



WYKŁAD 23

**Podstawy klasycznej  
mechaniki statystycznej;  
Hipoteza ergodyczna**

- Teoria ergodyczności: co to jest?
- Średniowanie po czasie vs. średniowanie po rozkładach
- Twierdzenie Poincare o powrocie
- Twierdzenie ergodyczne (Birkhoff, Ter Haar)
- Hipoteza semi-ergodyczna
- Zagadnienie równowagi termodynamicznej

Ktoś mógłby zapytać: po co wracać do klasycznej mechaniki statystycznej i zajmować się jej podstawami skoro mamy kwantową mechanikę statystyczną. Powodem dla którego chciałbym wrócić do tych zagadnień jest tzw.

## Teoria ergodyczności

-przez wiele lat domena matematyków – przeżywa w ostatnim trzydziestoleciu renesans w związku z rozwojem komputerów.

**Teoria ergodyczności :** dotyczy zachowania się funkcji rozkładu prawdopodobieństwa dla układów dynamicznych podlegających (założmy dla prostoty) równaniom ruchu Hamiltona

Jak zobaczymy, rozkład prawdopodobieństwa w przestrzeni fazowej zachowuje się jak płyn szczególnego rodzaju:

- nieściśliwy
- płynący bez dyfuzji

**Jeśli  $\Gamma \equiv (p_1, p_2, \dots, p_s, q_1, q_2, \dots, q_s) \equiv (pq) \equiv (x)$  jest 2s wymiarową przestrzenią fazową, to płyn taki można zcharakteryzować dwojakim sposobem przepływu w  $\Gamma$**

Mamy

- Przepływ ergodyczny
- Przepływ mieszający

Dla układów, których dynamikę można opisać jako przepływ ergodyczny otrzymuje się jednoznaczną, stacjonarną funkcję rozkładu prawdopodobieństwa stałą na powierzchni stałej energii i charakteryzującą układ w równowadze.

Jednak układ ergodyczny niekoniecznie osiąga stan równowagi (jeśli w nim nie był od początku). Aby układ mógł zrelaksować do równowagi przepływ musi być mieszalny.

Układy mieszalne są ergodyczne, lecz niekoniecznie na odwrót.

Trudno dowieść, czy konkretny układ rzeczywisty jest ergodyczny i mieszalny (zrobiono to jedynie dla kilku modelowych i raczej prostych układów).

Dyskusję rozpoczniemy od tzw. Hipotezy Ergodycznej

# Ruch w klasycznym formalizmie Hamiltonowskim

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}; \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$



- Istnieje jedna i tylko jedna trajektoria przechodząca przez każdy punkt w przestrzeni fazowej
- Elementarna objętość jest zachowywana w trakcie ruchu

Z drugiej strony w mechanice statystycznej nie rozważamy układów z ostro zadanymi warunkami początkowymi.

Raczej zadane są warunki brzegowe selekcjonujące pewien podzbiór dozwolonych (mikroskopowych) warunków początkowych

Zadajemy więc, tak naprawdę, jako "warunek początkowy" pewną gęstość prawdopodobieństwa na  $\Gamma$

$$\rho_0 = \rho_0(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \equiv \rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t = 0)$$

Prawdopodobieństwo, że warunek początkowy układu znajduje się w obj.  $d\Gamma$  wynosi

$$\rho_0(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d\Gamma$$

**Zadanie: znaleźć ewolucję rozkładu prawdopodobieństwa**

$$\rho = \rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$$

$\rho_0(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  reprezentuje zespół (Gibbsa) o których wiemy, że są makroskopowo identyczne (i nieoddziaływujące).

Taka 'ciecz' o gęstości  $\rho_0(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  zachowuje się jak ciecz nieściśliwa oraz punkty nie rozpraszają się na sobie.

