Обложка монографии Ю.Г. Рудого

Рудой Юрий Григорьевич — доктор физико-математических наук (1981), профессор по кафедре «Физика» (1982), профессор Российского университета дружбы народов — Центра естественно-научного образования (1995–2010), кафедры теоретической физики (с 2010 г.). Род. 9 марта 1941 года в г. Москве, окончил (с отличием) среднюю школу (1958), физический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова (с отличием) (1964) и аспирантуру с защитой канд. дисс. (1967) под руководством профессора С. В. Тябликова. Докторскую диссертацию защитил в 1980 году на Ученом Совете Математического института им. В. А. Стеклова АН СССР, принадлежит к научной школе академика Н. Н. Боголюбова. В 1989–1994 гг. — заместитель главного редактора (Нобелевского лауреата, академика А. М. Прохорова) по изданию пятитомной «Физической энциклопедии».

Основные научные интересы — общие вопросы и история термодинамики и статистической физики, метод функций Грина, квантовая теория магнетизма. Имеет более 120 научных и методических публикаций в отечественных и зарубежных научных журналах и трудах международных конференций, соавтор пяти коллективных научных монографий.

ISBN 978-5-4344-0159-3

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА РАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ И СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Ю. Г. Рудой

СОВРЕМЕННАЯ МАТЕМАТИКА

Ю. Г. Рудой

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА РАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ И СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Философия Природы написана в величайшей книге, которая всегда открыта перед нашими глазами, – я разумею Вселенную, но понять ее сможет лишь тот, кто сначала выучит язык и постигнет письмена, которыми она написана.

А написана эта книга на языке математики, и письмена ее – треугольники, окружности и другие геометрические фигуры, без коих нельзя понять по-человечески ее слова: без них – тщетное кружение в темном лабиринте.

Галилео Галилей, 1661 год

Если обозначения удобны для открытий, то поразительно сокращается путь к истине.

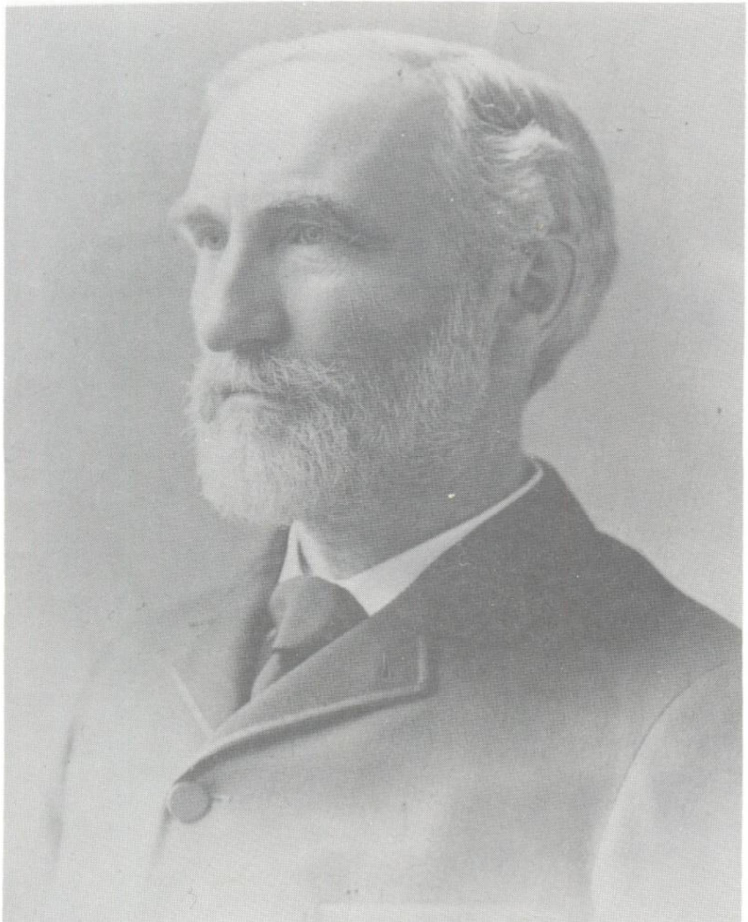
Георг Вильгельм Лейбниц, 1721 год

Одной из основных задач теоретического исследования в любой области знания является установление такой точки зрения, с которой объект исследования проявляется с наибольшей простотой.

Джозайя Уиллард Гиббс, 1881 год

Термодинамика – это единственная физическая теория универсального содержания, относительно которой я убежден, что в рамках применимости ее основных принципов она никогда не будет опровергнута.

