

مکانیک کلاسیک احتمالاتی

سهراب ملکی

تابستان ۱۴۰۳

چکیده

ساختار مکانیک کلاسیک بر پایه داده های معین است؛ یعنی اگر شرایط اولیه سیستم مکانیکی را دقیقاً مشخص کنیم، وضعیت سیستم در لحظه دلخواه t دقیقاً مشخص می شود. به وضوح در آزمایشگاه و کاربرد واقعی، چنین برآورد دقیقی از کمیت ها و شرایط اولیه سیستم ممکن نیست و معمولاً شرایط اولیه را به همراه یک خطا بدست می آوریم که همین خطا، به معنی احتمالاتی بودن سیستم است.

در این مقاله، ابتدا یک سیستم مکانیکی کلی را در نظر می گیریم و به بررسی این موضوع می پردازیم که اگر شرایط اولیه را به صورت توزیع احتمال داشته باشیم، وضعیت سیستم در زمان t به صورت یک توزیع احتمال چگونه است. سپس این موضوع را به سیستم های تک ذره ای یک بعدی کاهش می دهیم و آن ها را بررسی خواهیم کرد.

۱ همیلتونی و فضای فاز به عنوان یک سیال

با توجه به این موضوع که وضعیت یک سیستم مکانیکی N ذره ای در هر لحظه از تکانه و مکان ذرات آن مشخص می شود، می توان یک فضای $6N$ بعدی به نام فضای فاز متشکل از مختصه های مکان و تکانه در نظر گرفت که وضعیت سیستم در هر لحظه، نقطه ای در این فضا است.

اگر تابع همیلتونی سیستم مشخص باشد، با قرار دادن سیستم در هرکجای فضای فاز می توان تحول این نقطه را در این فضا بررسی کرد. با توجه به مرتبه اول بودن معادلات حرکت این نقطه، اگر سیستم را در هر نقطه ای قرار دهیم، بلافاصله با سرعتی مشخص حرکت خواهد کرد. این مسئله، این ایده را به ما می دهد که با مشخص شدن همیلتونی، یک میدان سرعت (مانند سیال) در فضای فاز ایجاد می شود که با قرار دادن سیستم در هر نقطه، سیستم بر روی خطوط شار این سیال حرکت می کند.

۱.۱ سیال تراکم ناپذیر

برای یک سیال ایده آل تراکم ناپذیر، می توانیم معادلات حرکت را به صورت زیر بنویسیم:

• قانون دوم نیوتن:

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = -\nabla \phi - \nabla p$$

• پایستگی جرم:

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

• تراکم ناپذیری:

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho = 0$$

معادله اول، معادله حرکت است که در مسئله ما، این معادله فرق می‌کند که در بخش‌های بعدی آن را بدست می‌آوریم. اما دو معادله آخر، معادلات قید هستند که مشخص کننده نوع سیال‌اند. معادله پایداری جرم را می‌توان به صورت زیر نوشت:

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

با جایگذاری جمله اول یعنی $\partial \rho / \partial t$ از معادله تراکم‌ناپذیری، این معادله به شکل زیر درمی‌آید:

$$-\nabla \rho \cdot \mathbf{v} + \nabla \rho \cdot \mathbf{v} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

پس پایداری جرم و تراکم‌ناپذیری سیال به معنی آن است که میدان سرعت سیال، واگرایی ندارد:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

۲.۱ تراکم‌ناپذیری سیال فضای فاز

حال به بررسی سیال گفته شده در فضای فاز می‌پردازیم. ابتدا بردار مکان و میدان سرعت را در این فضا تعریف می‌کنیم:

$$\mathbf{r} \equiv \sum_{i=1}^{\tau N} q_i \hat{q}_i + p_i \hat{p}_i$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}) \equiv \sum_{i=1}^{\tau N} \dot{q}_i(\mathbf{r}) \hat{q}_i + \dot{p}_i(\mathbf{r}) \hat{p}_i$$