Oznaczmy

$$\{\mathbf{x}_i\} \equiv \{\mathbf{q}, \mathbf{p}\}$$

$$\{\mathbf{v}_i\} \equiv \{\dot{\mathbf{x}}_i\} \equiv \{\dot{\mathbf{q}}, \dot{\mathbf{p}}\}.$$

Wtedy  $\rho$ , oznaczające gęstość takiej cieczy musi spełniać 'zasadę zachowania masy' czyli równanie ciągłości:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{\mathbf{v}}) = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0$$

$$\left. \begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} &= 0 \\ \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \rho &= -\{H, \rho\} \end{aligned} \right\}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\}$$

(Twierdzenie  
Liouville'a)

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [H, \hat{\rho}]$$

(przypominam  
odpowiednik  
kwantowy)

Chciałbym także przypomnieć, że w formalizmie Hamiltona mamy ogólnie:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, H\}$$

tzn tw. Liouville'a jest równoważne warunkowi

$$\frac{d\rho}{dt} = 0 \quad (\text{wzdłuż trajektorii})$$

Co oznacza, że objętość obszaru w którym znajduje się grupa punktów, nie ulega zmianie.

Mamy również tw. Poincarego o powrocie:

Dla dowolnego systemu zachowawczego, którego ruch ogranicza się do skończonej objętości przestrzeni fazowej, trajektoria musi powrócić dowolnie blisko swoich warunków początkowych po skończonym czasie.

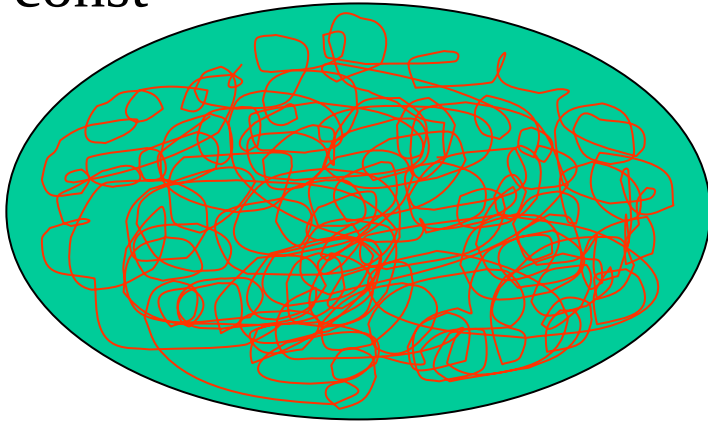
## HIPOTEZA ERGODYCZNA

Rozważmy izolowany układ. Ponieważ energia jest całką ruchu układ taki będzie się poruszał po powierzchni stałej energii.

DEF.

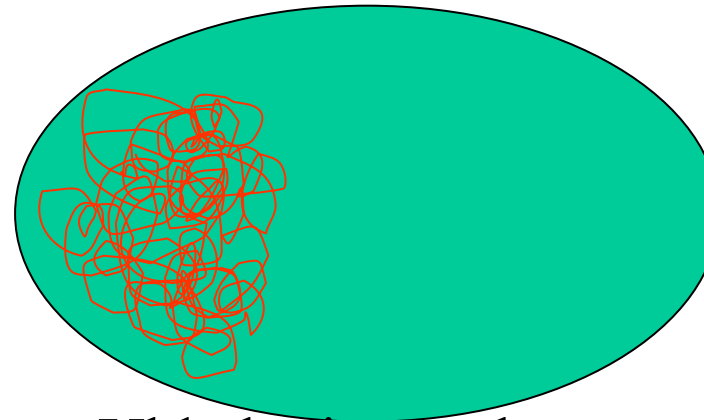
Układ jest ergodyczny na powierzchni stałej energii, jeśli prawie wszystkie punkty na tej powierzchni (dopuszczamy zbiór miary zero) poruszają się tak, że przechodzą przez każde małe otoczenie na tej powierzchni

$E = \text{const}$



Układ ergodyczny

$E = \text{const}$



Układ nieergodyczny

## TWIERDZENIE ERGODYCZNE (sformułowane przez Birkhoffa i Ter Haara )

**Definiujemy**

**średnią mikrokanoniczną:**

$$\langle f \rangle_{E=\text{const}} = \frac{1}{\Omega(E)} \int_{\Gamma} \delta[H(p, q) - E] f(p, q) d\Gamma$$

gdzie

$$\Omega(E) = \int_{\Gamma} \delta[H(p, q) - E] d\Gamma = \frac{d}{dE} \int_{0 \leq H \leq E} d\Gamma$$

jest liczbą mikrostanów na powierzchni stałej energii.

