



جابجایی بهینه و بهینه‌سازی ارگودیک در شناسایی آشوب سیستم‌های ترمودینامیکی

فرهاد خلت^۱ و ابوالفضل شعبانی^{۱*}

^۱ دانشکده علوم ریاضی، دانشگاه شهید بهشتی f-khellaat@sbu.ac.ir, shabani.a@gmail.com

چکیده. در این مقاله به بررسی برخی کاربردهای بهینه‌سازی ارگودیک و جابجایی بهینه مونژ-کنترولیچ در شناسایی فرمالیزم ترمودینامیک سیستم‌های آشوبناک به ویژه حالت‌های تعادلی در دمای صفر حدی می‌پردازیم.

۱. پیش‌گفتار

فرض کنید $X = \{1, \dots, d\}^{\mathbb{N}}$ لیس یک-بعدی مجموعه برنولی با d مقدار ممکن (که $2 \leq d \in \mathbb{N}$) برای اسپین^۱ هر ذره در جایگاه $i \in \mathbb{N}$ بوده و ν اندازه احتمال برنولی باشد که تحت نگاشت شیفت $\sigma: X \rightarrow X$ ، $\sigma(x_n) = (x_{n+1})$ ناورد است. میزان کنش و واکنش‌های بین جایگاه‌ها را تابع پتانسیل $A: X \rightarrow \mathbb{R}$ اندازه‌گیری می‌کند. در زمان تعادل سیستم، در سطح ماکروسکوپی لیس رفتاری پایدار دارد ولی در سطح میکروسکوپی وضعیت ماده بر اساس کنش و واکنش‌های بین ذره‌ها در تغییر است. از این رو هر حالتی از سیستم را یک اندازه احتمال روی X در نظر می‌گیرند که بیانگر وضعیت‌های ممکن در سطح میکروسکوپی و به دست آمده از قانون اعداد بزرگ در نظریه احتمال است. قانون گیبز به سیستم در حال تعادل اندازه احتمالی نظیر می‌کند که حالت‌های با کمترین انرژی بیشترین شانس پدیدار شدن را دارا هستند. فرض کنید $\mathcal{S} = \{S_1, \dots, S_N\}$ مجموعه همه حالت‌های ممکن سیستم و $U(S_i)$ انرژی سیستم در حالت S_i ، k_B ثابت جهانی بولتسمان^۲، و T کمیت دما باشد. قرار دهید $\theta = \frac{1}{k_B T}$ و $Z(\theta) := \sum_{i=1}^N e^{-\theta U(S_i)}$. احتمال رخداد حالت S_i بر اساس قانون گیبز $Pr(S_i) := \frac{1}{Z(\theta)} e^{-\theta U(S_i)}$ بوده و این توزیع احتمال را اندازه گیبز گویند. بررسی و شناخت این اندازه‌ها و ویژگی‌های آنها را فرمالیزم^۳ ترمودینامیک می‌نامند.

2010 Mathematics Subject Classification. Primary 90B06; Secondary 37D35, 37C30, 49M29.

واژگان کلیدی. جابجایی بهینه، بهینه‌سازی ارگودیک، فرمالیزم ترمودینامیک، آشوب دمای صفر، اندازه زتا.

* سخنران

^۱ در فیزیک ذره‌های بنیادی و مکانیک کوانتوم اسپین حالتی ذاتی از گردش زاویه‌ای ذرات بنیادی است و هر ذره بنیادی اسپین ویژه‌ای دارد. ذاتی به این معنا که وابسته به حرکت ذره در فضا نیست. با کمی چشم‌پوشی می‌توان اسپین را گردش یک ذره به دور یک محور در نظر گرفت.

^۲ Boltzman's universal constant

^۳ فرمالیزم به معنای بیان و توصیف پدیده‌ها و ساختار بندی آنها به زبان ریاضی و منطق است.

