2 \sin \varphi - \sin 2\varphi)^3}$$

не определены. Причем вторая производная кривой Γ отрицательна при $0 < \varphi < \pi$ и положительна при $\pi < \varphi < 2\pi$. Это свидетельствует о том, что замкнутая кривая Γ выпукла вверх в верхней

полуплоскости μ и выпукла вниз в нижней полуплоскости. Следовательно, область, заключенная внутри замкнутой кривой Γ , является выпуклой. При этом прямая $\mu = 3 + is$ касается кривой Γ в точке $\mu = 3$. Остальные точки этой прямой лежат в области, расположенной снаружи этой кривой Γ . Покажем, что в этой области выполняется условие $|\eta| < 1$ и множество точек, лежащих снаружи кривой Γ является областью устойчивости схемы (66).

Действительно, рассмотрим решение уравнения

$$(3 + is)\eta^2 - 4\eta + 1 = 0,$$

при $0 < s < 1$. Тогда один из корней

$$\eta = \frac{2 + \sqrt{1 - is}}{3 + is},$$

соответствующий максимальному значению модуля $|\eta|$, можно записать в виде

$$\eta = \frac{(3 - \frac{is}{2})(3 - is)}{9 + s^2} + O(s).$$

Модуль этого значения

$$\begin{aligned} |\eta| &= \frac{\sqrt{81 + \frac{45s^2 + s^4}{4}}}{9 + s^2} = \\ &= \sqrt{1 - \frac{27s^2 + s^4}{4(9 + s^2)}} = 1 - O(s^2) < 1. \end{aligned}$$

Таким образом, множество точек $\mu = 3 + 2a\gamma i \times \sin \theta$ полностью лежит в области устойчивости, где $|\eta| \leq 1$. Следовательно схема (66) является абсолютно устойчивой и не зависит от величины $\gamma = \frac{\tau}{h}$. Вид области устойчивости G показан на рис. 1.

При численном моделировании исследовалось решение при некотором возмущении, задаваемом в начальном условии в окрестности точки $q = 0$, одной из переменных исходного однородного начального условия. Это возмущение в начальном условии моделирует результат флуктуации макропараметра физической системы. Вычисления, выполненные численно по предложенной неявной схеме, показали следующий результат. Любое, даже сколь угодно малое возмущение в системе уравнений Нельсона приводит к неограниченному росту переменных u и v . Это есть следствие того, что

уравнения Нельсона имеют эллиптический тип и предназначены для описания стационарных процессов, таких как обтекание тел потоком, задач электростатики, стационарных задач теории гравитации и др.

При решении системы уравнений (47) получено решение вида бегущей волны возмущения по пространственной координате. При этом наряду с перемещением возмущения наблюдается эволюция самого возмущения. На рисунке показаны численные решения системы (47) для различных моментов времени: $a - t = 0$, $b - t = \tau$, $c - t = 20\tau$, $d - t = 50\tau$, где τ – шаг интегрирования по времени.

8. Заключение и обсуждение результатов

Впервые идея использования в квантовой теории плотности лагранжиана $\mathcal{L}[\rho; \theta]$ была, по-видимому, высказана Феньешем [11]. Из предложенного им выражения следовало уравнение Фоккера–Планка, содержащее полную скорость потока вероятности V с коэффициентом диффузии либо D_{qu} , либо D_T . Однако обобщенный коэффициент диффузии D_{ef} им не вводился. Заметим, что в этой работе было получено иное равнение движения типа Гамильтона–Якоби. Более того, в этой работе утверждалось, что полученная система уравнений для функций ρ θ полностью эквивалентна уравнениям Шредингера для функций ψ и ψ^* , несмотря на то, что уравнение Фоккера–Планка в отличие от уравнения Шредингера приводит к необратимости.

В нашем подходе в отличие от [11] были последовательно учтены квантово-тепловые флуктуации и плотность энергии диффузионного давления, связанные со стохастическим воздействием окружения (кванто-термостата) при $T \geq 0$. В конечном итоге уравнениям Фоккера–Планка и Гамильтона–Якоби нами была придана форма системы уравнений (42) для одномерной модели двухскоростной стохастической гидродинамики. В них коэффициент самодиффузии определяется эффективным воздействием окружения, зависящим от фундаментальной константы $\varkappa = \frac{\hbar}{2k_B}$.

По нашему мнению, на этом пути в дальнейшем можно построить полномасштабную стохастическую гидродинамику с учетом не только самодиффузии как таковой, но и сдвиговой вязкости, и затем применить ее к описанию таких интересных

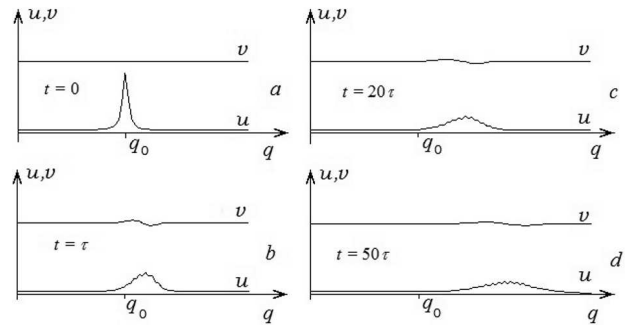


Рис. 2. Результаты численного исследования системы (47)

сред, как nearly perfect fluids (NPF). Для этого, фактически, нужно перейти от нижнего уравнения из (42) для дрейфовой скорости к уравнению, представляющему собой обобщение уравнения Навье–Стокса на случай учета самодиффузии.