Definiujemy także średnią po czasie:

$$\langle f \rangle_T = \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} \overbrace{f(p(t), q(t))}^{\text{wzdłuż trajektorii}} dt$$

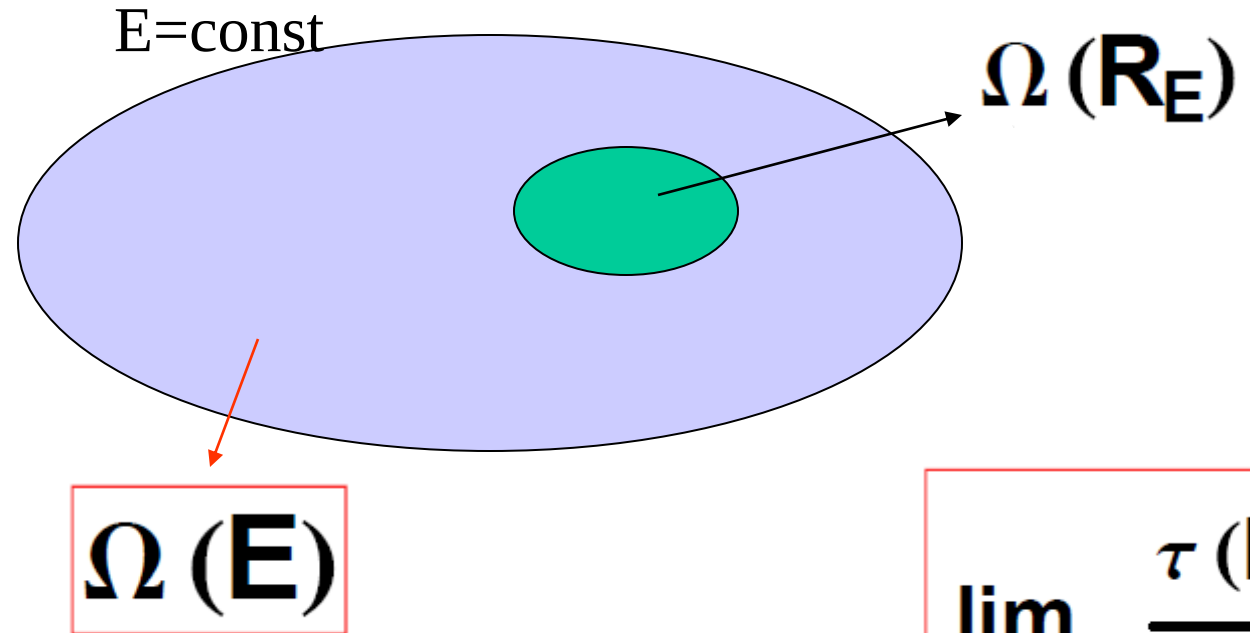
Dla układów ergodycznych mamy:

$$\bullet \langle f \rangle_\infty \stackrel{\text{df}}{=} \lim_{T \rightarrow \infty} \langle f \rangle_T$$

istnieje dla prawie wszystkich punktów na pow.  $E = \text{const}$  i nie zależy od  $t_0$ , oraz

$$\bullet \langle f \rangle_\infty = \langle f \rangle_E$$

Dodatkowo, ułamek czasu który układ ergodyczny spędza w dowolnym obszarze na powierzchni stałej energii jest równy ułamkowi tej powierzchni:

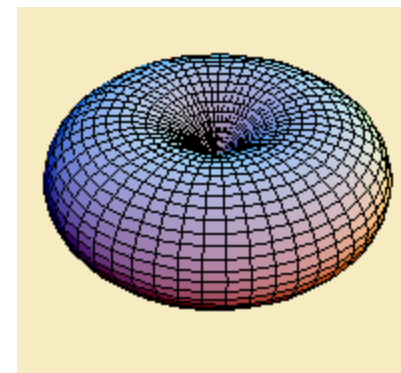
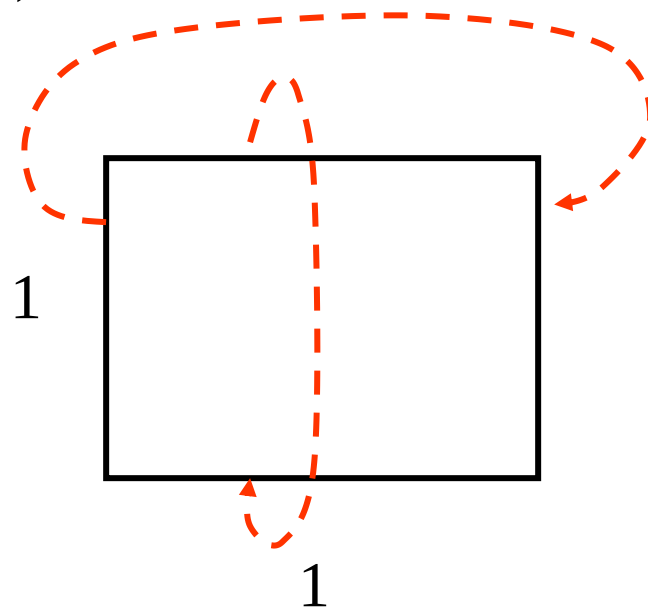