یکی از مسائل بنیادین در فرمالیزم ترمودینامیک و مکانیک آماری توصیف ریاضی خانواده‌هایی از حالت‌های گیبز برای یک تابع پتانسیل داده شده است که کنش و واکنش‌های درون سیستم را مشخص می‌کند. این حالت‌های گیبز توسط پارامترهایی چون وارون دما، میدان مغناطیسی، پتانسیل شیمیایی و... مشخص می‌شوند و هدف عالی فرمالیزم بیان مجموعه حالت‌های گیبز به عنوان تابعی از این پارامترهاست. در این میان کمیت وارون دما برای رسیدن به حد دمای صفر به کار می‌رود و این حد به این دلیل پر اهمیت و جذاب است که حالت کمترین نیروی اساسی^۴ را نتیجه داده و در آن حالت سیستم با کمترین میزان انرژی رفتارهای مغناطیسی نشان می‌دهد.

۲. دست‌آوردهای پژوهش

۱.۲. **بهینه‌سازی ارگودیک.** فرض کنید سه‌تایی $(X, \mathcal{B}, \mu)$ شامل فضای متریک فشرده X ، سیگما جبر برل $\mathcal{B}$ ، اندازه احتمال μ و $T: X \rightarrow X$ نگاشتی پیوسته باشد. جفت (X, T) را یک سیستم دینامیکی نامند. نگاشت T را μ -ناوردا گویند هرگاه برای هر مجموعه برل $B \in \mathcal{B}$ داشته باشیم $\mu(B) = \mu(T^{-1}B)$. مجموعه همگی اندازه‌های ناوردا تحت نگاشت T روی X را با $M_T(X)$ نمایش می‌دهیم. مجموعه $M_T(X)$ با توپولوژی ضعیف-ستاره فشرده و ناتهی است. ساپورت اندازه μ روی X که با $\text{supp}(\mu)$ نمایش داده می‌شود، کوچکترین زیرمجموعه بسته $S \subset X$ است که $\mu(S) = \mu(X)$. μ را اندازه‌ای تناوبی گویند اگر ساپورت آن مداری تناوبی باشد. اندازه‌ی μ را ارگودیک گویند هرگاه برای هر مجموعه برل B با اندازه مثبت که $\mu(B) = \mu(T^{-1}B) > 0$ داشته باشیم $\mu(B) = \mu(X) = 1$. برای تابع پتانسیل پیوسته $f: X \rightarrow \mathbb{R}$ میانگین ارگودیک بیشین آن را $\sup_{\mu \in M_T} \int f d\mu$ تعریف می‌کنند. هر اندازه‌ای که این مقدار بیشین را به دست دهد یک اندازه بیشین برای f نامیده و مجموعه همه چنین اندازه‌هایی را با $M_{\max}(f)$ نمایش می‌دهند.

۲.۲. **جابجایی بهینه (مساله مونژ و کنتروویچ).** جابجایی یا انتقال بهینه در ریاضی با ارایه مساله جابجا نمودن توزیعی از یک جرم با هدف کمینه کردن میانگین هزینه جابجایی توسط مونژ در سال ۱۷۸۱ آغاز گشت و پس از صورت‌بندی جدیدی که کنتروویچ در دهه ۱۹۴۰ به کمک آنالیز تابعی ارایه داد پیشرفت‌های بسیاری این زمینه ایجاد شد. جابجایی بهینه به دنبال یافتن اندازه‌ی احتمالی است که انتگرال یک تابع هزینه c داده شده را کمینه نماید. فرض کنید (X, d_X, μ_X) و (Y, d_Y, μ_Y) دو فضای فضای متریک کامل جدایی‌پذیر با اندازه‌های برل μ_X و μ_Y بوده و $P(X \times Y)$ مجموعه اندازه‌های احتمال برل روی $X \times Y$ باشد. مجموعه روش‌های جابجایی از μ_X به μ_Y چنین تعریف می‌شود:

$$\Gamma(\mu_X, \mu_Y) := \left\{ \gamma \in P(X \times Y) : (\pi_X)_\# \gamma = \mu_X, (\pi_Y)_\# \gamma = \mu_Y \right\} \quad (۱.۲)$$