Альберт Эйнштейн, 1921 год



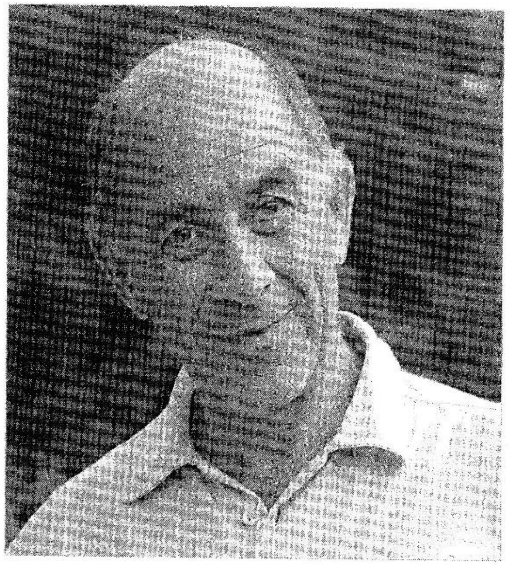
Josiah Willard Gibbs
1839–1903

PROCEEDINGS OF THE GIBBS SYMPOSIUM

Yale University
May 15–17, 1989

D. G. Caldi
G. D. Mostow
Editors

American Mathematical Society
American Institute of Physics



One of the leading mathematicians of our time, Academician

Vladimir Igorevich Arnold

passed away suddenly on 3 June 2010

Proceedings of The Gibbs Symposium
Yale University, May 15–17, 1989

Contact Geometry: the Geometrical Method of Gibbs's Thermodynamics

V. I. ARNOLD

Every mathematician knows that it is impossible to understand any elementary course in thermodynamics. The reason is that the thermodynamics is based—as Gibbs has explicitly proclaimed—on a rather complicated mathematical theory, on the contact geometry. Contact geometry is one of the few "simple geometries" of the so-called Cartan's list, but it is still mostly unknown to the physicist (unlike the Riemannian geometry and the symplectic or Poisson geometries, whose fundamental role in physics is today generally accepted).

1. Contact structures and Legendre submanifolds. A contact structure on an odd-dimensional manifold M^{2n+1} is a field of hyperplanes (of linear subspaces of codimension 1) in the tangent spaces to M at all its points. All the generic fields of hyperplanes of a manifold of a fixed dimension are locally equivalent; they define the (local) contact structures. The other (degenerate) fields are exceptional[1]). (See Figure 1, p. 164.)

EXAMPLE. A 1-*jet of a function* $y = f(x_1, \cdots, x_n)$ at point x of manifold V^n is defined by the point $(x, y, p) \in \mathbb{R}^{2n+1}$, where $p_i = \partial f/\partial x_i$.

The 1-jets of all functions $f: V \to \mathbb{R}$ in all points x of V form a $2n+1$-dimensional 1-*jets space* $J^1(V^n, \mathbb{R})$ (of the Taylor polynomials of degree 1).

The *natural contact structure* of this space is defined by the following condition: the 1-graphs $\{x, y = f(x), p = \partial f/\partial x\} \subset J^1(V^n, \mathbb{R})$ of all the functions on V should be tangent to the contact structure hyperplane at every point. In coordinates this condition means that the 1-form $dy - p\,dx$ should vanish on the hyperplanes of the contact field. (See Figure 2, p. 164.)

1980 *Mathematics Subject Classification* (1985 *Revision*). Primary 58A99, 58F05.

[1]Technically speaking, the nondegeneracy condition for the structure $\alpha = 0$ is the nondegeneracy of the bilinear 2-form $d\alpha$ on the plane $\alpha = 0$. This explains why the dimension of M should be odd.

«Вызов Арнольда», или взгляд математика на физику

…Видимо, физики предпочитают не афишировать столь явно свое **постоянное лицемерие** (!-Авт.) с его **двусмысленностью терминологии и логическими противоречиями.**

Все (!-Авт.) **физические задачники и учебники построены по этому образцу**: неявно предполагаются известными какие-то обстоятельства, **о которых «нет нужды» говорить…**

/В.И. Арнольд в кн. «Что такое математика»/

Роль геометрии в физике (I)

…Симплектическая геометрия **упрощает и делает обозримым устрашающий** (!-Авт.) **формальный аппарат** гамильтоновой динамики (…) таким же образом, как обычная геометрия линейных пространств сводит громоздкие координатные вычисления к **небольшому числу простых основных принципов** (*из книги [0.2] В.И. Арнольда совместно с А.Б. Гивенталем*).

Роль геометрии в физике (II)

Термодинамика, **как явным образом провозгласил Гиббс** (!-Авт.), основана на **весьма сложной** математической теории – именно, на **контактной геометрии**». (В.И. Арнольд в докладе 1989 г.)

Эта (контактная) геометрия входит в число нескольких «простых геометрий» из так наз. списка Картана, но она **все еще почти неизвестна физикам** (!-Авт.) – в отличие, например, от римановой и симплектической, или пуассоновой геометрий, **чья фундаментальная роль в физике сегодня полностью признана** (!-Авт.)

Поддержка М. Борна

…При новом подходе неизбежна критика классических доказательств, но это **не означает принижения великолепных достижений мастеров науки**, чья интуиция вывела нас на верный путь – **нужно только отмести в сторону мусор**, который не отваживалась удалить чересчур почтительная традиционность…

По сравнению с лучшими изложениями классической теории **надо лишь ненамного продвинуться в исследовании интегрируемости уравнений Пфаффа**, чтобы готовые формулы ТД посыпались как спелые плоды… (1920 год)

Предостережение Ф.Клейна

…Материал, **хорошо известный любому математику** (формы Пфаффа и т.п.- Авт.) предстает перед новичком не только переодетым в ТД-одежды, но еще и обремененным огромным и трудным историческим балластом. **Начинающему предлагается**, чтобы по пути, который **с большим трудом** (!-Авт.) **был проделан первооткрывателями (Карно, Клаузиус),** он продирался к цели через заросли непривычных для него математических понятий…

И все же несмотря на бесспорную красоту этой области, я хотел бы **предостеречь** (!-Авт.) **от одностороннего увлечения ею**. Если заниматься ТД только в этой абстрактной ее форме, то останется **неразвитым чутье к конкретному частному случаю**… (1925 год)

Математики о физике (новый взгляд-1)

… Во всяком **случае … понимание должно предшествовать** **(!-Авт.)** **формализации и обоснованию.** Ясное понимание деловой сути предмета должно достигаться до того, как началась формализация: **когда формализуешь что-то, надо это уже понимать.**

Обосновывать еще не понятую теорию нелепо: **формальный язык не объединяет, а разъединяет** математику, затрудняет понимание.

