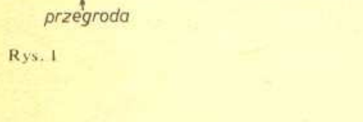
Hipoteza ergodyczna i twierdzenie Sinaja

Dr Henryk ŻOŁĄDEK

Wstęp

Jednym z podstawowych problemów mechaniki statystycznej jest wyjaśnienie procesu dochodzenia do równowagi termodynamicznej w układach makroskopowych, tj. złożonych z wielkiej liczby cząstek (rzędu 10^{23} w 1 cm^3). Stan równowagi termodynamicznej jest to taki stan układu (gazu, cieczy, kryształu itp.), w którym wszystkie cząstki są „dokładnie wymieszane". (Definicje wprowadzanych tu pojęć podamy później.)



Rys. 1

Przykładem procesu osiągania takiej równowagi jest rozprężanie gazu w próżnię (rys. 1). Po usunięciu przegrody gaz w krótkim czasie wypełni cały zbiornik i nigdy nie powróci do stanu początkowego.

Z drugiej strony wiadomo, że klasyczny układ złożony z N cząstek o masie m opisuje się równaniami Newtona

$$m \frac{d^2 x_i}{dt^2} = F_i(x_1, \ldots, x_N), \; i = 1, \ldots, N,$$

gdzie x_i oznacza położenie i-tej cząstki, a F_i siłę na nią działającą. Położenia i prędkości cząstek układu w danej chwili określają jego dalszą ewolucję. Wystarczy rozwiązać równania Newtona.

Znając położenia i prędkości cząstek w danej chwili możemy też odtworzyć dotychczasową historię układu. Co więcej, możemy przypuszczać, że układ po pewnym czasie powróci do stanu początkowego; przecież żaden ze stanów nie jest wyróżniony. Stoi to w jawnej sprzeczności z układem z rysunku 1; jeszcze nikt nie zaobserwował, żeby cząstki gazu zebrały się ponownie w jednej części zbiornika.

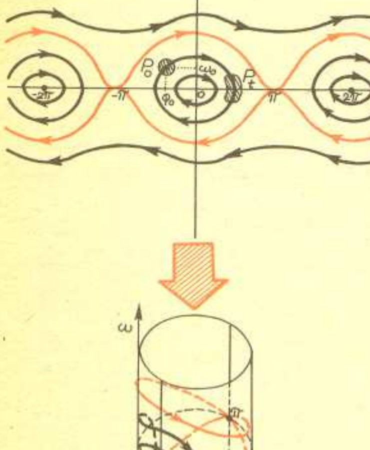
Sprzeczność ta została sformułowana w zeszłym wieku, kiedy Maxwell, Boltzmann i Gibbs tworzyli podstawy mechaniki statystycznej i po dziś dzień stanowi poważne wyzwanie dla fizyków i matematyków.

Celem niniejszego artykułu jest przedstawienie pewnego matematycznego podejścia do powyższego zagadnienia.

Stan układu

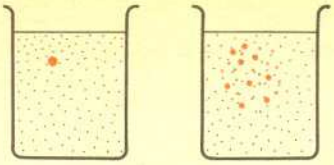
Stan układu mechanicznego jest zdefiniowany przez podanie położeń i prędkości wszystkich cząstek układu. Przestrzeń fazowa jest to zbiór wszystkich stanów układu, czyli zbiór wszystkich możliwych zespołów położeń i prędkości cząstek wchodzących w układ. Na przykład: przestrzenią fazową jednej cząstki znajdującej się w pudełku K jest iloczyn kartezjański $K \times \mathbf{R}^3$, (zbiór par (x, v), gdzie x oznacza położenie, a v — wektor prędkości). Przestrzenią fazową układu złożonego z N cząstek w pudełku K jest $K \times \mathbf{R}^3 \times \ldots \times K \times \mathbf{R}^3$ (N razy).

W podobny sposób wprowadza się pojęcie przestrzeni fazowej innych układów mechanicznych o skończonej liczbie stopni swobody. Na przykład przestrzenią fazową wahadła matematycznego jest nieskończony walec $S^1 \times \mathbf{R}$, a stan jest wyznaczony przez podanie kąta φ wychylenia wahadła od położenia równowagi i prędkości kątowej ω wahadła (rys. 2.).