که در آن π_X و π_Y به ترتیب افکنش روی X و Y هستند. کنتروویچ همچنین تابع هزینه جابجایی را برای اندازه γ چنین تعریف کرد:

$$\text{cost}(\gamma) = \int_{X \times Y} c(x, y) d\gamma(x, y) \quad (۲.۲)$$

هدف مساله کنتروویچ (KP) یافتن روش جابجایی (اندازه γ) با کمترین هزینه $\text{cost}(\gamma)$ است که آنرا روش بهینه نامند و مجموعه این اندازه‌های بهینه را با $\text{Opt}(\mu_X, \mu_Y)$ نمایش می‌دهند. اگر X و Y فشرده و c تابع هزینه پیوسته‌ای باشد، آنگاه مساله کنتروویچ دارای جواب است. یعنی اندازه $\gamma \in \Gamma(\mu_X, \mu_Y)$ چنان وجود دارد که $\text{cost}(\gamma) = \inf_{\nu \in \Gamma(\mu_X, \mu_Y)} \{\text{cost}(\nu)\}$. ولی در حالت کلی جواب مساله کنتروویچ نایکتابست.

^۴Ground state

اندازه‌های جابجایی بهینه را می‌توان از ترکیب محدب اندازه‌های بهینه تناوبی با شرطهای متناهی روی نقطه‌های مدارهای آنها به دست آورد.

گزاره ۱.۲. اگر μ_X و μ_Y اندازه‌های تناوبی و $c : X \times Y \rightarrow [0, \infty)$ تابع هزینه‌ای با مقدارهای محاسبه‌پذیر حقیقی $c_{ij} := c(x_i, y_j)$ روی مدار این اندازه‌ها باشد، آنگاه اندازه جابجایی بهینه محاسبه‌پذیر است.

طرح برهان. ساپورت هر روش جابجایی γ زیرمجموعه‌ی حاصلضرب ساپورت μ_X و μ_Y یعنی $\{x_1, \dots, x_n\} \times \{y_1, \dots, y_m\}$ است و γ_{ij} ‌ها که مقدار γ در نقطه‌های (x_i, y_j) می‌باشند، جواب‌های یک دستگاه معادلات خطی بوده و با شرط $\gamma_{ij} \geq 0$ مجموعه این جواب‌ها یک چندوجهی محدب است [۵]. اگر $c : X \times Y \rightarrow [0, \infty)$ تابع هزینه‌ای با مقدارهای $c_{ij} := c(x_i, y_j)$ روی مدار این اندازه‌ها باشد، آنگاه اندازه‌های بهینه γ در بین راس‌های آن چندوجهی بوده و تابع خطی $\sum_{i,j} c_{ij} \gamma_{ij}$ را کمینه می‌نمایند. $\square$

۳.۲. بهینه‌سازی و جابجایی ارگودیک در فرمالیزم ترمودینامیک.

تعریف ۲.۲. فرض کنید U تابع انرژی کل درون سیستم (X, T) و h_μ آنتروپی کلموگروف اندازه μ باشد. کمیت $\int U d\mu - \frac{\log 2}{\theta} h_\mu$ را انرژی آزاد μ نامیده و تابع پتانسیل را به صورت $A := -\frac{\theta}{\log 2} U$ تعریف می‌کنند. بر این اساس انرژی آزاد بر حسب پتانسیل A به صورت $(h_\mu + \int A d\mu) - \frac{\log 2}{\theta}$ بازنویسی شده و μ را یک اندازه تعادل برای پتانسیل A گویند هرگاه مقدار $(h_\mu + \int A d\mu)$ را بیشینه نماید.^۵ این مقدار بیشین را با $\mathcal{P}(A) := \sup_{\mu \in M_\sigma(X)} \{h_\mu + \int A d\mu\}$ نمایش داده و آن را فشار پتانسیل A نامند.