$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\tau(R_E)}{T} = \frac{\Omega(R_E)}{\Omega(E)}$$

## Przykłady układów ergodycznych i nie-ergodycznych

(a) sztywne kulki (ergodyczne - przynajmniej dla niezbyt dużych gęstości)

(b) ruch na torusie



$\begin{pmatrix} \dot{p} = \alpha \\ \dot{q} = 1 \end{pmatrix}$ : jeśli  $\alpha = \frac{m}{n}$  jest wymierna, wtedy trajektoria jest periodyczna i nie ma ergodyczności (w przeciwnym razie układ jest ergodyczny)

(c) Oscylatory harmoniczne: nieergodyczne

(d) Dużym zaskoczeniem było pokazanie przez Fermiego-Pastę-Ulama (1955), że układ anharmonicznych oscylatorów (przy słabym anharmonizmie i dla małej liczby oscylatorów) nie jest ergodyczny.  
(obserwuje się jednak przejście do chaosu przy zwiększaniu stałej sprzężenia

Ogólnie: nie wiadomo. Przyjmuje się, że układy interesujące z pktu widzenia fizyka są ergodyczne.

Uwaga: w przejściach fazowych mamy na ogół do czynienia ze złamaniem ergodyczności

## Hipoteza semi-ergodyczna

Przyjmuje się:

$$\bullet \quad \langle \mathbf{f} \rangle_{\infty} = \langle \mathbf{f} \rangle_E$$

Przy założeniu (słabego) oddziaływania z otoczeniem.

# Ewolucja do stanu równowagi

Przypuśćmy, że wystartowaliśmy z dowolnej funkcji rozkładu  $\rho(p, q, t=0)$ . Chcemy wiedzieć, czy układ ergodyczny ma szansę dojścia do równowagi zadanej przez rozkład stacjonarny:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad \Rightarrow \quad \{H, \rho\} = 0$$

Ewolucja do stanu równowagi wymaga silniejszych założeń niż ergodyczność. Wymagany jest brak korelacji pomiędzy dowolnym stanem początkowym i stanem dla dużych czasów (założenie aby układ był mieszający)

**Formalnie mieszalność definiujemy w następujący sposób:**  
**dla gładkich funkcji  $f(x)$  i  $g(x)$  musimy mieć:**

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \frac{1}{\Omega(E)} \int \delta[H(x) - E] f(x) g(x(t)) d\Gamma$$
$$= \frac{1}{\Omega(E)} \int \delta[H(x) - E] f(x) d\Gamma \times \frac{1}{\Omega(E)} \int \delta[H(x) - E] g(x) d\Gamma$$

**(w szczególności jeśli  $g$  jest zależną od czasu funkcją rozkładu wtedy – asymptotycznie możemy używać rozkładu mikro – kanonicznego)**

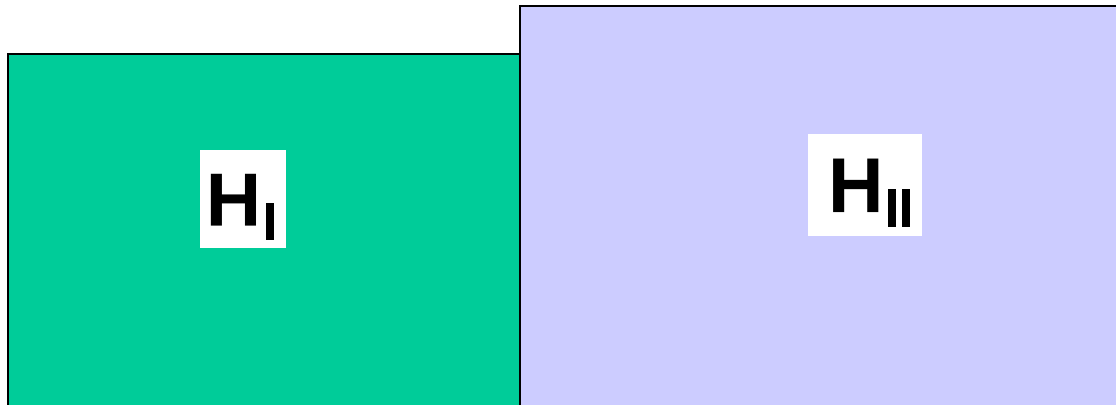
# Równowaga, niezależność statystyczna i forma $\rho(p, q)$