Из проведенного анализа следует, что эффективный коэффициент самодиффузии $\mathbb{D}_{ef} = \mathbb{J}/m$, по-видимому, является наиболее адекватной характеристикой явлений переноса, существенной для описания диссипативных процессов в NPF. Сегодня появилась возможность его экспериментального определения путем изучения диффузии массивных кварков в кварк-глюонной плазме, получаемой при столкновении тяжелых ионов.

Численный анализ поведения решений частного случая системы (42) в виде (44), справедливой при $T = 0$, показал, что данные уравнения иллюстрируют релаксацию возмущений. Таким образом, самодиффузия может рассматриваться как гидродинамический механизм релаксации квантово-тепловых флуктуаций. Исследование поведения решений системы (42) в общем случае предполагается выполнить позже.

Таким образом, мы полагаем, что гидродинамический подход к квантовой теории, предложенный в данной работе, принципиально позволяет исследовать квантово-тепловые флуктуации на основе использования полученных гидродинамических уравнений.

Благодарим Н.Ф. Шульгу, И.М. Мрыглода, А.Г. Загороднего, И.В. Воловича, Н.М. Плакиду и Ю.П. Рыбакова, а также участников руководимых ими научных семинаров в Киеве, Харькове, Самаре и Москве за плодотворное обсуждение изложенных выше результатов.

Считаем своим долгом отметить, что исходный замысел, постановка задачи и ключевые идеи данной работы были предложены нашим соавтором А.Д. Сухановым, светлой памяти которого посвящена данная статья.

1. D. Forster, *Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry, and Correlation Functions* (Perseus, Cambridge, MA, 1990).
2. A.D. Sukhanov and O.N. Golubjeva, *Teor. Mat. Fiz.* **160**, 369 (2009).
3. R. Fürth, *Z. Phys.* **81**, 143 (1933).
4. A.D. Sukhanov, *Teor. Mat. Fiz.* **139**, 129 (2004).
5. A.D. Sukhanov, *Teor. Mat. Fiz.*, **148**, 295 (2006).
6. E. Nelson, *Dynamical Theory of Brownian Motion* (Princeton Univ. Press, Princeton, 1967).
7. *Thermodynamics*, edited by M. Tadashi (InTech, 2011).
8. R. Feynman, P. Leiton, and M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics, Vol. 3: Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, Reading, MA, 1964).
9. D.I. Blokhintsev, *Quantum Mechanics* (Reidel, Dordrecht, 1964).
10. A.N. Kolmogoroff, *Math. Ann.* **104**, 415 (1931); **108**, 149 (1933).
11. I. Fenyés, *Zs. Math.* **132**, 81 (1952).
12. O.N. Golubjeva and A.D. Sukhanov, *Part. Nucl. Lett.* **8**, 1 (2011).
13. O.N. Golubjeva and A.D. Sukhanov, *Canad. J. Phys.* **92**, 259 (2014).
14. R. Courant and K.O. Friedrichs, *Supersonic Flow and Shock Waves* (Interscience Publishers, New York, 1948).

Одержано 07.12.14

О.Н. Голубева, С.В. Сидоров, В.Г. Бар'яжтар

ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ РЕЛАКСАЦІЇ КВАНТОВО-ТЕПЛОВИХ ФЛУКТУАЦІЙ

Резюме

Пропонується узагальнення рівнянь квантової механіки в гідродинамічній формі шляхом введення в густину лагранжиана членів, що враховують дифузійну швидкість при нульовій і кінцевих температурах, а також енергію дифузійного тиску теплового вакууму. На цій основі для моделі одновимірної гідродинаміки будується система рівнянь, аналогічних рівнянням Ейлера, але з урахуванням квантових і теплових ефектів. Вони являють собою узагальнення рівнянь стохастичної механіки Нельсона. Чисельний аналіз поведінки рішень даної системи дозволяє зробити висновок про її придатність для опису процесу релаксації квантово-теплових флуктуацій.

O.N. Golubjeva, S.V. Sidorov, V.G. Bar'yakhtar

NUMERICAL SIMULATION OF RELAXATION OF QUANTUM THERMAL FLUCTUATIONS

Summary

A generalization of quantum-mechanical equations expressed in the hydrodynamic form by introducing terms that involve the diffusion velocity at zero and finite temperatures, as well as the diffusion pressure energy in a warm vacuum, into the Lagrangian density has been proposed. It is used as a basis for constructing a system of equations similar to the Euler equations, but making allowance for quantum-mechanical and thermal effects, for the model of one-dimensional hydrodynamics. The equations obtained generalize the equations of the Nelson stochastic mechanics. A numerical analysis of the solutions of this system allowed a conclusion to be drawn about its validity for the description of the relaxation of quantum thermal fluctuations.