که بردارهای \hat{q}_i و \hat{p}_i ، همچنین کمیت‌های \dot{q}_i و \dot{p}_i ، مربوط به سیستمی است که در آن نقطه گذاشته شده پس این سرعت تعریف شده یک میدان برداری بر روی \mathbf{r} است. از معادلات همیلتون داریم:

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}$$

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}$$

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^{\tau N} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \hat{q}_i - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \hat{p}_i$$

عملگر نابلا در این فضا به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\nabla \equiv \sum_{i=1}^{\tau N} \frac{\partial}{\partial p_i} \hat{p}_i + \frac{\partial}{\partial q_i} \hat{q}_i$$

پس واگرایی (دیورژانس) میدان سرعت این سیال، به صورت زیر است:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \sum_{i=1}^{\tau N} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial q_i} - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial p_i} = 0$$

به نظر می‌رسد سیال همیلتونی و فضای فاز، سیالی تراکم‌ناپذیر است. به هر حال برای اثبات دقیق آن، از پایداری تعداد سیستم‌ها استفاده می‌کنیم (معادل پایداری جرم در سیال ایده‌آل). کمیت ρ را تعداد سیستم بر واحد حجم (حجم در فضای $6N$ بعدی فاز) تعریف می‌کنیم. پایداری آن به صورت زیر است:

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

باتوجه به این که نشان دادیم $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ ، پس مشتق همرفتی چگالی سیستم‌ها صفر است:

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

که نشان‌دهنده‌ی تراکم‌ناپذیری این سیال است. پس اگر تعدادی سیستم را در حجم مشخصی در فضای فاز رها کنیم تا تحول کنند، حجمی که این مجموعه از سیستم‌ها اشغال می‌کند با زمان تغییر نمی‌کند. از این مسئله استفاده خواهیم کرد.

۲ معادله تحول توزیع‌های احتمال

نوشتار: در اینجا، هرکجا q, p بدون اندیس آورده شد، منظور مجموعه‌ای از همه q_i, p_i هاست:

$$q \equiv \{q_1, q_2, \dots\}, \quad p \equiv \{p_1, p_2, \dots\}$$

تعریف توزیع احتمال: اگر در زمان t توزیع احتمال سیستم در فضای فاز به صورت $f(q, p, t)$ باشد، به این معنیست که احتمال حضور سیستم در المان حجم dv در فضای فاز برابر است با

$$f(q, p, t) dv$$

همچنین المان حجم در فضای فاز عبارت است از:

$$dv = \prod_{i=1}^{rN} dp_i dq_i$$

این تابع تابعی بهنجار نیز هست زیرا احتمال کل باید برابر واحد شود. پس داریم:

$$\int_v f(q, p, t) dv = 1$$

در اینجا، توزیع احتمال در فضای فاز را به صورت زیر نشان می‌دهیم ولی کمی جلوتر، نوشتار آن را تغییر می‌دهیم:

$$f(q, p, t | f_0(q, p, t_0))$$

این تابع توزیع احتمال فضای فاز در زمان t است در صورتی که توزیع احتمال در زمان t_0 به صورت $f_0(q, p, t_0)$ باشد. با توجه به این موضوع که تنها $s \equiv t - t_0$ اهمیت دارد، می‌توان تابع توزیع را به صورت زیر نیز نمایش داد:

$$f(q, p, s | f_0(q, p, t_0))$$

حال برای بدست آوردن معادله تحول توزیع احتمال، با توجه به این موضوع عمل می‌کنیم: در بازه زمانی کوتاه τ ، "افزایش احتمال حضور سیستم در المان حجم dv " برابر است با "کاهش احتمال خروج سیستم از داخل این حجم به جای دیگر" به علاوه "افزایش احتمال ورود سیستم از جای دیگر به داخل این حجم". این استدلال به زبان ریاضی به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial s} \tau dv = & - \int_{v'} f(q, p, s | f_0(q, p, t_0)) dv' f(q', p', \tau | f_0(q, p, t_0)) dv' \\ & + \int_{v'} f(q', p', s | f_0(q, p, t_0)) dv' f(q, p, \tau | f_0(q', p', t_0)) dv' \end{aligned}$$

