教案讨论二

力学规律和统计规律的关系

——能否由力学规律推导出统计规律？

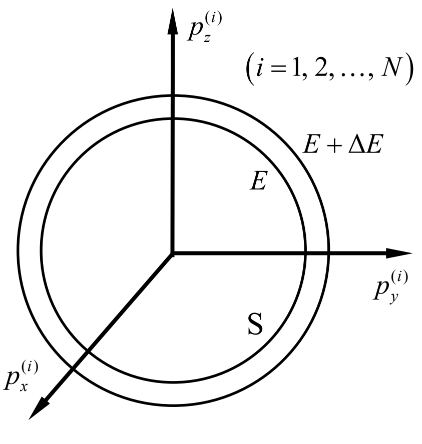
一． 两种观点

1．**系综论**：统计规律是另一层次的新规律，不能由力学规律导出．

2．**各态历经论**：可用力学规律为统计规律提供基础．试图阐明在什么条件下可由力学规律导出统计规律．

二． 系综论[1]

微观上，每个分子运动都遵从力学规律；但宏观体系包含极大数量的分子，无法也没有必要知道所有分子的运动细节．量变发生质变，大量粒子的体系出现了新的规律——统计规律，其基本假设是：在一定的宏观条件下（对于孤立体系，总能量 E^{*}、体积 V 和粒子数 N 确定），各种可能的微观状态都能以相等的几率出现（平衡态）．这是统计物理的出发点，不必追问缘由．



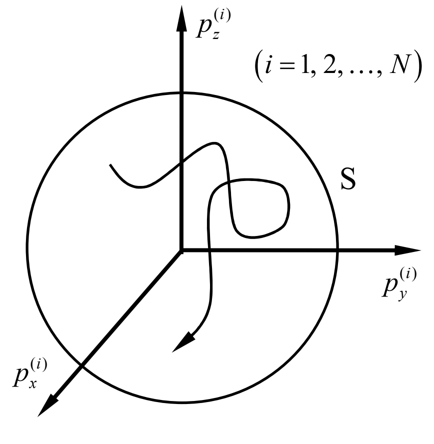
对于理想气体，只有碰撞交换能量，没有相互作用．此时，在描写微观状态的相空间中，可将动量和坐标分离开来．能量守恒要求微观状态必定出现在 $3N$ 维动量空间中的等能面 S 上，且 S 是球面．

对于平衡态，等能面 S 上各点出现的几率相等．由此，可用计算平均值的方法求得各种宏观物理量．

三． “各态历经（Ergodic）”论[2]

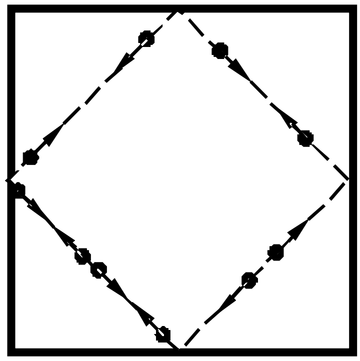
1．定义：

分子运动时，体系的微观状态从某一初始点出发，在 S 面上画出一条轨道．如果此轨道能无限接近 S 面上的任何一点（粗略一点讲，此轨道可到达 S 面上的任何一点，亦即各种微观状态都能到达），这就称为“各态历经”．



---

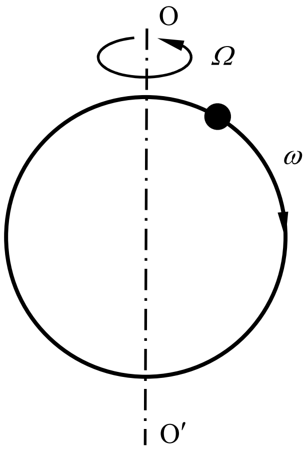
* 考虑到不可避免的外界扰动，体系能量限制在 E 与 $E+\Delta E$ 之间．



这里除去了一系列钻进“死胡同”的点．由于这些点的测度为零，对计算平均值无贡献．例如，所有分子都沿图中菱形边运动，相互碰撞也离不开菱形．

有不少学者举出类似于上述的“死胡同”作为反例，说明“各态历经”是不能实现的．这是不妥的，因为该理论已指出，“各态历经”并不包括这些特殊点，由于它们的测度为零，排除它们不会改变能量曲面上的平均值．

下面从几何上对“各态历经”打个比喻．



一个质点沿圆环等速率运动，角速度为ω．同时，该圆环绕轴线OO′匀速转动，角速度为Ω．两者合成质点在球面上的运动，画出一条轨道．如果ω与Ω之比是有理数，则此轨道在球面上闭合，不能各“态”历经．如果ω与Ω之比是无理数，则此轨道可无限接近球面上的任何一点，但不能保证可以到达每一点．

2．平均值定理[3]：

如果某体系是各态历经的，则系综平均值等于沿轨道的时间平均值：

$$\langle f\rangle_{\text{系综}}=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_{t_0}^{t_0+T}f\left(\xi\left(t\right)\right)\mathrm{d}t\,, \tag{2.1}$$

其中ξ表示体系在相空间中代表点的全部坐标．因此，只要“各态历经”成立，系综论的假设就有了力学基础．在此意义上，可由力学规律导出系综理论．有一学派就认为“各态历经”是统计物理的基本假定．