هدف ما شناسایی سیستم در حالت تعادل ماکروسکوپی برای پتانسیل داده شده A بوده و به دنبال یافتن اندازه‌های ناوردایی هستیم که مقدار $\mathcal{P}(A)$ را به دست دهند و به بیان دیگر انرژی آزاد را کمینه کنند. در مکانیک آماری اثر دما بر سیستم را با وارون آن بررسی می‌کنند. برای این کار پارامتر حقیقی-مقداری چون θ را وارون دما در نظر گرفته و حالت تعادل پتانسیل θA را که با μ_θ نمایش داده می‌شود مطالعه می‌نمایند. چنانچه فشار را برای θA بازنویسی کنیم و حد $\theta \rightarrow \infty$ آن را حساب کنیم، خواهیم دید که آنتروپی اهمیت نسبی خود را از دست خواهد داد و اندازه تعادل تابع پتانسیل θA تقریباً برابر با اندازه بیشین A خواهد بود.

قضیه ۳.۲. [۳] فرض کنید (X, T) سیستم دینامیکی با تابع پتانسیل پیوسته $\mathbb{R} : X \rightarrow$ و A و تابع آنتروپی نیم‌پیوسته بالای h روی M_T باشد. برای $\theta \in \mathbb{R}$ ، اگر μ_θ یک اندازه تعادل برای θA باشد، آنگاه (μ_θ) در زمان $\theta \rightarrow \infty$ دارای دست کم یک نقطه انباشتگی $\mu_\infty \in M_T \cap M_{\max}(A)$ بوده و

$$h_{\mu_\infty} = \max \{h_\nu : \nu \in M_{\max}(A)\} = \lim_{\theta \rightarrow \infty} h_{\mu_\theta}.$$

همگرایی حد $\lim_{\theta \rightarrow \infty} \mu_\theta$ برای سیستم دینامیکی نگاشت شیف از نوع باپایان با پتانسیل‌های موضعی ثابت در [۱] نشان داده شده است. بررسی همگرایی برای حالت‌های کلی‌تر چندین سال یک مساله باز بود تا اینکه در سال‌های اخیر دینامیک‌هایی معرفی شدند که این حد برای آنها همگرا نیست و این ناهمگرایی را آشوب وابسته به دما می‌نامند [۲]. اندازه‌های μ_∞ را حالت کمترین نیروی اساسی A گویند و در آن ذره‌های بنیادی دارای کمترین میزان انرژی ممکن خود هستند. از نمونه‌های معروف این حالت می‌توان مغناطیس خودانگیز^۶ را نام برد. مغناطیس خودانگیز پدیدار شدن ویژگی مغناطیسی در ماده‌ای است که در دماهای مثبت بالا هیچ ویژگی ربایشی و رانشی ندارد^۷ ولی در دماهای نزدیک به صفر^۸ بدون اینکه میدانی از بیرون به آن القا شود،

^۵فاکتور $\log 2$ به این دلیل ظاهر شده است که در تعریف آنتروپی لگاریتم در مبنای ۲ بوده است.

^۶Spontaneous magnetization

^۷در آزمایش‌های فیزیکی نشان داده شده است برخی مواد غیرفلزی حتی گاز کامل در دمای نزدیک صفر رفتار ربایشی دارند.

دارای ویژگی مغناطیسی می‌شود. یکی از پرسش‌های اساسی در فرمالیزم ترمودینامیک شناخت این پدیده است که چرا ماده‌ها در دماهای پایین میل به زیاد مرتب بودن دارند. برای درک این پدیده فرض کنید لیتیس یک بعدی از اسپین‌ها داریم. در دماهای بالا چینش این اسپین‌ها در لیتیس بسیار تصادفی بوده و برآیند میانگین میدان مغناطیسی اتم‌ها صفر است. ولی چنانچه دما را کاهش دهیم اسپین‌ها با هم همسو شده و یک وضعیت کریستالی یا شبه‌کریستالی به وجود می‌آورند که در آن ساپورت حالت کمترین نیروی اساسی یک مدار تناوبی است.^۹ این مدارهای تناوبی را در فرمالیزم ترمودینامیک با اندازه‌های زتا کد و شناسایی می‌کنند.