Rys. 2. Przestrzeń fazowa wahadła matematycznego. Stan P odpowiada punktom leżącym w zaznaczonym krążku, a stan P_t odpowiada punktom leżącym w zdeformowanym pod wpływem ewolucji obrazie tego krążka.

Wprowadzone powyżej pojęcie stanu układu jest wygodne jedynie dla teoretyków. W praktycznych zastosowaniach niemożliwe jest dokładne wyznaczenie stanu. Jest on określony tylko z pewnym przybliżeniem. Poza tym im więcej cząstek układ zawiera, tym więcej położeń i prędkości trzeba wyznaczać i już dla $N = 10$ dostajemy 60 liczb. Widać, że dla N rzędu 10^{23} nasze pojęcie stanu traci jakikolwiek praktyczny sens. Z powyższych powodów w mechanice statystycznej wprowadza się inne pojęcie stanu układu.



Rys. 3. Kropla oliwy pod wpływem zderzeń z molekułami cieczy dyfunduje i znajdzie się w dowolnym miejscu, natomiast kropla soku rozpuści się jednostajnie w całej objętości wody.

Według nowej definicji stanem układu nazywa się rozkład prawdopodobieństwa P (lub miarę probabilistyczną) na przestrzeni fazowej. Położenia i prędkości cząstek nie są wyznaczone jednoznacznie. Można jedynie mówić o prawdopodobieństwie $P(A)$ tego, że położenia i prędkości cząstek leżą w danym obszarze A przestrzeni fazowej. Przykładem takiego stanu może być stan wahadła matematycznego, w którym wychylenie φ i prędkość kątowa ω mogą z jednakowym prawdopodobieństwem znajdować się w kuli o małym promieniu ε i środku (φ_0, ω_0) (rys. 2). Jest to przybliżenie stanu (φ_0, ω_0) w sensie pierwszej definicji.

W dalszym ciągu położenia i prędkości cząstek występujących w układzie będziemy nazywali punktem przestrzeni fazowej (lub prosto punktem) i oznaczać przez X. Punkt przestrzeni fazowej w chwili t oznaczymy przez X_t.

Stan układu na ogół się zmienia, jeśli P jest stanem w chwili 0, to stan w chwili t jest rozkładem prawdopodobieństwa P_t, w którym $P_t(A)$ oznacza prawdopodobieństwo (względem miary P) tego, że w chwili t punkt X będzie się znajdować w obszarze A. Stan P nazywa się stanem równowagi termodynamicznej, jeśli jest stały, tj. $P_t = P$. Mówimy, że układ w stanie P dąży do stanu równowagi P_*, jeśli rozkład P_t dąży do rozkładu P_* przy t rosnącym do nieskończoności (tzn. dla każdego obszaru A w przestrzeni fazowej $P_t(A) \to P_*(A)$).

Posługując się wprowadzonymi pojęciami opisany we wstępie problem można sformułować następująco. Pokazać, że:
1) istnieje tylko jeden stan równowagi termodynamicznej P_*,
2) odpowiada on sytuacji, w której cząstki są wymieszane.
3) dla dowolnego stanu początkowego P mamy $P_t \to P_*$.
Własność 2) oznacza, że układ w stanie równowagi można traktować jako układ makroskopowy, w którym nie są istotne położenia poszczególnych cząstek i który opisuje się parametrami termodynamicznymi, takimi jak temperatura, ciśnienie, gęstość itp. Właśnie przejście od opisu mikroskopowego (za pomocą równań Newtona) do makroskopowego stanowi tę trudność, z którą matematycy i fizycy jeszcze nie uporali się w zadowalającym stopniu.

Ergodyczność i mieszanie

Załóżmy, że stan P układu jest stanem równowagi. Mówimy, że układ w stanie P jest ergodyczny, jeśli dla dowolnego obszaru A przestrzeni fazowej (takiego, że $P(A) > 0$) i dla dowolnego punktu X przestrzeni fazowej punkt $X_t \in A$ dla pewnego t, to znaczy, że punkt w procesie ewolucji znajdzie się w dowolnym kawałku przestrzeni fazowej. Innymi słowy, trajektoria punktu X (zbiór punktów X_t) jest gęsta w przestrzeni fazowej.