W równowadze  $\rho = \rho_{eq}$  (zakładamy, że układ jest mieszający):

$$\frac{\partial \rho_{eq}}{\partial t} = 0 \implies \{H, \rho_{eq}\} = 0 \implies \rho_{eq} \text{ jest całką ruchu}$$

Ponieważ  $\rho_{eq}$  nie jest niezależną całką ruchu więc musi być funkcją zależną od całek ruchu

Niech



$$H \approx H_I + H_{II}$$

(dla makroskopowych podukładów)

Wtedy, z niezależności statystycznej

$$H \simeq H_I + H_{II} \quad \text{implikuje} \quad \rho_{eq} \simeq \rho_I \rho_{II}$$

$$\Rightarrow \ln(\rho_{eq}) \simeq \ln(\rho_I) + \ln(\rho_{II})$$

$\Rightarrow \ln(\rho_{eq})$ , będąc funkcją addytywną musi być liniową kombinacją wyłącznie addytywnych całek ruchu

Jest tylko 7 niezależnych, addytywnych całek ruchu:

$E, \vec{P}, \vec{M}$ . Ponadto addytywnymi wielkościami spełniającymi prawa zachowania są wielkości nie – mechaniczne: liczby cząstek danego rodzaju  $\{N_k\}$  oraz całkowita objętość układu

Zatem dla podukładu  $a$  ( $a=I, II$ ):

$$\ln(\rho_a) = \alpha_a - \beta \mathbf{E}_a + \vec{\gamma} \cdot \vec{\mathbf{P}}_a + \vec{\delta} \cdot \vec{\mathbf{M}}_a + \xi \mathbf{V}_a + \sum_k \chi_k \mathbf{N}_{k,a},$$

gdzie  $\beta$ ,  $\vec{\gamma}$ ,  $\vec{\delta}$ ,  $\xi$ ,  $\chi_k$  są parametrami do wyznaczenia, których wartości są identyczne dla wszystkich oddziaływujących podukładów we wzajemnej równowadze (ze względu na wymianę odpowiedniej addytywnej wielkości spełniającej prawo zachowania).

## Komentarz dotyczący pędu i krętu

Układ równowagowy (izolowany) conajwyżej

- (a) Porusza się ruchem jednostajnym postępowym
- (b) Ewentualnie obraca się jednostajnie wokół osi nieruchomej względem ruchu jednostajnego środka masy;

- $\Rightarrow$  pęd całkowity jest nieobserwowalny i może być pominięty;
- $\Rightarrow$  kręt całkowity i ruch obrotowy jednostajny jest nieodróżnialny od pola sił zewnętrznych: sił odśrodkowych i sił Coriolisa  $\rightarrow$  te można zawsze dodać do hamiltonianu;

⇒ Zatem pęd i moment pędu zwykle pomijamy  
(wyjątkiem może być rozkład mikrokanoniczny, gdzie  
istnienie tych całek ruchu decyduje o wymiarze hiperpowierzchni  
w przestrzeni fazowej)

Po przyjęciu obecnie np. formuły Boltzmannna (ev. Shannona)  
dla entropii odtworzymy znowu wszystkie rozkłady o których  
była mowa poprzednio.

Szanowni Państwo,

To jest ostatni z cyklu wykładów `Dla Zainteresowanych`  
Zapraszam do dyskusji poruszanych tematów, a na koniec  
.....

Kilka porad przed sesją:

Nie poddajemy się presji otoczenia

Nie tracimy głowy w  
najtrudniejszych sytuacjach:



Praca zespołowa może przynieść korzyści



Nie zapominamy także o relaksie

KONIEC

