

# Prosty model ilustrujący problem termodynamicznej strzałki czasu

Doc. dr Antoni KUSZELL

Co najmniej od czasów Boltzmana wciąż żywa jest dyskusja na temat sprzeczności pomiędzy odwracalnością w czasie dynamiki klasycznej, a nieodwracalnością zjawisk w fizyce statystycznej. Poznanie źródła nieodwracalności pozwala głębiej wniknąć w istotę termodynamicznej strzałki czasu, tj. strzałki zdefiniowanej przez zasadę wzrostu entropii.

Znamy w fizyce kilka mechanizmów wprowadzających nieodwracalność. Zajmiemy się tutaj jednym, najprostszym zwanym mechanizmem mieszania faz. Mimo że podlega mu dążenie do równowagi termodynamicznej jedynie w pewnej podprzestrzeni przestrzeni fazowej, to ilustruje on najistotniejsze elementy teorii procesów nieodwracalnych. Dla prostoty rozważymy mechanizm mieszania faz w modelu, dla którego można znaleźć pełne deterministyczne rozwiązanie.

Rozważmy kulkę o masie  $m = 1$ , poruszającą się po prostej. Zależność jej energii potencjalnej od położenia opisana jest funkcją  $U(x)$ ; rys. 1. Jeżeli pominiemy tarcie, energia kulki wyrażona wzorem

$$E = T + U(x) = \frac{v^2}{2} + U(x)$$

będzie podczas ruchu wielkością stałą.

Wyznamy punkty  $\pm x_0(E)$  spełniające warunek:

$$E = U(x_0(E)).$$

Równanie to w naszym przypadku ma oczywiście rozwiązania jedynie dla energii z przedziału  $U_{min} \leq E < 0$ .

Przedstawiając energię kinetyczną w postaci

$$T = E - U$$

widzimy, że będzie ona nieujemna jedynie w przedziale  $|x| < x_0(E)$ . Jest to obszar fizycznie dopuszczalny dla ruchu kulki. Obszar  $|x| > x_0(E)$  jest zabroniony dla kulki o energii  $E$ . Tak więc podczas ruchu będzie ona oscylowała pomiędzy  $-x_0(E)$  a  $x_0(E)$ . Dla energii nieujemnych nie wystąpią oscylacje. Kulka będzie się poruszała w ustalonym kierunku ruchem niejednostajnym. W dalszym ciągu ograniczymy się jedynie do przypadku oscylacyjnego.

Okres oscylacji  $\tau$  jest, ogólnie rzecz biorąc, funkcją energii kulki. Postać tej funkcji jest różna dla różnych kształtów zależności energii potencjalnej od położenia. Wybierzmy taką zależność, by w pewnym przedziale energii ( $E_{min}$ ,  $E_0$ ) okres był liniową funkcją energii

$$\tau(E) = \alpha \cdot (E - E_{min}).$$

Dla dalszej analizy wygodnie jest wprowadzić nową zmienną opisującą położenie kulki. Nazywać ją będziemy fazą oscylacji:

$$x = x_0(E) \cos \Phi(t).$$

Dla dowolnych energii  $E$  faza zmienia się w przedziale  $(-\pi, \pi)$ .

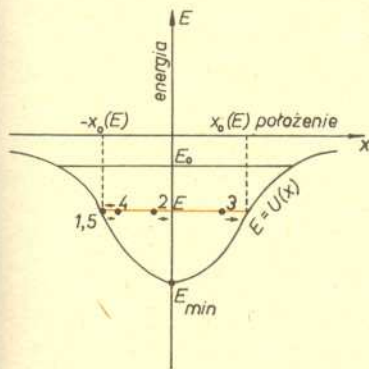
Ruch kulki w przestrzeni  $(\Phi, E)$  odbywać się będzie po torze  $E = \text{const.}$  z okresem  $\tau(E)$ , patrz rys. 2.