سمت چپ تساوی درواقع $\tau dv \frac{\partial}{\partial s} f(q, p, s | f_0(q, p, t_0))$ است. در انتگرال اول، جمله‌هایی که تابع متغیرهای زبردار (پریم‌دار) نیستند را از انتگرال بیرون میکشیم:

$$-f(q, p, s | f_0(q, p, t_0)) dv \int_{v'} f(q', p', \tau | f_0(q, p, t_0)) dv'$$

که به دلیل بهنجار بودن تابع توزیع احتمال، انتگرال برابر واحد می‌شود:

$$-f(q, p, s|f.(q., p.)) dv$$

پس معادله تحول توزیع احتمال به شکل زیر درمی‌آید:

$$\frac{\partial f}{\partial s} \tau = \int_{v'} f(q', p', s|f.(q., p.)) f(q, p, \tau|f.(q', p')) dv' - f(q, p, s|f.(q., p.))$$

معادلاتی که تا به اینجا نوشته شدند، معادلات قیدی بودند که انتظار داشتیم تابع توزیع از آن‌ها پیروی کند اما چیزی از قوانین فیزیک در معادلات نوشته شده وجود ندارد. درواقع، فیزیک مسئله در جمله دوم انتگرال نهفته شده است؛ یعنی این قوانین فیزیک هستند که احتمال ورود از نقاط دیگر فضای فاز به حجم مورد نظر را مشخص می‌کنند.

برای بدست آوردن این عبارت، از قضیه ثابت شده در بخش ۲.۱ استفاده می‌کنیم. با توجه به این که سیال فضای فاز تراکم‌ناپذیر است، سیستم‌هایی که در یک لحظه در حجم dv باشند، در مدت زمان کوتاه τ قبل از این لحظه نیز قطعاً در یک ناحیه دیگر به همان حجم dv بوده‌است. با استفاده از نکته گفته شده، می‌بینیم این امر که سیستم از المان حجم واقع در

$$\mathbf{r}' = (q'_1, q'_2, \dots, p'_1, p'_2, \dots)$$

وارد المان حجم واقع در

$$\mathbf{r} = (q_1, q_2, \dots, p_1, p_2, \dots)$$

شود، تنها در صورتی ممکن است که:

$$q_i = q'_i + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \tau$$

$$p_i = p'_i - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \tau$$

این امر را برای یک توزیع احتمال به صورت زیر بیان می‌کنیم:

$$f(q, p, \tau|f.(q', p')) = \prod_{i=1}^{\tau N} \delta \left(q_i - q'_i - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \tau \right) \delta \left(p_i - p'_i + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \tau \right)$$

با جایگذاری این عبارت در معادله تحول توزیع احتمال، داریم:

$$\frac{\partial f}{\partial s} \tau = -f(q, p, s|f.(q., p.)) + f \left(q - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \tau, p + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \tau | f.(q., p.) \right)$$

با توجه به کوچک بودن بازه زمانی τ ، این معادله به شکل زیر درمی‌آید:

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} = \sum_{i=1}^{\tau N} -\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} + \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}}$$

این معادله، تحول تابع توزیع احتمال را بر روی فضای فاز مشخص می‌کند. همچنین می‌توان آن را با نوشتار کروشه پواسون نیز نشان داد:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \{ \mathcal{H}, f \}$$

۳ حالت‌های مانا

یک سوالی که ممکن است پیش بیاید این است که در لحظه نخست، یک سیستم را با چه توزیع احتمالی در فضای فاز قرار دهیم تا این توزیع احتمال در طول زمان تغییر نکند. به این منظور، تقاضا می‌کنیم که عبارت $\partial f / \partial t$ برابر صفر باشد:

$$\sum_{i=1}^N -\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} + \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = 0.$$

۴ سیستم تک‌ذره‌ای یک‌بعدی

به منظور پیشبرد بیشتر این موضوع، سیستم‌های ساده‌تری را در نظر می‌گیریم. در اینجا به سیستم‌های تک‌ذره‌ای یک‌بعدی می‌پردازیم.

