بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه الزهرا
دانشکده علوم‌پایه

پایان‌نامه

جهت اخذ درجه کارشناسی‌ارشد

رشته فیزیک گرایش نظری

عنوان

روشهای تحلیلی وعددی فرایندهای واکنش- پخش

استاد راهنما
دکتر فریناز روشنی

دانشجو
سمیه جوانمرد

اسفند ۱۳۹۰

کلیه دستاوردهای این تحقیق متعلق به

دانشگاه الزهرا(س) است.

تقدیم به :

پدر و مادر عزیزم

آنان که توانشان رفت تا به توانایی برسم و موهایشان سپید گشت تا رویم سپید بماند.

آنان که فروغ نگاهشان، گرمی کلامشان و روشنی رویشان سرمایه های جاودانی زندگی من است.

آنان که راستی قامتم در شکستگی قامتشان تجلی یافت.

در برابر وجود گرامیشان زانوی ادب بر زمین می زنم و با دلی مملو از عشق، محبت و خضوع بر دستشان بوسه می زنم.

و تقدیم به:

همسر مهربانم که اشتیاق طی این مسیر را به من داد

و با همکاری های مداوم یار و یاورم بود.

قدردانی و تشکر

سپاس خدای سبحان را که فرصتی دیگر برای اندوختن دانشی هر چند اندک عطایم فرمود.

بدین وسیله از استاد راهنمای عزیزم سرکار خانم دکتر فریناز روشنی که در انجام این مجموعه راهنمای خوبی برای من بوده اند کمال قدر دانی و تشکر را دارم. همچنین از سایر اساتید و دوستان عزیزم در دانشگاه الزهرا که هر یک به نحوی مرا در انجام این پایان نامه یاری نموده اند تشکر می کنم و صحت و سلامتی این بزرگواران را از خداوند متعال خواهانم.

چکیده

در این پایان نامه، روشهای تحلیلی و عددی واکنش- پخش مورد بررسی قرار گرفته است. این گونه مدل‌ها بر روی یک شبکه یک بعدی تعریف می‌شوند که در رأس هر شبکه فقط می‌تواند یک ذره قرار گیرد. بررسی این مدل‌ها به روش‌های مختلفی صورت گرفته که در هر کدام حل‌پذیر معنی خاص خود را دارد. در این پایان‌نامه ابتدا به بررسی روش‌های نهاده بته، بازه تهی و عددی فرایندهای واکنش-پخش پرداخته شده.

سرانجام فرایند حرکت-هل را در نظر می‌گیریم که در آن ذرات با نرخ پخش ذاتی خود می‌توانند به سمت راست خود پخش شوند اگر آن رأس از شبکه خالی باشند. اگر آن رأس اشغال شده باشد ذره سمت چپ با هل دادن همسایگی خود جای آن را اشغال می‌کند اما در زمان میانگین این احتمال وجود دارد که حین هل دادن نوع ذرات عوض شود. شرطی بدست می‌آوریم و نشان می‌دهیم که معادله‌ی مادر این فرایند به روش نهاده بته می‌تواند کاملاً حل‌پذیر باشد.

فهرست مطالب

مقدمه

مطالعه سیستم های آماری با اندرکنش N ذره ای وقتی که خارج از حالت تعادل خود می باشند بسیار مشکل‌تر از زمانی است که در حالت تعادل هستند. به همین دلیل فیزیکدان ها بدنبال حل دقیق این سیستم ها با ساده‌سازی آنها رفته اند. یکی از این ساده سازی ها این است که مسأله در ابعاد پایین مورد بررسی قرار گیرد تا شاید بتوان مسأله را به طور دقیق حل کرد.

باید توجه داشت که مطالعه حل پذیری در زمینه های مختلف منجر به پیدا شدن تعابیر گوناگونی از حل‌پذیری شده است. به عنوان مثال در برخی از فرایندهای واکنش-پخش، حل پذیری تعیین دقیق تابع احتمال شرطی N ذره ای روی یک شبکه نامحدود یک بعدی می باشد. بدین معنی که این تابع احتمال یافتن سیستم در یک آرایش مشخص در زمان t را به شرط آن که در زمان $t = 0$ آرایش سیستم معلوم باشد به ما می دهد.

فرمول بندی این مدل به کمک یک معادله مادر و یک شرط مرزی اولین بار توسط شوتس [۱] [۱] انجام شدکه در آن برای نوشتن معادله مادر از نمایش مختصاتی فضای حالت استفاده شده و حل آن به کمک نهاده بته [۲] بطور مستقیم صورت گرفت. معادله مادر به تنهایی معادله تحول سیستم برای حالتی است که فاصله ذرات بیش از یک رأس باشد. در مواقعی که ذرات در رأس های مجاور قرار می گیرند، شرط مرزی مقدار تابع احتمال را در ناحیه غیره فیزیکی می دهد.