Definicję ergodyczności przytoczyliśmy dla formalności. Z punktu widzenia mechaniki statystycznej ważniejsze jest pojęcie mieszania. Mówimy, że układ w stanie równowagi P jest układem mieszającym, jeśli dla dowolnych obszarów A i B przestrzeni fazowej takich, że $P(A) > 0$ i $P(B) > 0$, prawdopodobieństwo tego, że punkt X startujący z $A (X \in A)$ znajdzie się w chwili t w obszarze B $(X_t \in B)$ dąży do $P(B)$ przy t rosnącym do nieskończoności. Oznacza to jednostajne rozpływanie się dowolnego obszaru przestrzeni fazowej w całej przestrzeni fazowej.

Oczywiście, każdy układ mieszający jest ergodyczny. Najbardziej obrazowymi przykładami ukazującymi różnicę między ergodycznością i mieszaniem są: bardzo mała kropla oliwy w szklance z wodnym roztworem alkoholu o gęstości równej gęstości oliwy i kropla soku w szklance z wodą (rys. 3). Na rysunku 4 przedstawione są inne przykłady układów ergodycznych i nieergodycznych.

Ważność pojęcia mieszania ilustruje następujące

Twierdzenie 1. Jeśli układ w stanie równowagi P jest mieszający, a Q jest innym stanem układu, to $Q_t \to P$ przy $t \to \infty$.

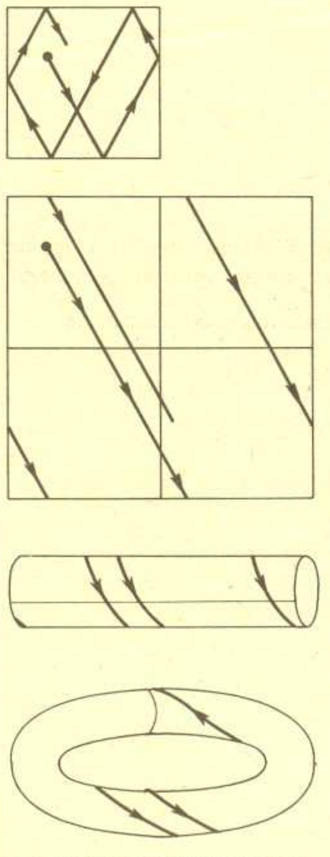
Nie będziemy dowodzić tego twierdzenia, które w gruncie rzeczy jest prostym wnioskiem z definicji mieszania (o ile znamy teorię całki i miary i założymy, że stan Q jest dostatecznie regularny).

Słynna Hipoteza Ergodyczna mówi:

układy mechaniki statystycznej w stanie równowagi są układami mieszającymi.

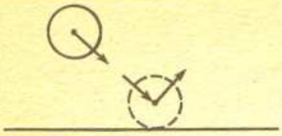
Dążenie do równowagi nie jest jedynym wnioskiem płynącym z Hipotezy Ergodycznej. Wynika z niej także, że dla typowego punktu przestrzeni fazowej część czasu, gdy punkt ten przebywa w obszarze A, jest proporcjonalna do względnej objętości obszaru A. W przykładzie z rysunku 1 względna objętość obszaru przestrzeni fazowej odpowiadająca skupieniu cząstek w jednej części zbiornika jest rzędu $(1/2)^{10^{23}}$. Zatem średni czas powrotu do stanu wyjściowego jest rzędu $2^{10^{23}}$ s (wiek Wszechświata wynosi około 10^{17} s).

Nic dziwnego, że Hipoteza Ergodyczna skupiła swego czasu i skupia nadal uwagę wielu badaczy.



Rys. 4. Bilard w kwadracie K. Łatwo zauważyć, że ten układ jest równoważny swobodnemu ruchowi cząstki w torusie T^2 (czterokrotnie większemu od kwadratu K). Zajmijmy się zatem swobodnym ruchem w T^2. Jeśli wybierzemy stan, w którym wszystkie punkty przestrzeni fazowej $(T^2 \times S^1)$ są jednakowo prawdopodobne, to układ nie jest ergodyczny, ponieważ trajektorie leżą na powierzchniach $\varphi = \text{const}$, które nie są gęste w $T^2 \times S^1$. Jeśli wybierzemy stan, w którym dopuszczone są jedynie punkty z $\varphi = \varphi_0$, to układ jest ergodyczny, jeśli $\operatorname{tg} \varphi_0$ jest liczbą niewymierną i nie jest ergodyczny, jeśli $\operatorname{tg} \varphi_0$ jest liczbą wymierną. W żadnym ze stanów układ nie jest mieszający.