这样，统计物理的基本问题变为“各态历经”能否实现．

3．实现“各态历经”的条件：

N个粒子的系统有$3N$个自由度，Hamilton 方程是$6N$个联立的微分方程组．如果是完全可积的，则有$6N$个运动常数，其中的一个是总能量E（能量守恒）：

$$H\left(\boldsymbol{p}_i,\boldsymbol{q}_i\right)=E\,. \tag{2.2}$$

通俗一点讲，某体系可以各态历经的条件是：除能量积分外，不存在其他的运动积分．这是容易理解的．如果还存在另一积分

$$f\left(\boldsymbol{p}_i,\boldsymbol{q}_i\right)=C\text{，} \tag{2.3}$$

它在相空间$\left(\boldsymbol{p}_i,\boldsymbol{q}_i\right)$中是一个超曲面，此曲面将与能量曲面(2.2)相交，则体系的代表点只能在此相交的部分运动，而不能遍历能量曲面，也就不能各态历经．

数学上已证明，“各态历经”的充要条件是该动力学体系具有“度量可移性”（Metric Transitivity）[4]．该数学条件在物理上如何实现，还有待进一步研究．因而，物理上，“各态历经”仍有假定的成分，尚未完全解决．

但是，可以举出一些模型体系，它们是各态历经的[5]．刚球模型就是其中之一[6]．

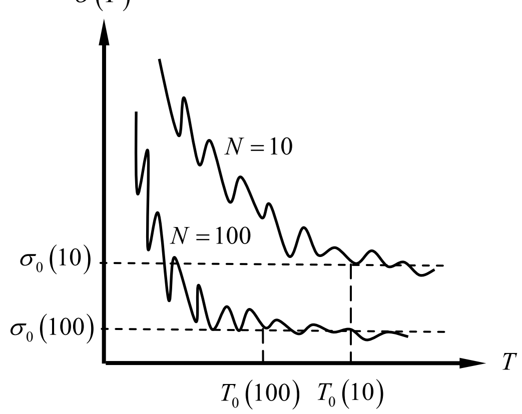
4．刚球碰撞模型：

在一体积V固定的容器中装有N个半径为r的刚球，刚球之间及刚球与器壁都是弹性碰撞．

这是一个简单的力学模型．虽然刚球碰撞时动量守恒，但刚球与器壁碰撞，球的动量要改变，而容器是外界，因而体系的总动量不是积分常数．此体系只有总能量是积分常数．文献[6]证明了该体系是各态历经的．

根据前面介绍的平均值定理，此体系的长时间平均等于系综平均，因而可从力学规律导出 Maxwell 分布．

计算机的模拟结果显示，当$N=10$时，粒子很少，可以由力学确定任何时刻各粒子的位置$\boldsymbol{r}_i\left(t\right)$，是决定论因果性的．每个瞬时，按速率的分布$n\left(v,t\right)$是断断续续的，时刻在变，没有意义．但是，积累一段时间T后，将瞬时分布$n\left(v,t\right)$按时间T作平均，就逐渐显示出 Maxwell 分布．时间T不长时，分布的起伏$\sigma\left(T\right)$很大．T增加时，起伏$\sigma\left(T\right)$逐渐减小，经过T_0后，趋向一稳定的起伏σ_0，见如下示意图．



当$N=100$时，瞬时的分布偏离 Maxwell 分布仍较远，起伏很大．经时间平均后，逐渐接近 Maxwell 分布．与$N=10$相比，达到稳定起伏的时间T_0缩短了，而且稳定的起伏σ_0也变小了．数值结果表示，$\sigma_0\left(100\right)$约为$\sigma_0\left(10\right)$的$1/3$．这符合统计规律$\sigma_0\left(N\right)\sim 1\big/\sqrt{N}$．

显示统计规律并不要求体系中的粒子数N非常大（$N \sim 10^{10}$）. 当粒子数N不大时，由于活动的体积V也不大，密度$\rho = N/V$是确定的有限值，加上一定的边界条件，仍相当于热力学极限（ρ固定，$N \to \infty$，$V \to \infty$）. 于是，粒子数不多的体系也能显示出统计规律，例如几百个粒子的刚性碰撞. 又如，实验上，2000个原子也能出现 Bose-Einstein 凝结.

四．结论

1．对于一般的体系，目前还不能证明“各态历经”在物理上是可以实现的. 因而，还不能由力学规律导出统计规律. 但也不能证明“各态历经”不能实现. 这方面的研究仍在不断深入.
2．刚球模型体系是各态历经的. 在计算机模拟中，由力学定律得到 Maxwell 分布并不奇怪.
3．严格地讲，对于各态历经的体系，经过无限长时间的平均值才等于系综平均值. 实际上，经过一段不太长的时间（碰撞次数足够多）后，时间平均就非常接近系综平均了. 这是因为，相空间中代表点的轨道延伸具有扩展性，它首先伸向相空间的不同部分，很快在整个相空间形成“疏而不漏”的网，虽不致密，但足够代表所有的微观态了.
4．对宏观体系，不可避免地会有各种偶然的干扰和外界的影响. 这些随机因素难以用力学规律描述，决定论存在困难. 概率论的系综理论更自然.

[1] R. C. Tolman, *The Principles of Statistical Mechanics*, Oxford University Press, (1962).
[2] G. Morandi, *Statistical Mechanics*, World Scientific, (2001).
[3] G. D. Birkhoff, *Dynamical Systems*, Am. Math. Soc. Coll. Pub., Vol. **IX**, (1928).
[4] D. Ter Haar, *Foundation of Statistical Mechanics*, Rev. Mod. Phys. **27**, 289 (1955).
[5] V. I. Arnold, *Ergodic Problem of Classical Mechanics*, Benjamin, (1968).
[6] Y. Sinai, *Ergodic Hypothesis of a Dynamical System of Statistical Mechanics*, Sov. Math. Dokl. **4**, 1818 (1963).