برای راحتی بیشتر با معادلات، مکان را با x و تکانه را با y نشان می‌دهیم. در این فضای فاز دوبعدی، معادله تحول تابع توزیع به صورت زیر است:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial y} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x}$$

برای یک سیستم تک‌ذره‌ای داریم:

$$\mathcal{H}(x, p) = \frac{p^2}{2m} + U(x)$$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} = \frac{dU}{dx} = U'(x)$$

پس معادله تحول به صورت زیر درمی‌آید:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{y}{m} \frac{\partial f}{\partial x} + U'(x) \frac{\partial f}{\partial y}$$

برحسب میدان نیرو $F(x)$ داریم:

$$\boxed{-\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{y}{m} \frac{\partial f}{\partial x} + F(x) \frac{\partial f}{\partial y}}$$

و برای حالت مانا داریم:

$$\boxed{\frac{y}{m} \frac{\partial f}{\partial x} + F(x) \frac{\partial f}{\partial y} = 0.}$$

می‌توانیم برای پیدا کردن برخی از توزیع‌های مانا، از جداسازی متغیر استفاده کنیم:

$$f(x, y) = X(x)Y(y)$$

$$-\frac{1}{F(x)X(x)} \frac{dX}{dx} = \frac{m}{yY(y)} \frac{dY}{dy}$$

با توجه به این که سمت چپ فقط تابع x و سمت راست فقط تابع y است، هرکدام از این‌ها باید برابر یک ثابت باشند که آن را با $-c$ مشخص می‌کنیم.

$$\frac{m}{yY(y)} \frac{dY}{dy} = -c \Rightarrow Y(y) = a_y \exp \left[-c \frac{y^2}{2m} \right]$$

$$-\frac{1}{F(x)X(x)} \frac{dX}{dx} = c \Rightarrow X(x) = a_x \exp [-cU(x)]$$

$$f(x, y) = A \exp \left[-c \left(\frac{y^2}{2m} + U(x) \right) \right]$$

این نتیجه نشان می‌دهد که در حالت‌های مانای جداپذیر (قابل جداسازی به صورت $(X(x)Y(y))$ در هر نقطه به صورت نمایی با همیلتونی آن نقطه رابطه کم می‌شود:

$$f(x, y) = A e^{-c\mathcal{H}(x, y)}$$

صرفاً به عنوان یک پیشنهاد، می‌توانیم برای توزیع احتمال مانایی که جداپذیر است، دما تعریف کنیم:

$$T \equiv \frac{1}{k_B c}$$

پس توزیع احتمال‌های مانای جداپذیر را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$f(x, y) = A \exp \left[-\frac{\mathcal{H}}{k_B T} \right]$$

ضرب A را نیز از بهنجارش تابع f بدست می‌آوریم:

$$f(x, y) = \frac{1}{Z} \exp \left[-\frac{\mathcal{H}(x, y)}{k_B T} \right], \quad Z \equiv \iint \exp \left[-\frac{\mathcal{H}(x, y)}{k_B T} \right] dx dy$$

همان‌طور که مشاهده می‌شود، تابع توزیع‌های مانا که جداپذیر هستند، ارتباط تنگاتنگی با توزیع تعادلی بولترمان و تابع پارش دارند.

۱.۴ توزیع احتمال مکان و تکانه

تابع توزیع احتمال سه متغیره $f(x, y, t)$ که تا به اینجا معرفی کردیم، توزیع احتمال بر روی فضای فاز است. می‌توانیم توزیع احتمال مکان و تکانه را جداگونه از روی همین توزیع احتمال محاسبه کنیم:

• توزیع احتمال مکان:

$$f_x(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y, t) dy$$

• توزیع احتمال تکانه:

$$f_y(y, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y, t) dx$$

این توزیع احتمال‌ها، نشان‌دهنده‌ی احتمال یافتن ذره با تکانه یا مکان موردنظر است.