П. Бамберг, Ш. Стернберг   (*1990*)

Математики о физике (новый взгляд-2)

… Не скованные ни иссушающим алгебраически – бурбакистским образованием, **ни обязанностью строго доказывать – или хотя бы сформулировать** **(!-Авт)** **– свои утверждения,** физики оказались способными предсказывать глубокие математические факты в топологии и алгебре, в теории чисел и алгебраической топологии…

Майкл Атья, 1990.

Предисловие акад. В.В. Козлова

В отечественной и переводной физико-математической литературе имеется немало хороших книг как по феноменологической термодинамике, так и по дифференциальной геометрии, в том числе контактной; однако все еще недостаточно статей, обзоров и книг, в которых эти области науки рассматриваются совместно.

Вместе с тем именно геометрический метод дифференциальных форм, развитый в трудах Пфаффа, Дарбу, Картана и впервые примененный к термодинамике в трудах Каратеодори, является естественным языком этой области физики; наиболее завершенную формулировку геометрический метод получил в трудах Масье, Планка и особенно Гиббса.

Предлагаемая читателям книга профессора кафедры теоретической физики Российского университета дружбы народов Ю. Г. Рудого в известной мере восполняет указанный пробел и рассматривает равновесную термодинамику на единой дифференциально-геометрической основе.

Особый интерес представляют выход изложения за рамки феноменологической термодинамики и включение в геометрический контекст также статистической термодинамики в духе идей Гиббса, Эйнштейна и Сциларда.

Отметим, что в книге Ю. Г. Рудого впервые в отечественной литературе дано систематическое изложение элементов информационной геометрии— *геометростатистики* по терминологии Колмогорова, причем не только в классической версии на основе подхода Фишера и Крамера, но и в квантовой (некоммутативной) версии, основы которой заложены Ченцовым и Амари и независимо развиты Вигнером, Дайсоном и Боголюбовым.

Можно надеяться, что предлагаемое актуальное издание, выходящее в издательстве ИКИ – РХД при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, представит интерес для широкого круга читателей, прежде всего для студентов старших курсов и аспирантов физико-математических специальностей университетов, а также для научных работников в области теоретической и математической физики.

Обзор содержания книги

Структура монографии (I)

Раздел I. ЭЛЕМЕНТЫ РАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ: ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЙ И СТАТИСТИЧЕСКОЙ

Глава 1. Физический объект в термодинамике (ТД)

Глава 2. Феноменологическая равновесная ТД

2-1. Формулировка Карно – Кельвина – Клаузиуса

2-2. Формулировка Масье – Гиббса – Гельмгольца

Глава 3. Статистическая равновесная ТД

Формулировка Эйнштейна – Сциларда

Структура монографии (II)

Раздел II. ЭЛЕМЕНТЫ РАВНОВЕСНОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Глава 4. Формулировка Больцмана: *изолированный* ФО

Глава 5. Формулировка Гиббса: *открытый* ФО

Структура монографии (III)

Раздел III. ГЕОМЕТРИЗАЦИЯ РАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ

Глава 6. Феноменологическая термодинамика и ее геометризация

6-1. Геометрическая термодинамика Гиббса

6-2. «*Внешняя*» геометрия ТД-поверхности

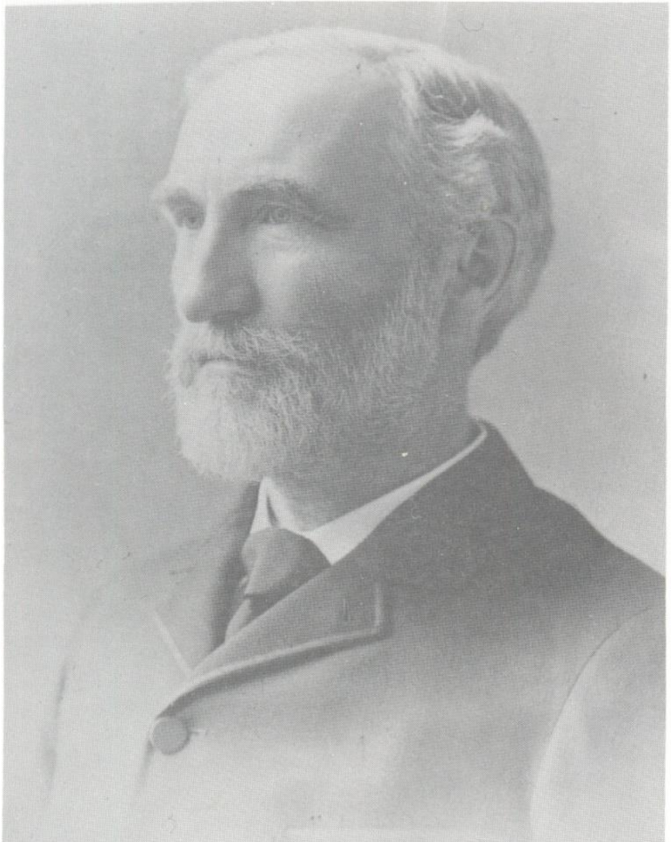
6-3. «*Внутренняя*» геометрия ТД-поверхности