یکی از ساده ترین مدل های واکنش-پخش ، فرایند طرد ساده ی نامتقارن [۳] $(ASEP)$ است. این مدل در ۱۹۶۸ برای بررسی دینامیک زیست پلیمرها معرفی شد. در ۱۹۷۰ وارد منابع ریاضی شد و از آن پس برای بررسی واکنش بین ذره ها بسیار مورد توجه بوده است. اخیراً فیزیکدانان این مدل را به عنوان مدلی برای تحول پلیمرها در محیط های کاتوره ای، و نیز یک مدل دینامیکی برای رشد مرزها به کار برده اند.

فرایند طرد ساده ی متقارن، به طور ساده این است که تعدادی ذره روی یک شبکه ی یک بعدی اند. حرکت این ذرات به چپ و راست تصادفی است و ممکن است آهنگ آن به چپ و راست متفاوت باشد(نامتقارن). ذرات فقط وقتی می توانند به نقطه ی مجاور بروند که آن نقطه خالی باشد (طرد) و ذرات یکدیگر را هل نمی‌دهند(ساده).

تعمیم شرط مرزی، با حفظ معادله مادر استفاده شده در فرایند طرد ساده ی نامتقارن، امکان فرمولبندی

---

[۱] Shutz

[۲] Bethe-ansatz

[۳] Asymmetric Simple Exlusion Process

واکنش های پیچیده‌تری را فراهم می کند. در مدل مرسوم به فرایند طردی تعمیم یافته کاملاً نامتقارن که در [۲] به روش فوق حل شد، ذرات می توانند به رأس های مجاور راست خود بروند حتی اگر رأس مجاور خالی نباشد. در واقع، ذره با هل دادن تمام ذرات موجود در همسایگی سمت راست خود، با نرخی متناسب با تعداد آنها به رأس مجاور برود. در [۳] با حفظ شرایط مرزی [۲] و با تغییر معادله مادر، حل پذیری یک خانواده مدل دو پارامتری نشان داده شده است که در آن نرخ فرایند انتشار و هل دادن ذرات از سمت راست و چپ با تغییر این دو پارامتر کنترل می‌شود. در تمام این مقالات، ذرات از یک نوع هستند. در [۴،۵] دسته ای از مدل های حل پذیر پیدا شده است که ذرات متنوع می باشند. ذرات امکان انتشار به رأس مجاور و واکنش با ذره مجاور را دارند. در [۶] معادله مادر جدیدی را برای فرایندهای پخش با نرخ وابسته به نوع ذره معرفی کرده و شروط مرزی جدیدی را برای مدل های واکنش-پخش و حرکت-هل روی شبکه یک بعدی استفاده می کند.مهمترین نکته در فرایندهای حل‌پذیر واکنش-پخش که شامل بیش از یک نوع ذره هستند این است که ماتریس مربوط به واکنش دو ذره ای که توابع نقطه ای را مشخص می کند، باید در معادله یانگ-بکستر صدق کند.

یکی دیگر از روش های بررسی سیستم های واکنش-پخش N ذره ای روی یک شبکه یک بعدی، روش بازه تهی [۴] می باشد. حل پذیری در این روش به بسته ماندن معادله تحول $E_n(t)$ (احتمال وجود n رأس خالی پشت سر هم در زمان t)، که از آن می توان مقدار دقیق $E_n(t)$ را بدست آورد. در [۷] به مطالعه تمام مدل های واکنش-پخش یک بعدی با واکنش با نزدیک ترین همسایه ، پرداخته شده و حل پذیری آن به روش بازه تهی مورد بررسی قرار گرفته شده است. در مقاله [۸] واکنش هایی که شکل اولیه آنها به صورت (∘∘) است در نظر گرفته شده. در[۹] روش بازه تهی متعارف (که در [۷،۸]توضیح داده شده) برای حل مدل‌هایی که از طریق این روش حل پذیر نیستند، تعمیم داده شده است. در[۱۰] همان مدل [۷] مورد بررسی قرار گرفته است، با این تفاوت که در [۱۰] ذرات k رأس همسایه خود می تواند واکنش داشته باشد. در تمامی این مدل ها ذرات واکنش کننده از یک گونه بودند. در [۱۱] با معرفی روش بازه تهی تعمیم یافته، به بررسی سیستم های واکنش-پخش چند گونه ذره ای پرداخته شده است که واکنش ها فقط بین نزدیک ترین رأس همسایه وجود دارد. در [۱۱] به جای $E_n(t)$ ، به بررسی مقدار چشمداشتی حاصل ضرب ترکیب خطی خاصی از عملگر های شمارش بر روی n رأس پشت سر هم در زمان t، $E_n^a(t)$ پرداخته شده است و شرایط لازم و کافی برای بسته ماندن معادله تحول $E_n^a(t)$ به دست آمده است. در [۱۲] به بررسی همان مدل [۱۱] پرداخته شده و واکنش با k رأس همسایه نیز در نظر گرفته شده است.