تعریف ۴.۲. فرض کنید X فضایی متریک و فشرده و $Y = \{1, \dots, d\}^{\mathbb{N}}$ بوده و اندازه $\mu \in P(X)$ و تابع پیوسته $c : X \times Y \rightarrow \mathbb{R}$ داده شده باشد. اگر $\mathfrak{Per}_n$ مجموعه‌ی اندازه‌های تناوبی ناوردا تحت نگاشت شیف روی Y با ساپورت مدار به طول n بوده و $\gamma(\mu, \nu)$ اندازه بیشین برای c باشد، آنگاه اندازه‌ی احتمال زتا $d\zeta_{\theta,n}$ روی $X \times Y$ با تابع خطی $\zeta_{\theta,n}$ به صورت $\zeta_{\theta,n}(w) := \int_{X \times Y} w d\zeta_{\theta,n}$ تعریف می‌شود که در آن

$$\zeta_{\theta,n} : C(X \times Y) \rightarrow \mathbb{R}, \quad \zeta_{\theta,n}(w) = \frac{\sum_{\nu \in \mathfrak{Per}_n} (e^{\theta n \int c(x,y) d\gamma(\mu,\nu)} \int w d\gamma(\mu,\nu))}{\sum_{\nu \in \mathfrak{Per}_n} (e^{\theta n \int c(x,y) d\gamma(\mu,\nu)})}.$$

در حالتی که $\mu = \delta_{x_0}$ ،^{۱۰} با تعریف تابع پتانسیل $A(y) = c(x_0, y)$ و $\text{Per}_n := \{y \in Y : \sigma^n(y) = y\}$ و $\bar{w}(y) := w(x_0, y)$ ، $A^n(y) := A(y) + \dots + A(\sigma^{n-1}(y))$ به صورت

$$\zeta_{\theta,n}(w) = \frac{\sum_{y \in \text{Per}_n} e^{\theta A^n(y)} \frac{\bar{w}^n(y)}{n}}{\sum_{y \in \text{Per}_n} e^{\theta A^n(y)}}$$

بوده و اگر μ تناوبی باشد از ترکیب‌های خطی مانند گزاره ۱.۲ به دست خواهد آمد. اندازه وابسته به تابع زتا برای برآورد حالت‌های گیبز به کار رفته و نسبت به دیگر اندازه‌های ناوردا انتگرال A را بیشینه می‌کند. همچنین برای تابع پتانسیل محاسبه‌پذیر و θ محاسبه‌پذیر، اندازه‌ای محاسبه‌پذیر است.

قضیه ۵.۲. [۴] با فرض‌های تعریف ۴.۲، اگر θ و n به بی‌نهایت میل کنند، آنگاه با توپولوژی ضعیف هر اندازه‌ی حدی γ_{∞} از زیردنباله‌های همگرای $d\zeta_{\theta,n}$ در مجموعه $\Gamma(\mu, \nu)$ جای دارد. همچنین اگر $c > 0$ ، آنگاه

$$\int_{X \times Y} c \gamma_{\infty} = \max_{\gamma \in \Gamma(\mu, \nu)} \int_{X \times Y} c \gamma, \quad \gamma_{\infty} \in \text{Opt}(\mu, \nu)$$

مراجع

1. J. Bremont *Gibbs measures at temperature zero*, Nonlinearity, 16 , 419 – 426, (2003).
2. D. Coronel , J. R. Letelier. *Sensitive Dependence of Gibbs Measures at Low Temperatures*, J. Stat. Phys. (2015)
3. O. Jenkinson , *Ergodic Optimization in Dynamical Systems*, Ergod. Th. Dynam. Sys. (2018).
4. A. O. Lopes, E. Oliveira and Ph. Thieullen *The Dual Potential, the involution kernel and Transport in Ergodic Optimization* , Dynamics, Games and Science pp 357-398 (2013).
5. C. Villani *Topics in Optimal Transportation*, AMS, Providence, (2003).

^۸ به طور دقیق دماهای پایین‌تر از نقطه‌ای بحرانی به نام دمای کوری که برگرفته از نام فیزیکدان فرانسوی پیئر کوری است.

^۹ در واقع یک اندازه‌ی ناوردا که ساپورت آن اجتماعی از مدار تناوبی است نقش یک حالت مغناطیسی را بازی می‌کند.

^{۱۰} اندازه دیراک