Структура монографии (IV)

Глава 7. Статистическая термодинамика и ее геометризация

7-1. Информационная геометрия – геометростатистика: классическая (***коммутативная***) версия

7-2. Информационная геометрия – геометростатистика: квантовая (***некоммутативная***) версия



Josiah Willard Gibbs
1839–1903

ДЖОЗАЙЯ ВИЛЛАРД ГИББС

ТЕРМОДИНАМИКА
СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА

ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»
МОСКВА 1982

I. ТЕРМОДИНАМИКА

ГРАФИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ТЕРМОДИНАМИКЕ ЖИДКОСТЕЙ [1]

Хотя геометрические представления различных положений термодинамики жидкостей [2], вообще говоря, применяются и сослужили хорошую службу для распространения в этой науке ясных представлений, все же они не получили того распространения, которое соответствовало бы разнообразию и общности их возможных применений. Действительно, что касается общего графического метода, с помощью которого можно изображать сразу все термодинамические свойства рассматриваемой жидкости при обратимых процессах и который одинаково пригоден как для иллюстрации общих теорем, так и для численного решения конкретных задач, то обычная, если не всеобщая практика состоит в использовании диаграмм, на которых по осям декартовых координат откладываются объем и давление. Цель этой статьи — привлечь внимание к некоторым диаграммам другого типа, которые предоставляют графическим методам столь же широкие возможности применения, как и обычные диаграммы, но которые предпочтительнее во многих случаях в отношении ясности или удобства применения.

p-V диагр

ВЕЛИЧИНЫ И СООТНОШЕНИЯ, КОТОРЫЕ БУДУТ ИЗОБРАЖАТЬСЯ НА ДИАГРАММАХ [1]

Мы рассмотрим следующие величины: v — объем, p — давление, t — температура (абсолютная), ε — энергия, η — энтропия данного тела в некотором состоянии, а также W — работа, совершаемая телом при переходе из одного состояния в другое, и H — тепло, получаемое телом при этом переходе [3]. Эти величины подчиняются соотношениям, выражаемым следующими

[1] Graphical methods in the thermodynamics of fluids.— Trans. Connect. Acad., 1873, II, April-May, p. 309—342.

[2] Здесь и далее английский термин «fluid», означающий текучую среду, т. е. газ или жидкость, мы переводим как «жидкость».— *Примеч. ред.*

[3] Работа, производимая над телом, должна, как обычно, рассматриваться как отрицательное количество работы, совершаемой телом, а тепло, отдаваемое телом,— как отрицательное количество тепла, получаемого им.

Принимается без доказательства, что температура по всему телу одна и та же и что давление (или сила расширения) имеет одну и ту же величину во всех точках тела и для всех направлений. Необходимо отметить, что эти предположения исключают необратимые процессы, но не полностью исключают твердые тела, хотя условие равенства давлений по всем направлениям очень сужает число случаев, когда твердые тела входят в сферу рассмотрения.

дифференциальными уравнениями [4]:

$$dW = \alpha p dv, \quad (a) \qquad d\varepsilon = \beta dH - dW, \quad (b) \qquad d\eta = dH/t, \quad (c)$$

где α и β являются постоянными, зависящими от единиц, в которых измеряются v, p, W и H. Мы можем принять выбор единиц [5] таким, что $\alpha = 1$ и $\beta = 1$, и записать эти уравнения в более простом виде

$$d\varepsilon = dH - dW, \tag{1}$$

$$dW = p dv, \tag{2}$$

$$dH = t d\eta. \tag{3}$$

Исключая dW и dH, получим

$$d\varepsilon = t d\eta - p dv. \tag{4}$$

Величины v, p, t, ε и η определены, если задано состояние тела, и поэтому их можно назвать *функциями состояния тела*. Состояние тела в том смысле, в котором этот термин применяется в термодинамике жидкостей, допускает существование двух независимых вариаций, так что между пятью величинами v, p, t, ε и η существуют соотношения, выражаемые тремя конечными уравнениями, которые для разных веществ, вообще говоря, различны, но никогда не противоречат дифференциальному уравнению (4). Уравнение (4), очевидно, означает, что если ε выражена как функция v и η, то частные производные этой функции по v и η будут равны соответственно $-p$ и t [6].

С другой стороны, W и H не являются функциями состояния тела (или функциями любой из величин v, p, t, ε и η), но определяются целым рядом состояний, через которые оно по предположению проходит.