Twierdzenie Sinaja

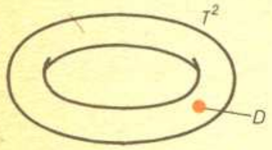


Rys. 5

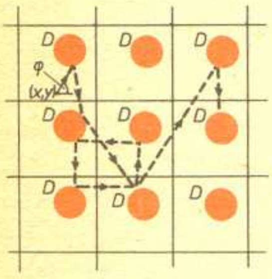
Rozważmy układ N kul o jednakowej średnicy d, jednakowej masie i jednakowej szybkości, znajdujących się w prostopadłościennym pudełku. Ruch oddzielnej kuli jest jednostajny i prostoliniowy do momentu zderzenia się z inną kulą lub ze ścianą pudełka. (Przy zderzeniu kąt padania równa się kątowi odbicia — składowa styczna prędkości pozostaje taka sama, a składowa normalna zmienia znak — rys. 5.) Okazuje się, że stan, w którym wszystkie konfiguracje kul i ich prędkości są jednakowo prawdopodobne, jest stanem równowagi.

W 1963 roku matematyk radziecki Jakow G. Sinaj opublikował twierdzenie o mieszaniu powyższego układu. Jest ono cytowane w niemal wszystkich podręcznikach fizyki statystycznej. Jednak jego dowód nie został jeszcze do tej pory ściśle i w pełni przedstawiony. Praca Sinaja z 1963 roku liczy 4 strony i zawiera tylko ogólne wskazówki, jak powyższego twierdzenia należy dowodzić. W pracy z 1970 r. Sinaj udowodnił własność mieszania dla układu typu bilard. Rozwinął tam technikę, za pomocą której można rozważać układ sztywnych kul w pudełku. Część trudności technicznych związanych z układem kul została przezwyciężona w pracy ucznia Sinaja, N. I. Czernowa, z 1982 r. Wydaje się, że do pełnego dowodu niewiele brakuje i wkrótce zostanie on opublikowany.

Bilard

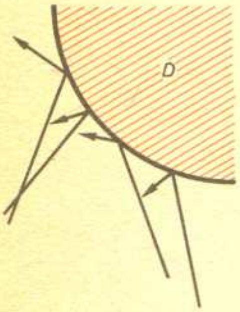


Rys. 6



Rys. 7

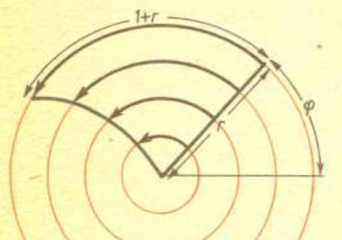
Przyczyna ergodyczności i mieszania układów mechanicznych leży w ich niestabilności. Zaprezentujemy to zjawisko na przykładzie bilardu na dwuwymiarowym torusie T^2, z wyrzuconym dyskiem D (rys. 6). (Jest on równoważny bilardowi w kwadracie z wyrzuconym dyskiem.) Wygodnie jest przedstawić ten układ jako bilard na płaszczyźnie z wyrzuconą okresową rodziną dysków (rys. 7). Cząstka (jedna) porusza się prostoliniowo z prędkością 1 i odbija się od dysków zgodnie z zasadą: kąt padania równa się kątowi odbicia. Utożsamiając na płaszczyźnie punkty różniące się o współrzędne całkowite otrzymuje się z powrotem torus i ruch na nim. Punkt przestrzeni fazowej jest określony przez położenie cząstki $(x, y) \in T^2 \setminus D$ i kierunek prędkości (albo jej kąt nachylenia φ do osi $0X$, $\varphi \in S^1$). Zatem przestrzeń fazowa jest trójwymiarowa i równa $(T^2 \setminus D) \times S^1$. Z praktycznego punktu widzenia trudno jest śledzić jedną cząstkę (patrz rys. 7). Wygodniej jest wybrać mały zespół (komórkę) cząstek leżących w pewnym małym kawałku $T^2 \setminus D$ z prędkościami leżącymi w małym otoczeniu wybranej prędkości.