[۴] Empty-interval method

در میان روش های مختلفی که برای حل مدل های واکنش-پخش وجود دارد، شبیه سازی با روش مونت کارلو [۱۳،۱۴]به علت سهولت و دقت آن بسیار مورد توجه بوده است. روش مونت کارلو یک تکنیک عددی است که برای حل مسایل فیزیکی از اعداد تصادفی کمک می گیرد. این روش از اواسط قرن بیستم متداول شده است.

در فصل ۱ مثال هایی جهت آشنایی با کاربردهای فیزیکی این دستگاه ها و مفاهیم اولیه به کار برده شده را ارائه خواهیم داد.

در فصل ۲ به فرمولبندی فضای برداری فرایندهای تصادفی می پردازیم و تحول مارکفی و معادله مادر معرفی می‌شود و فرایندهای واکنش-پخش مورد بررسی قرار می گیرند.

در فصل ۳ حل فرایندهای تصادفی به روش نهاده بته مختصاتی و بازه تهی (EIM) و روش عددی و کارهایی که در این زمینه انجام شده، به اختصار آورده می شود.

در فصل ۴ به بررسی فرایندهای واکنش-پخش $p-$ گونه ذره‌ای با نرخ پخش وابسته به نوع ذرات پرداخته می شود.

در فصل ۵ مسئله فرایند حرکت-هل $p-$ گونه ذره با نرخ پخش وابسته به نوع ذرات را با در نظر گرفتن شرایط مرزی به روش نهاده بته حل خواهیم کرد.

فصل ۱

مقدمه ای بر فیزیک آماری

۱.۱ مکانیک آماری

مکانیک ذرات و ترمودینامیک ، ابتدا به شکل دو شاخه ی مجزای فیزیک پیش رفتند . طی قرن نوزدهم و اوایل قرن بیستم کوشش هایی برای استخراج ترمودینامیک از مکانیک انجام شد. نتیجه این کوشش ها ظهور شاخه‌ی دیگری در فیزیک به اسم مکانیک آماری بود . اساس مکانیک آماری این است که توصیف سیستم های با تعداد زیادی درجه ی آزادی بر حسب متغیرهای ذره ای مرسوم در مکانیک ذرات ، شدنی یا مفید نیست .

بهتر است چنین سیستم هایی را، به جای چیزهایی مثل تعداد زیادی مکان و تکانه ی بر حسب تعداد کمی میانگین یا متغیر جمعی توصیف کنیم ، کاری که در ترمودینامیک انجام می شود . اما مکانیک آماری راهی برای تعیین این خواص ماکرسکوپی بر اساس برهم کنش های میکروسکوپی ذرات پیشنهاد کرد . آن راه ، برای حالت تعادل، جای گزینی متوسط زمانی با متوسط مجموعه ای است .

متوسط زمانی چیزی است که در تجربه سنجیده می شود . متوسط مجموعه ای چیزی است که مکانیک آماری راه نسبتاً ساده ای برای محاسبه ی آن پیشنهاد می کند.این اولین ورود جدی احتمالات و متغیرهای تصادفی در فیزیک است .

نقطه دیگر ورود احتمال در فیزیک ، مکانیک کوانتومی است . نتیجه ی سنجش هر کمیتی در مکانیک کوانتومی تصادفی است . در زمینه ی مکانیک آماری حالت تعادل و مکانیک کوانتومی کارهای زیادی انجام شده است . یک شاخه ی نسبتاً جدیدتر فیزیک مکانیک آماری عدم تعادل است . مکانیک آماری تعادل نمی‌تواند چیزی درباره ی سیستم های دور از تعادل و نحوه ی گذار آن ها به حالت تعادل بگوید . اما بسیاری از سیستم‌های

طبیعی یا ساخت بشر سیستم های عدم تعادل اند و خواصشان با زمان عوض می شوند .

واکنش های شیمیایی ، تحول جمعیت های انسانی یا متشکل از موجودات زنده ی دیگر ، رشد سطوح و رشد بلور ، و ترافیک مثال هایی از این سیستم ها هستند . نکته ی جالب این است برای تحول سیستم مارکفی ، معادله ی توصیف کننده ی تحول سیستم خطی است و این سیستم از این نظر شباهت هایی با مکانیک کوانتومی دارند .