[4] Уравнение (a) можно вывести из простых механических соображений. Уравнения (b) и (c) можно рассматривать как определения энергии и энтропии любого состояния тела, или, точнее, как определения дифференциалов $d\varepsilon$ и $d\eta$. То, что существуют функции состояния тела, дифференциалы которых удовлетворяют этим уравнениям, можно легко вывести из первого и второго законов термодинамики. Следует заметить, что термин *энтропия* применяется здесь в согласии с первоначальным предложением Клаузиуса, а не в том смысле, в котором он после этого употреблялся профессором Тейтом и др. Эта же величина названа профессором Рэнкином *термодинамической функцией*. См. *Clausius R.* Abhandlungen über der mechanische Wärmetheorie. Braunschweig, 1864, Abhandl. IX, § 14 или Ann. Phys., 1865, 125, S. 390; *Rankine W. J.*— Phil. Trans., 1863, 144, p. 126.

[5] Например, можно выбрать за единицу объема куб с ребром, равным единице длины; за единицу давления — единицу силы, действующей на квадрат единицы длины; за единицу работы — единицу силы, действующей на протяжении единицы длины, и за единицу тепла — тепловой эквивалент единицы работы. При этом единицы длины и силы остаются произвольными, так же как и единица температуры.

[6] Уравнение, которое выражает ε через η и v, или в общем случае любое конечное уравнение, связывающее ε, η и v, для определенного количества любой жидкости, может рассматриваться как фундаментальное термодинамическое уравнение этой жидкости, так как из него с помощью уравнений (2)—(4) можно вывести все термодинамические свойства жидкости (пока речь идет об обратимых процессах). Действительно, фундаментальное уравнение вместе с уравнением (4) дают три соотношения, существующие между v, p, t, ε и η, и если известны эти соотношения, то уравнения (2) и (3) дают работу W и теплоту H для любого изменения состояния жидкости.

МЕТОД ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ ПРИ ПОМОЩИ ПОВЕРХНОСТЕЙ [1]

Основные термодинамические свойства жидкости или газа определяются соотношениями, связывающими объем, давление, температуру, энергию и энтропию данной массы жидкости в состоянии термодинамического равновесия. То же самое справедливо и для твердых тел, если рассматривать их свойства в таких процессах, когда давление вблизи любой точки тела одинаково по всем направлениям. Но все соотношения между этими пятью величинами для любого вещества (три независимых уравнения) можно получить из единственного соотношения, связывающего объем, энергию и энтропию данного вещества. Это может быть сделано с помощью общего уравнения [2]

$$d\varepsilon = t d\eta - p dv, \tag{1}$$

или

$$p = -\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial v}\right)_\eta, \tag{2}$$

$$t = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \eta}\right)_v, \tag{3}$$

где v, p, t, ε и η обозначают соответственно объем, давление, абсолютную температуру, энергию и энтропию рассматриваемого тела. Индекс при производной указывает величину, которая при дифференцировании считается постоянной.

ИЗОБРАЖЕНИЕ ОБЪЕМА, ЭНТРОПИИ, ЭНЕРГИИ, ДАВЛЕНИЯ И ТЕМПЕРАТУРЫ

Соотношение между объемом, энтропией и энергией проще всего можно представить при помощи поверхности, если считать, что прямоугольные координаты различных точек поверхности равны объему, энтропии и энергии тела в различных его состояниях. Представляет интерес исследовать свойства такой поверхности, которую мы будем называть *термодинамической поверхностью* тела, для которого она построена [3].

Для определенности придадим осям v, η и ε такие направления, которые

[1] A method of geometrical representation of the thermodynamic properties of substances by means of surfaces.— Trans. Connect. Acad., 1873, II, Dec., p. 382—404.

[2] По поводу вида этого уравнения и единиц измерения входящих в него величин см. с. 10.

[3] Проф. Дж. Томсон предложил и использовал поверхность, координаты которой пропорциональны объему, давлению и температуре тела (*Thomson J.*— Proc. Roy. Soc., 1871, 20, p. 1; Phil. Mag., 1871, 13, p. 227). Очевидно, однако, что соотношение между объемом, давлением и температурой дает менее полное представление о свойствах тел, чем соотношение, связывающее объем, энтропию и энергию. Действительно, в то время как первое соотношение полностью определяется последним и может быть получено из него с помощью дифференцирования, второе соотношение отнюдь не определяется первым.

обычно приписываются осям X, Y и Z (v возрастает вправо, η — вперед и ε — вверх). Тогда давление и температура состояния, изображаемого любой точкой поверхности, будут равны тангенсам углов наклона поверхности к горизонтальной плоскости в этой точке, причем углы отсчитываются в плоскостях, перпендикулярных соответственно осям η и v (см. уравнения (2) и (3)). Следует отметить, однако, что в первом случае угол наклона измеряется вверх от направления *уменьшения* v, а во втором случае — вверх от направления *возрастания* η. Следовательно, касательная плоскость в любой точке показывает температуру и давление изображаемого состояния. Удобно говорить, что плоскость представляет определенные давление и температуру, если тангенсы ее углов с горизонтальной плоскостью, измеренных указанным способом, равны этим значениям давления и температуры.