Rys. 8

Zobaczmy, co będzie się działo z komórką w późniejszych chwilach. Dopóki cząstki z komórki nie zderzą się z dyskiem D, dopóty komórka zachowuje swoją wyjściową formę. Natomiast po odbiciu od dysku cząstki rozbiegną się (rys. 8). Widać, że nasza komórka po odbiciu rozpłynie się. Nastąpi duży rozrzut prędkości. W trakcie dalszego ruchu rozrzut prędkości nie zmienia się, natomiast rozrzut położeń stale powiększa się. Przy następnym odbiciu zachodzi nowy rozrzut prędkości i idący za tym rozrzut położeń. Po kilku odbiciach nie sposób narysować obrazu wyjściowej komórki. Jest on dokładnie rozmazany. Sinajowi udało się ująć to zjawisko w ścisłe matematyczne formuły i udowodnić ergodyczność bilardu na torusie.

Układ dwóch kul w kwadracie jest ergodyczny (wynika to z twierdzenia Sinaja), natomiast układ dwóch kul na torusie T^2 nie jest ergodyczny. Przyczyna nieergodyczności ostatniego układu leży w tym, że suma prędkości $v_1 + v_2$ obu kul jest stała w trakcie ruchu na torusie (ale nie w kwadracie). Stąd wynika, że trajektorie punktów nie są zbiorami gęstymi (leżą na powierzchniach $v_1 + v_2 = \text{const}$).



Rys. 9. Ewolucja (skokowa) układu dana jest przekształceniem $(r, \varphi) \to (r, \varphi + 1 + r)$. Okręgi $r = \text{const}$ są zachowywane i ewolucja na tych okręgach sprowadza się do obrotu o kąt zmieniający się z r. Układ ten nie jest ergodyczny, bo trajektoria dowolnego punktu leży na okręgu i nie jest gęsta. Rozważmy teraz przekształcenie płaszczyzny, które mało różni się od powyższego i zachowuje pole (tzn. kawałek płaszczyzny przeprowadza na kawałek o takim samym polu). Twierdzenie KAM mówi, że w nowym układzie część trajektorii nadal będzie leżała na zamkniętych krzywych (bliskich okręgom $r = \text{const}$). Przedstawiony tu układ pochodzi od pewnych rzeczywistych układów fizycznych.

Układ złożony z kilku kul można sprowadzić do układu typu bilard w przestrzeni wielowymiarowej. Jeśli oznaczymy przez q_i, $i = 1, \ldots, N$, położenia środków kul, a przez $q = (q_1, \ldots, q_n)$ punkt w przestrzeni $3N$-wymiarowej, to otrzymamy ruch cząstki w przestrzeni $3N$-wymiarowej. Musimy jednak wprowadzić pewne ograniczenia — odległość między środkami kul nie jest mniejsza niż d i odległość środków kul od ścianek pudełka nie jest mniejsza niż $d/2$. (Te ograniczenia odpowiadają wyrzuceniu dysku D w przypadku dwuwymiarowego bilardu.) Prawo — kąt padania równa się kątowi odbicia — pozostaje nie zmienione. Natomiast wyrzucony obszar nie jest ściśle wypukły (dokładniej, brzeg jego zawiera odcinki). W tym miejscu leży trudność, którą pokonał Czernow.

Uwagi końcowe

Na koniec powiemy kilka słów o ograniczoności zastosowania Hipotezy Ergodycznej. Otóż układ sztywnych kul jest jednym z nielicznych układów ergodycznych. Wskazują na to eksperymenty numeryczne i współczesna teoria układów dynamicznych. (Wskazuje na to ważne twierdzenie udowodnione przez A. N. Kołmogorowa, W. I. Arnolda i J. Mosera, tzw. twierdzenie KAM.) Tak więc w tych przypadkach potrzeba innych podejść do problemu nieodwracalności. Oczywiście takie podejścia istnieją, jednakże są matematycznie trudne w realizacji ze względu na złożoność problemu i trudności rachunkowe.