۲.۴ ذره آزاد

برای بررسی ذره آزاد، $F(x)$ را صفر قرار می‌دهیم.

$$-\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{y}{m} \frac{\partial f}{\partial x}$$

همان‌طور که انتظار داریم، درمورد ذره آزاد، توزیع احتمال تکانه در طول زمان تغییر نخواهد کرد:

$$\frac{\partial f_y}{\partial t} = -\frac{y}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f}{\partial x} dx = 0$$

اما تغییرات توزیع احتمال مکان به این شکل است:

$$\frac{\partial f_x}{\partial t} = -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} y f(x, y, t) dy$$

۳.۴ نوسانگر هماهنگ

برای یک نوسانگر هماهنگ با تنظیم دستگاه واحدها به گونه‌ای که $k = ۱$ و $m = ۱$ باشد، معادله تحول به شکل زیر درمی‌آید:

$$-\frac{\partial f}{\partial t} = y \frac{\partial f}{\partial x} - x \frac{\partial f}{\partial y}$$

برای حالت مانا داریم:

$$y \frac{\partial f}{\partial x} = x \frac{\partial f}{\partial y}$$

با تقسیم دوطرف بر xy و استفاده از جداسازی متغیر داریم:

$$f(x, y) = X(x)Y(y)$$

$$\frac{1}{Xx} \frac{dX}{dx} - \frac{1}{Yy} \frac{dY}{dy} = 0$$

$$\frac{1}{Xx} \frac{dX}{dx} = c, \quad \frac{1}{Yy} \frac{dY}{dy} = c$$

$$X(x) = a_x e^{cx}, \quad Y(y) = a_y e^{cy}$$

$$f(x, y) = A e^{-c(x^2 + y^2)}$$

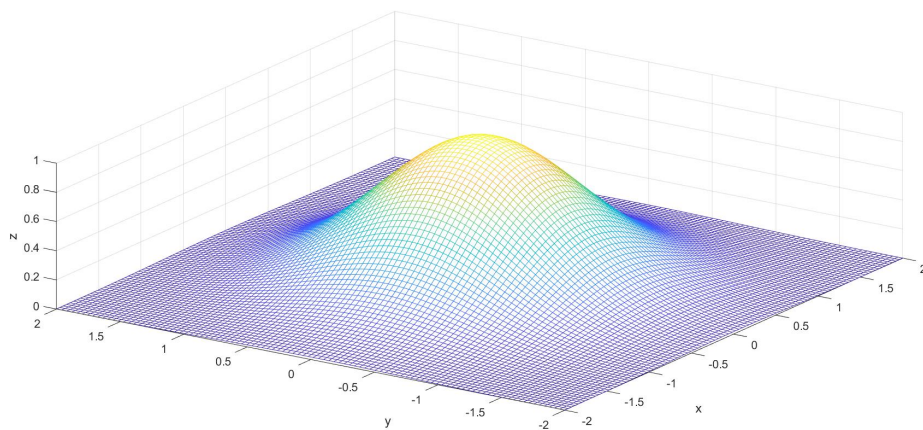
که در آن c آزاد است و A از بهنجارش تابع تعیین می‌شود (البته برای بهنجارپذیری تابع، c باید مثبت باشد):

$$\iint_{-\infty}^{\infty} f(x, y) dx dy = 1$$

$$\frac{A}{c} \pi = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\pi c}$$

$$f(x, y) = \frac{1}{c\pi} e^{-c(x^2 + y^2)}$$

فرم نمودار این تابع در شکل ۱ آمده است.



شکل ۱: توزیع مانای نوسانگر هماهنگ

این پاسخ، حالت ماناییست که قابل جداسازیست؛ اما می‌بینیم که معادله کلی به فرم زیر هم در معادله حالت مانای نوسانگر هماهنگ صدق می‌کند:

$$f(x, y) = g(x^2 + y^2)$$

که پاسخ جداسازی شده بدست آمده نیز از همین نوع است. پس اگر در لحظه نخست، تابع توزیع یک تقارن استوانه‌ای در صفحه xy داشته باشد، این توزیع تغییر نخواهد کرد. البته این موضوع، در واقع از صورت این مسئله نیز انتظار می‌رفت؛ زیرا حرکت یک نوسانگر هماهنگ در همیلتونی گفته شده، بر روی یک دایره در صفحه فاز است. پس اگر یک توزیع که تقارن استوانه‌ای دارد داشته باشیم، هر جزء از آن روی یک دایره حرکت می‌کند و این تقارن باعث می‌شود حرکت آن‌ها توزیع را تغییر ندهد. پس در واقع این امر، یکی از موفقیت‌های تئوری و معادله تحول بدست آمده است.