Прежде чем продвинуться дальше, полезно выяснить, что́ в построенной таким способом поверхности существенно и что́ произвольно. Положение плоскости $v = 0$ относительно поверхности, очевидно, фиксировано, но положение плоскостей $\eta = 0$ и $\varepsilon = 0$ является произвольным, если фиксировано только направление осей η и ε. Это следует из характера определений энтропии и энергии, каждое из которых содержит произвольную постоянную. Поскольку мы можем положить $\eta = 0$ и $\varepsilon = 0$ для какого угодно состояния тела, то можно поместить начало координат в любую точку плоскости $v = 0$. Далее, из формы уравнения (1) очевидно, что, каким бы образом мы ни меняли единицы измерения объема, энтропии и энергии, всегда можно так изменить единицы температуры и давления, чтобы уравнение осталось справедливым в том же виде без введения констант. Легко видеть, как отразится на нашей поверхности изменение единиц объема, энтропии и энергии. Проекции расстояний между точками поверхности на направление любой оси координат изменяются обратно пропорционально изменению соответствующей единицы. Эти соображения позволяют в известной мере предвидеть общие свойства поверхности, которые нам предстоит исследовать. А именно, эти свойства должны быть таковы, чтобы на них не отражалось ни одно из указанных выше изменений. Например, мы можем найти свойства, относящиеся к плоскости $v = 0$ (скажем, вся поверхность должна быть расположена обязательно с положительной стороны этой плоскости), но мы не можем рассчитывать, что удастся отыскать свойства, которые относятся к плоскостям $\eta = 0$ или $\varepsilon = 0$ и которые выделяют их по сравнению с другими параллельными им плоскостями. Можно еще добавить, что поскольку объем, энтропия и энергия тела равны сумме объемов, энтропий и энергий его частей, то построенные указанным способом поверхности (для тел, различающихся только по количеству, но не по природе вещества) будут подобны друг другу, так как их линейные размеры будут пропорциональны количеству вещества.

СВОЙСТВА ТОЙ ЧАСТИ ПОВЕРХНОСТИ, КОТОРАЯ СООТВЕТСТВУЕТ НЕГОМОГЕННЫМ СОСТОЯНИЯМ

Этот способ изображения объема, энтропии, энергии, давления и температуры тела применим как тогда, когда различные части тела находятся в различных состояниях (при этом всегда предполагается, что все тело находится

Геометрический подход – два анзаца Гиббса в ФТД

Простейший физ. объект в ФТД – однофазный (p=1) и однокомпонентный (q=1), **число ТД степ. свободы r=2.**

Правило фаз Гиббса: r=p–q+2. **Анзацы Гиббса:** существуют ТД ***многообразие*** $\mathbf{M}_{\text{ТД}}$ с размерн. m=2r+1=5,

ТД ***поверхность*** $\mathbf{Z}_{\text{ТД}}$ с размерн. n=r=2, ТД ***база*** с разм. r=2,

ТД ***пространство*** $\mathbf{R}_{\text{ТД}}$ с размерн. 1; **$\mathbf{Z}_{\text{ТД}}$ вложено в $\mathbf{R}_{\text{ТД}}$.**

Экстенсивные ТД$_e$={U,S,V,N,...}; ***энергетич.*** представление U=U(S,V,N,...), ***энтропийное*** представление S=S(U,V,N,...).

Интенсивные ТД$_i$={1/T,T,–P,μ,...}. **«Внешняя» геометрия.**

Дифференциальные 1-формы в ТД (I)

$\Omega = z - \boldsymbol{y}d\boldsymbol{x}$ – ***форма Пфаффа***, ***y***,***x*** – *r*-мерные векторы ТД-сопряженных (экстенс./интенс.) переменных, z – всегда одномерная (скалярная) ТД-переменная (***ТД-потенциал***)

$\mathbf{M}_{\text{ТД}}$ – **мн-зие** {z,***x***,***y***}; размерн.**1+r+r=2r+1** – **всегда нечетн.!**

$\mathbf{Z}_{\text{ТД}}$ – *интегральное* лежандрово **подмн-зие**: **Ω=0,** n=r=2.

z =z(***x***) – *график*, $\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})=\partial z/\partial \boldsymbol{x}$ – *касательное* подмн-зие, или ***вектор ур-ний состояния*** **(r=2)**, $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})=\partial^2 z/\partial \boldsymbol{x}\partial \boldsymbol{x}'$ – *матрица Гесса – всегда симметричная*, $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})^{tr}$. ***Матрица*** $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})$ **совпадает с** $\chi(\boldsymbol{x})$ – ***обобщенных ТД- восприимчивостей.***

Дифференциальные 1-формы в ТД (II)

Существует группа контактоморфизмов **С** (вообще говоря, бесконечномерная), сохраняющих *контактную структуру* на $\mathbf{M}_{\text{ТД}}$. В частности, в **С** входит подгруппа масштабных преобразований $\Omega \longrightarrow \alpha\Omega$, где $\alpha \neq 1$ – например, переход между U- и S-представлениями в основном уравнении термодинамики.

Наиболее важной подгруппой является подгруппа *дискретных инволютивных* **преобразований Лежандра L,** обладающих *проекционным* свойством $L^2=L$; размерность подгруппыL равна 2^r

Задача (пока нерешенная): найти все – или хотя бы некоторые – ТД-инварианты группы контактоморфизмов С (например, К).