Rozważmy teraz jednoczesny ruch układu kilku kulek, poruszających się niezależnie, określonych współzrędnymi fazowymi  $(\Phi_n, E_n)$ , gdzie  $n$  oznacza numer kolejny kulki. Jeśli przyjmijemy, że każda kulka ma inną energię, to okresy oscylacji

$$\tau_n = \alpha(E_n - E_{min})$$

będą różne dla różnych kulek. Dla prostoty możemy tak dobrać energie poszczególnych kulek, by okresy spełniały relację

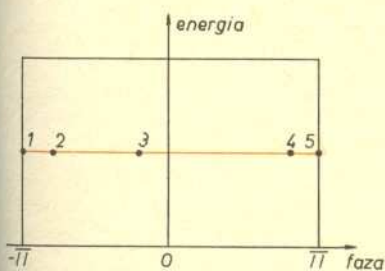
$$\tau_n = n\tau_1.$$



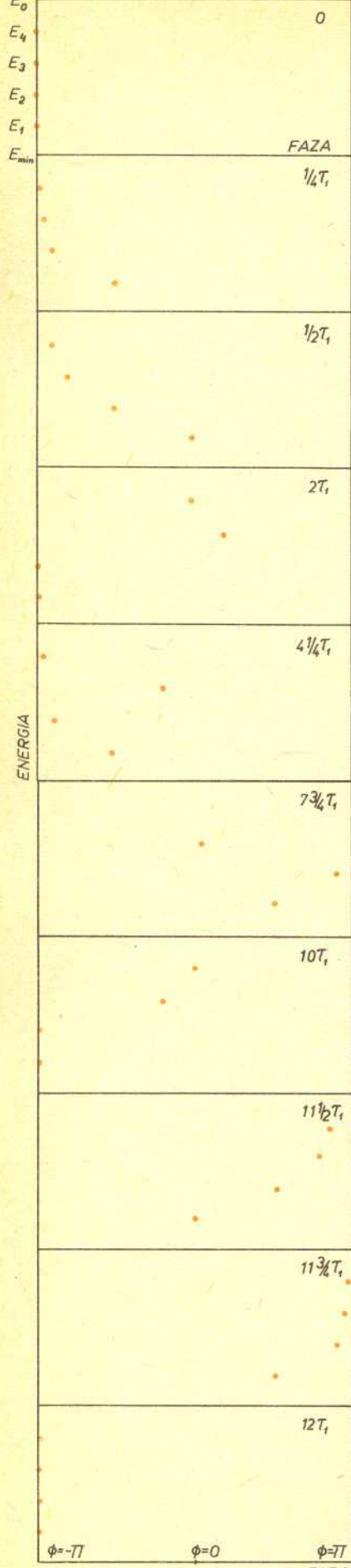
Rys. 1

Gęstość cząstek w punkcie określana jest jako stosunek liczby cząstek w niewielkim otoczeniu punktu do objętości tego otoczenia. Gdy średnica otoczenia ( $L$ ) jest dużo większa niż średnia odległość między cząstkami ( $l$ ) zawiera ono wiele cząstek i prawdopodobieństwo wystąpienia dużej fluktuacji gęstości jest niewielkie. Kiedy  $L$  jest bliskie  $l$  fluktuacje rosną, bo porównywalne stają się prawdopodobieństwa, że w rozważanym obszarze są cząstki i że ich nie ma. Obszary, w których średnie wielkości silnie fluktuują w czasie, nazywamy obszarami mikroskopowymi. Opis układu za pomocą wartości średnich w takich obszarach na ogół nie ma sensu.

Istotną różnicą między omawianymi mechanizmami relaksacji jest to, że dla różnych stanów początkowych czasy relaksacji zderzeniowej są w przybliżeniu równe, natomiast czasy relaksacji przez mieszanie faz mogą się znacznie różnić.



Rys. 2



Wybermy też bardzo szczególne warunki początkowe — takie, by dla  $t = 0$  wszystkie fazy

$$\Phi_n(0) = -\pi.$$

Na rysunku 3 przedstawiliśmy rozwój w czasie układu czterech kulek. Można łatwo zauważyć, że po czasie równym najmniejszej wspólnej wielokrotności okresów  $\tau_n$  układ dokładnie powróci do sytuacji wyjściowej. Czas ten, który możemy interpretować jako czas Poincarégo powrotu układu do warunków początkowych, wynosi  $12\tau_1$ . W przypadku ogólnym zależy on silnie od ilości kulek oraz od stosunku ich okresów. W przypadku okresów niewspółmiernych nie ma mowy o dokładnym zreprodukowaniu warunków początkowych. Jednakże możemy zauważyć, że dla dowolnego  $\epsilon > 0$ , oraz dowolnych okresów można znaleźć takie liczby całkowite  $p$  i  $q$ , że zachodzi związek:

$$\left| \frac{\tau_n}{\tau_m} - \frac{p}{q} \right| < \epsilon.$$

Możemy więc wprowadzić „przybliżoną” wspólną wielokrotność  $N$ . Po czasie  $T_p = N\tau_1$  układ zreprodukuje warunki początkowe z dużą dokładnością. Widać stąd też, że czas powrotu będzie na ogół szybko rósł ze wzrostem liczby kulek.

W skali czasu długiej w porównaniu z czasem Poincarégo układ nie przejawia zachowania nieodwracalnego, powraca bowiem cyklicznie do stanów bardzo bliskich stanowi początkowemu. W takiej skali czasowej nie widać więc wyróżnienia strzałki czasu. Jednakże dla układów o dostatecznie dużej liczbie stopni swobody w przedziale czasów

$$\tau_n \ll t \ll T_p$$

gdzie  $\tau_n$  oznacza typowy okres oscylacji cząstki z naszego układu, zaś  $T_p$  jest czasem powrotu układu, dla większości warunków początkowych rozkład faz będzie bardzo chaotyczny. Wyjątek stanowią takie konfiguracje początkowe, które w czasie ewolucji zdążą się uporządkować. Te wyróżnione konfiguracje można skonstruować następująco: weźmy stan uporządkowany, następnie poczekajmy, by ewoluował przez czas  $t$  należący do naszego przedziału, a potem zmieńmy wszystkie prędkości  $v$  na  $-v$ . Tak przygotowane stany po czasie  $t$  znów powrócą do uporządkowanej postaci początkowej. Widać jednak, że stany te są bardzo specjalne i przypuszczamy, że jest ich stosunkowo mało. Tak więc mówiąc o rozkładach cząstek będziemy te stany pomijać.

Rozważmy teraz układ składający się z tak dużej ilości kulek, że można mówić o ciągłym rozkładzie kulek w przestrzeni fazowej. Przejście od układu skończonego do rozkładu ciągłego jest sprawą delikatną i wiąże się z pojęciami obszarów mikroskopowych i makroskopowych. Za obszar mikroskopowy uważamy obszar przestrzeni fazowej, w którym średnio znajduje się tak mało kulek, że wszystkie szczegóły ich dynamiki są istotne. Obszarem makroskopowym natomiast będzie obszar, w którym znajduje się tak dużo kulek, że dla liczenia wartości średnich, np. gęstości, nie jest konieczna szczegółowa znajomość ruchu każdej z nich.

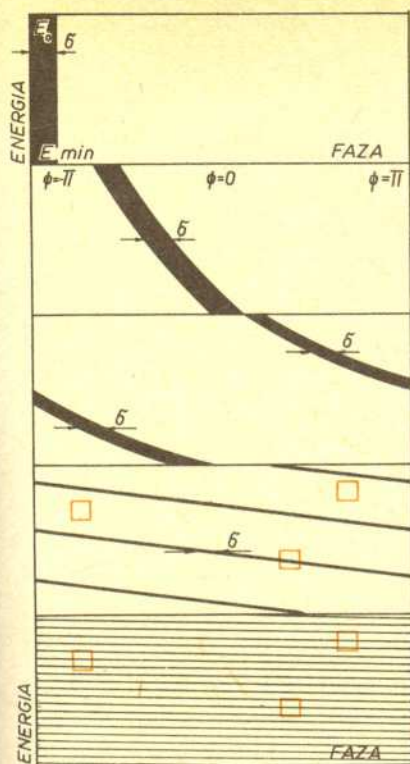
W przypadku, gdy najmniejsze obserwowalne obszary (ich wielkość jest ograniczona np. zdolnością rozdzielczą aparatury pomiarowej) są makroskopowe, uzasadniony jest opis ciągły.