۴.۴ حرکت کپلری

در حرکت کپلری، انرژی پتانسیل موثر به صورت زیر است:

$$U_{\text{eff}}(r) = \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{GmM}{r}$$

میدان نیروی متناظر با این پتانسیل عبارت است از:

$$-F(r) = \frac{\partial U_{\text{eff}}}{\partial r} = \frac{L^2}{mr^3} - \frac{GmM}{r^2}$$

با قراردادن این میدان نیرو در معادله توزیع احتمال مانا، معادله زیر حاصل می‌شود:

$$\frac{y}{m} \frac{\partial f}{\partial x} = \left(\frac{L^2}{mx^3} - \frac{GmM}{x^2} \right) \frac{\partial f}{\partial y}$$

$$\frac{m}{y} \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{mx^3}{L^2 - Gm^2 Mx} \frac{\partial f}{\partial x}$$

مجدداً از جداسازی متغیر استفاده می‌کنیم:

$$f(x, y) = X(x)Y(y)$$

معادلات جداسازی شده به شکل زیر درمی‌آیند:

$$\frac{m}{Yy} \frac{dY}{dy} = c$$

$$\frac{mx^3}{L^2 - Gm^2 Mx} \frac{dX}{dx} = c$$

که پاسخ‌های آن به صورت زیر است:

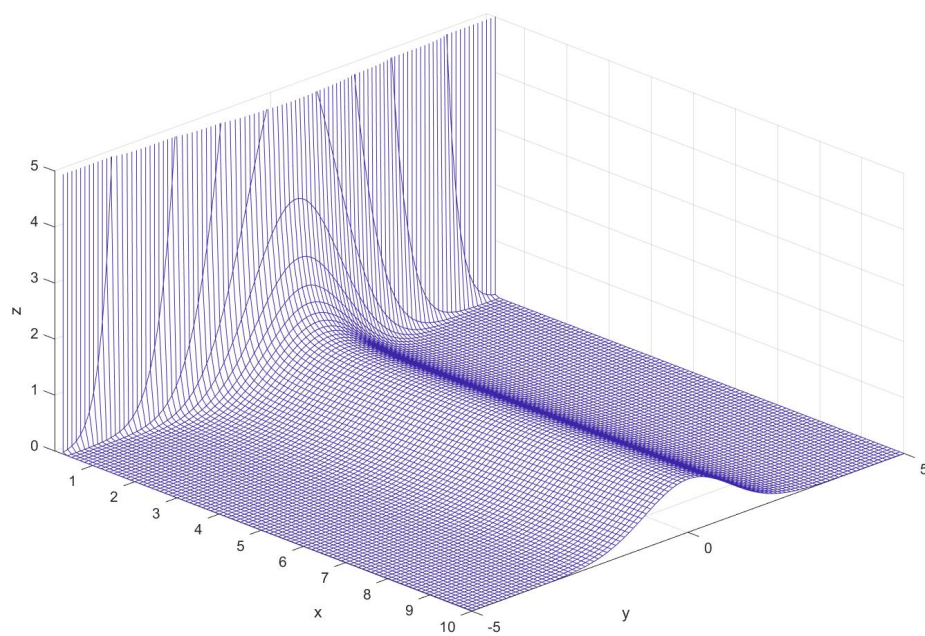
$$Y(y) = a_y e^{-cy^2/2m}$$

$$X = a_x \exp \left[c \left(\frac{GmM}{x} - \frac{L^2}{2mx^2} \right) \right]$$

و جواب نهایی بدست می‌آید:

$$f(x, y) = A \exp \left[-c \left(\frac{y^2}{2m} + \frac{L^2}{2mx^2} - \frac{GmM}{x} \right) \right]$$

فرم کلی نمودار این تابع در شکل ۲ آمده است.



شکل ۲: توزیع مانای حرکت کیپلری