Метризация ТД-поверхности (I)

Внешняя геометрия: матрицы 1-ой (g) и 2-ой (b) форм *индуцированы* вложением $\mathbf{Z}_{ТД}$ в $\mathbf{R}_{ТД}$, причем ***всегда*** det g>0, тогда как $b=\pm h_{U,S}$, но det b вообще не является знакоопределенным. Однако **физич. условие** (!) ТД-устойчивости дает det b>0, так что скалярная гауссова кривизна K=det g/det b ***всегда*** положит. (K>0); след.,$\mathbf{Z}_{ТД}$ – *экстремальная* (всюду выпуклая, эллиптическая) ТД-поверхность.

Метризация ТД-поверхности (II)

«Внутренняя» геометрия: метрическая матрица g *не определяется вложением* и может быть задана с помощью ***произвольной*** симметричной положительно определенной матрицы. Обычно

$g=b=\pm h_{U,S}$ – геометротермодинамика

$g=h_U$ – метрика Вайнхольда (1973)

$g=-h_S$ – метрика Руппейнера (1971)

Гауссова кривизна K при r=2 определяется только через g и g'(K.F. Gauss, "theorema egregium", 1827)

Переход от ФТД к СТД: введение вероятностной меры (I)

Этапы перехода: 1) введение *динамического* ***пред****многообразия* $\boldsymbol{M}_{\mathrm{D}}$(Больцмана), где D_e и D_i – динамич. «прообразы» ТД-переменных TD_e и TD_i ;2) введение в $\boldsymbol{M}_{\mathrm{D}}$ **вероятностной меры *W***, обусловленной **стохастичностью теплового контакта**, причем D_e и D_i переходят в ***случайные*** динамич. переменные $\check{D}_e$ и $\check{D}_i$, а $\boldsymbol{M}_{\mathrm{D}}$ – в $\boldsymbol{M}_{\check{\mathrm{D}}}$ (Гиббса); 3) усреднение по мере W, причем $\check{D}_e$ и $\check{D}_i$ переходят в TD_e и TD_i, так что $\boldsymbol{M}_{\check{\mathrm{D}}} \longrightarrow \boldsymbol{M}_{\mathrm{TD}}$ (Клаузиуса).

Мера W, очевидно, параметризуется *интенсивнными* ТД-параметрами окружения (термостата): P_0, T_0, μ_0, ...

Переход от ФТД к СТД: введение вероятностной меры (II)

Два способа введения вероятностной меры *W:*

по Гиббсу: статистическая механика с переходом **от микро- к макро**скопическим переменным (гл. IX);

по Эйнштейну – Сциларду: **макро**скопическая эргодическая гипотеза и вывод на основе свойства ***аддитивности***. Стационарная мера *W* является тогда (!) экспоненциальной , или канонической:

$$\mathbf{W(\check{E};\beta_0)=Z^{-1}(\beta_0)g(\check{E})\exp[-\beta_0\check{E}],\quad \beta_0=1/k_BT_0.}$$

Переход от ФТД к СТД: введение вероятностной меры (III)

Фундаментальный результат: ФТД и СТД являются двумя **версиями** (интерпретациями) **единой ТД**, поскольку благодаря стохастическому тепловому контакту ТД-флуктуации фактически встроены в аппарат ФТД «под видом» ТД-восприимчивостей (в отличие, напр., от квантовой механики), причем эти ТД-флуктуации в принципе неустранимы.

Точнее, для ***канонической*** случайной меры W справедливо:

$$\sigma_{xx'}=\chi_{yy'}=h_{yy'}$$

теор.←эксп.→теор.

$\sigma_{xx'}=<\Delta x \Delta x'>$ - ***корреляционная матрица***, где $<...>=\int ... W dx dx'$, $\chi_{yy'}=h_{yy'}= \partial^2 z/\partial \boldsymbol{y}_0 \partial \boldsymbol{y}_0'$–матрица обобщенных восприимчивостей= матрице Гесса ТД-потенциала $z(\mathbf{y}_0)$ (в простейшем случае $\mathbf{y}_0=\beta_0$).

Переход от ФТД к СТД: введение вероятностной меры (IV)

Простейший (но важный!) пример (Гиббс, Стат. Мех., 1902): $r=1$, $x=Ě$, $y_0=\beta_0$,

$$W(Ě;\beta_0)=Z^{-1}(\beta_0)\exp[S_B(Ě)-\beta_0 Ě], \quad S_B(Ě)=\ln g(Ě), \quad \beta=\beta(Ě)=\partial S_B(Ě)/\partial Ě,$$

Корреляционная матрица – трехкомпонентная:

$\sigma_{ĚĚ}=\langle(\Delta Ě)^2\rangle$, $\sigma_{\beta\beta}=\langle(\Delta\beta)^2\rangle$, $\sigma_{\beta Ě}=\sigma_{Ě\beta}=\langle\Delta Ě\Delta\beta\rangle\equiv-1$ (результат Гиббса, гл. IX).