Wróćmy teraz do naszego problemu. Założmy, że ilość kulek jest tak duża, że interesujące nas obszary przestrzeni fazowej są makroskopowe. W takim przypadku czas powrotu może być niezwykle długi. Rozważmy teraz sytuację taką, że w chwili  $t = 0$  wszystkie kulki są rozłożone ze stałą gęstością w pasku  $E \in (E_{min}, E_0)$ ,  $\Phi \in (-\pi, -\pi + \delta)$ , co zostało zilustrowane na rys. 4.

Na kolejnych rysunkach widzimy ewolucję takiego układu. Po czasie długim w porównaniu z najdłuższym okresem oscylacji w pobliżu każdego punktu przestrzeni fazowej będą się znajdować punkty należące do stanów ewolucyjnych układu w dowolnej chwili z przedziału  $\tau_{max} \ll t \ll T_p$ . Te stany ewolucyjne mają charakterystyczną strukturę w postaci równoległych paseczków, których grubość i wzajemne oddalenie maleją w czasie ewolucji.

W pewnym momencie ta subtelna struktura stanie się mniejsza od rozmiarów obszarów makroskopowych. Od tego momentu będziemy mogli mówić, że kulki wypełniają całą przestrzeń fazową. Dokładniejsza analiza dynamiki modelu wykazuje, że tak uśredniona gęstość będzie stała w przestrzeni fazowej. Jest to wynikiem założenia jednorodnego rozkładu gęstości w początkowym pasku, oraz faktu, że podczas ewolucji każda kulka z osobna zachowuje swoją energię.

Rys. 3



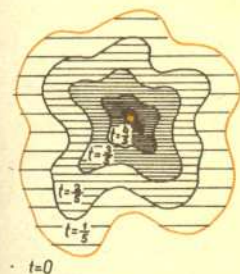
Z powyższego wynika już, że stany charakteryzujące się jednorodnym rozkładem gęstości są wyróżnione i układ prawie przez cały czas będzie znajdował się w takich stanach. Odnosi się to nie tylko do rozważanego przez nas specyficznego rozkładu początkowego. Cechę tę mają wszystkie rozkłady, dla których całkowita liczba cząstek o określonej energii jest taka sama dla wszystkich energii. Jest to istotny warunek, ponieważ brak jest w naszym modelu mechanizmu wyrównującego energię.

Stan odpowiadający jednorodnej gęstości w przestrzeni fazowej nazywa się stanem równowagi. Proces dążenia do stanu równowagi nazywamy relaksacją układu. W omawianym przypadku jest to relaksacja przez mechanizm mieszania faz.

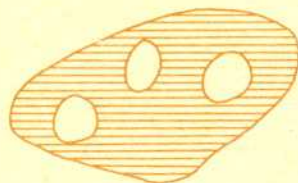
W układach cząstek oddziałujących ze sobą poza mechanizmem mieszania faz istnieje drugi, w wielu przypadkach dominujący, mechanizm relaksacji zderzeniowej. Mechanizm ten prowadzi także do relaksacji energii, ponieważ podczas oddziaływania dwu cząstek następuje przekazanie energii i pędu. Zmiany energii i pędu podczas zderzenia mogą być przy tym bardzo gwałtowne, jak np. w zderzeniach kul bilardowych. Zauważmy, że wartość przekazu silnie zależy od parametru zderzenia. Z tego powodu kula bilardowa po niewielu zderzeniach „zapomina” o swoim stanie początkowym, co oznacza, że układ osiągnął stan równowagi. W gazie składającym się z atomów helu w warunkach normalnych czas relaksacji zderzeniowej wynosi około  $10^{-9}$  s. Tak więc praktycznie rzecz biorąc mamy zawsze do czynienia z gazem zrelaksowanym, znajdującym się (lokalnie) w stanie równowagi termodynamicznej.

Relaksacja przez mieszanie faz odgrywa decydującą rolę w procesie relaksacji tzw. gromad kulistych gwiazd, a także w niektórych procesach zachodzących w plazmie.

Rys. 4



Przestrzeń ściągalna



Przestrzeń nieściągalna

## Zadania, których nie umiemy rozwiązać

Z wyznaczników  $2 \times 2$ , których wyrazami są tylko 0 i 1, największą wartość ma  $\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$  (oraz  $\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$  i  $\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{vmatrix}$ ). Wyznaczniki  $3 \times 3$  złożone z zer i jedynek mogą przyjmować różne wartości, z których największą jest 2.

I oto proste zadanie: jaka jest największa wartość wyznacznika  $n \times n$ , którego wyrazami są tylko 0 i 1? „Proste” nie znaczy „łatwe”. Dla  $n = 4$  można jeszcze wszystko wyliczyć i odpowiedź brzmi: 3, dla  $n = 5$  jest 5, dla  $n = 6$  jest 9, dla  $n = 7$  — 32, ale odpowiedź ogólna nie jest znana, choć problem jest stary. W 1893 roku Hadamard próbował go rozwiązać w wersji ogólniejszej: znaleźć największą wartość wyznacznika  $n \times n$ , którego elementami są liczby o module nie większym niż 1. W 1942 roku Wilkinson wykazał, że oba te zadania są równoważne. Obszerną literaturę do problemu można znaleźć w pracy K. Florka w *Colloquium Mathematicum* z 1963 roku.

Zadanie ma przejrzystą treść geometryczną. Z  $n+1$  wierzchołków  $n$ -wymiarowej kostki (kwadratu, sześcianu, ...) tworzymy sympleks (trójkąt, czworościan, ...). Jak wielka może być jego  $n$ -wymiarowa miara (pole, objętość, ...)?

Odnotujemy, że w 1980 roku rozwiązano pięćdziesięcioletni problem van der Waerdena o permanentach. *Permanent* (brak polskiego terminu)

## Ściąganie przestrzeni

W topologii badane są przestrzenie ściągalne. Oto ich definicja.

Mówimy, że  $X$  jest zbiorem ściągłym (dokładniej: przestrzenią ściągłą), gdy jest takie przekształcenie ciągłe

$$F: X \times [0, 1] \rightarrow X,$$

że dla każdego  $x \in X$  mamy

$$F(x, 0) = x$$

$$F(x, 1) = x_0 = \text{const.}$$

Czy to można zrozumieć? Oczywiście że tak, ale chyba tylko w ten sposób: Interpretujemy parametr  $t \in [0, 1]$  jako czas. Wówczas możemy powiedzieć, że przestrzeń jest ściągła, gdy istnieje ciągłe przejście w czasie od przekształcenia tożsamościowego (w chwili  $t = 0$ ) do przekształcenia „wszystko w jeden punkt” (w chwili  $t = 1$ ).

określamy podobnie jak wyznacznik, z tym tylko, że wszystkie iloczynny odpowiednich wyrazów brane są ze znakiem + nie zaś, jak przy wyznaczniku, ze znakiem zależnym od permutacji numerów wierszy. I tak

$$\begin{vmatrix} a_0 & a_1 \\ a_2 & a_3 \end{vmatrix} = a_0 a_3 + a_1 a_2,$$

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11} a_{22} a_{33} + a_{12} a_{23} a_{31} + a_{21} a_{32} a_{13} + a_{21} a_{12} a_{33} + a_{13} a_{22} a_{31} + a_{11} a_{32} a_{23},$$

itd.

Hipoteza van der Waerdena mówiła, że

$$\text{per } A \geq n!/n^n$$

dla dowolnej macierzy o nieujemnych wyrazach i mającej tę własność, że suma elementów każdego wiersza i każdej kolumny wynosi 1. Ponadto, że równość zachodzi tylko wtedy, gdy wszystkie wyrazy są równe  $1/n$ .

Permanentów używa się w kombinatoryce, a poza matematyką np. w chemii fizycznej. Rozwiązanie problemu van der Waerdena przyszło właśnie ze strony fizyków. Przeglądając stare prace Aleksandrowa fizyk radziecki G. P. Jegoryczew natknął się na nierówność związaną z permanentami stanowiącą kluczowy krok w późniejszym dowodzie. Gdyby nie to, że napisana po rosyjsku praca Aleksandrowa była nieznaną szerszemu kręgowi odbiorców, hipoteza van der Waerdena zostałaby z pewnością udowodniona znacznie wcześniej.