Существенно, что темп-ра (обратная) физ. объекта *не является независимой* величиной, а ее флуктуации ***индуцируются*** флуктуациями энергии Ě физ.объекта. Именно этой (*экстенсивной*!) величиной физ. объект обменивается (*случайным образом*!) с термостатом, причем $\beta\neq\beta_0$, но $\langle\beta\rangle=\beta_0$,так что 0-ое начало ТД выполняется лишь *в среднем.* Далее, оказывается (Гиббс, 1902; Эйнштейн, 1903):

$$\sigma_{ĚĚ}=(1/\beta)^2C_V(\beta), \quad \sigma_{\beta\beta}=1/\sigma_{ĚĚ}, \quad \sigma_{ĚĚ}\sigma_{\beta\beta}=1=(\sigma_{\beta Ě})^2,$$

что является частным (насыщенным) случаем ТД СН Гиббса – Эйнштейна.

Последнее, в свою очередь, является частным (насыщенным) случаем нерав. Коши – Буняковского – Шварца $\sigma_{ĚĚ}\,\sigma_{\beta\beta}\geq(\sigma_{\beta Ě})^2$ для корреляционных ф-ций как скалярных произведений, определенных в пространстве ТД-параметров $R_{ТД}$.

Переход от ФТД к СТД: введение вероятностной меры (V)

Физически более наглядным по сравнению с подходом Гиббса представляется подход Эйнштейна – Сциларда к СТД : понятие о ТД-флуктуациях вводится непосредственно в рамках ФТД, но с учетом случайной природы теплового контакта – и, след., Ĕ и β(Ĕ).

Основная физич. идея: *малый* физ. объект (ФО) является термометром для *большого* термостата. Согласно 0-му началу ТД, для установления теплового равновесия необходимо выравнять значения β_0 и β(Ĕ) (последнее – лишь в смысле *среднего* значения).

Но прежде чем ***выравнивать значения*** – т.е. ***адаптировать*** значение <β(Ĕ)> к β_0 – необходимо ***оценить*** β_0 по ***случайным выборкам*** ТД-сопряженной β величины Ĕ. С математич. точки зрения это задача **математич. статистики Р. Фишера (1925)** – точнее, задача параметрического оценивания фиксированного (но неизвестного) значения β_0 для вероятностной меры *W*.

Эта задача в принципе не может быть решена точно в силу неизбежного разброса значений Ĕ, а именно дисперсии $\sigma_{ĔĔ}>0$. Соотв., неизбежно наличие дисперсии $\sigma_{\beta\beta}>0$, причем в силу **теоремы Фишера – Крамера – Рао** имеется нижняя граница: $\sigma_{\beta\beta}\geq 1/\sigma_F$; здесь $\sigma_F=-\partial^2 \ln W/\partial^2 y_0$ – матрица Фишера, причем для экспоненц. меры $\sigma_F=\sigma_{ĔĔ}>0$, так что воспроизводится ТД-соотношение неопределенности Гиббса – Эйнштейна.

Элементы информационной геометрии (I) **Классический** вариант

Геометрический подход Ченцова – Амари: множество всех ф-ций распределения **W(Ě;β)** заданного типа – напр.,экспоненциального – со случайным значением **β** – образует топологическое пр-во, в к-рое вводится ***квазиметрика*** $\psi(\mathbf{W}_1,\mathbf{W}_2)\geq 0$ с одним условием $\psi(\mathbf{W}_1,\mathbf{W}_1)=0$

Для *малых* флуктуаций $\boldsymbol{\Delta\beta=\beta-\beta_0}$ *любая* квазиметрика эквивалентна римановой метрике в пр-ве параметров **β**. Метрической матрицей является $\boldsymbol{\sigma_F}$ **–** *матрица Фишера*, совпадающая с $\boldsymbol{\sigma_{\check{E}\check{E}}=\chi=h}$ для сем-ва канонических, или экспоненциальных распределений.

Обобщение подхода Ченцова–Амари на некоммутативный (квантовый) случай: пионерские работы 70-ых годов – Хелстром (США) и Холево(СССР), а также Ченцова и Морозовой (80-ые), и далее Петц (90-ые, Венгрия):«марковские» сжимающие морфизмы.

Элементы информационной геометрии (II) **Квантовый** вариант

В этом случае вероятностной мерой является ***не функция*** распределения, а ***оператор***, или **матрица плотности ρ**, причем ввиду некоммутативности **ρ и Δρ** выбор матрицы Фишера становится ***неоднозначным***. Это открывает принципиальную возможность ***улучшить оценку*** для дисперсии параметра **y**, повысив границу снизу за счет понижения $\boldsymbol{\sigma_F}$.

Цепочка неравенств для матриц Фишера:

$$\sigma^{s}_{F} = \sigma_F^{\text{КМШ}} \leq \sigma_F^{\text{ВАЯ}} \leq \sigma_F^{\text{БКМ}} \leq \sigma_F^{r,l} \;.$$

s,r,l – симметричная, левая и правая. **Метрики семейства ВЯД**: Вигнера–Яназе–Дайсона ($0\leq\lambda\leq\frac{1}{2}$); $A(\beta;\lambda)=\rho(\beta)^{1-\lambda}A\rho(\beta)^{\lambda}$; $\rho(\beta)=\exp[-\beta H]$ – «тепловая» матрица плотности, или оператор Гиббса – фон Неймана; **КМШ**: Кубо–Мартина–Швингера ($\lambda=0$),**ВАЯ**: Вигнера–Араки –Яназе ($\lambda=\frac{1}{2}$); **БКМ**: Боголюбова – Кубо – Мори ($\int d\lambda$).

Уважаемые коллеги и друзья,

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!