افزایش قدرت محاسباتی انسان ، با ورود کامپیوترهای قوی ، یکی از عوامل مهم پیشرفت مکانیک آماری عدم تعادل ، و به طور کلی شاخه ی سیستم های پیچیده بوده است . در واقع این افزایش قدرت محاسباتی به معنی آن است که امروز شبیه سازی سیستم هایی ممکن است که در گذشته ی نه چندان دور تصور شبیه سازی آنها هم نمی شد . اما این به معنی کم رنگ شدن اهمیت نتایج نظری دقیق نیست . رونق شاخه های سیستم‌های پیچیده ، وشباهت آن با سیستم هایی که قبلاً برای نظریه پردازان آشنا بوده ، باعث شده تعداد زیادی از نظریه‌پردازان به این شاخه ی میان رشته ای رو آورند و با استفاده از مثلاً روش های مکانیک کوانتومی و نظریه‌ی میدان‌های کوانتومی نتایج دقیق به دست آورند .

بعد سیستم های مورد بررسی بر روش های بررسی این سیستم ها به شدت اثر می گذارد. مثلاً یکی از روش‌های رایج بررسی سیستم های با بعد زیاد ، روش میدان میانگین است . روش میدان میانگین برای بعدهای زیاد جواب دقیق می دهد ، وبرای بعدهای از حدی کم تر جوابی می دهد که دقیق نیست اما تقریب قابل قبولی است و می شود این تقریب را بهتر کرد ، و برای بعدهای کم تر از حد دیگری جوابی می دهد که کاملاً نادرست است.یک مثال چنین چیزی وجود نقطه ی بحرانی برای سیستم آیزینگ[۱] است . نتیجه ی روش میدان میانگین این است که :

سیستم آیزینگ در هر بعدی نقطه بحرانی دارد ونمای بحرانی مثلاً مغناطش آن بر حسب دما هم مستقل از بعد است . این نتایج در بعدهای بزرگ تر از ۴ یا مساوی با آن درست است . سیستم آیزینگ در بعدهای بیش‌تر از ۲ یا مساوی با آن نقطه ی بحرانی دارد ، اما (برای بعدهای کم تر از ۴) این نقطه همان نیست که از روش میدان میانگین به دست می آید . در بعدهای کم تر از ۲ ، این سیستم اصولاً نقطه ی بحرانی ندارد. نتیجه ی این بحث آن است که در بعدهای کم ، به ویژه بعد یک ، روش های خاصی برای حل دقیق سیستم ها لازم است . این موضوع همراه با اینکه تعداد زیادی سیستم وجود دارد که عملاً یک بعدی اند ، انگیزه ی مهمی برای بررسی سیستم های یک بعدی است [۱۵].

[۱] Ising Model

۲.۱ کاربردهای فیزیکی

با مشاهده ی جهانی که ما را احاطه کرده است در می یابیم اشیاء ماکروسکوپیک ، پیرامون ما را در بر گرفته‌اند. منظور اشیایی است که در مقابل ابعاد اتمی بسیار بزرگ اند و شامل تعداد بسیار زیادی اتم یا مولکول می‌باشند. که اگر بخواهیم رفتار جمعی دستگاه های بس ذره‌ای [۲] را مورد مطالعه قرار دهیم.چنین دستگاهای بس ذره ای دارای پیچیدگی های بسیار زیادی می باشند که این پیچیدگی ها ممکن است به ویژگی های کیفی جالبی که برخی کاملاً غیره منتظره می باشند، منجر شوند.برای مطالعه این دستگاه ها به علت تعداد درجات آزادی بایستی از استدلال های آماری استفاده کرد که در حوزه ی مکانیک آماری قرار می گیرند. پس از گذشت زمان کافی دستگاه به حالت پایا می رسد که می تواند تعادلی یا دور از تعادل باشد .در مکانیک آماری تعادلی توزیع احتمال پیکربندی ها $P_{eq}(s)$ با عامل بولتزمان متناسب بوده وبرابر است با : [۱۵]

$$P_{eq}(s) = \frac{exp(\frac{-H(s)}{k_B T})}{Z_{eq}} \qquad (۱.۱)$$

که در آن $H(s)$ هامیلتونی ، s انرژی پیکربندی میکروسکوپیک ، k_B ثابت بولتزمان ، T دما و $Z_{eq} = \sum exp(\frac{-H(s)}{k_B T})$ تابع پارش است که تابع توزیع احتمال را بهنجار می کند و یکی از کمیت های اساسی فیزیک آماری بوده که می‌توان بسیاری از کمیت های ترمودینامیکی را از مشتقات آن بدست آورد . برای دستگاه های دور از تعادل چند مثال واقعی را بیان می کنیم :

در مثال اول یک رسانای گرمایی را در نظر می گیریم مانند یک میله ی فلزی که دو انتهای آن در دو حمام گرمایی با دماهای گوناگون قرار گرفته اند [۱۵] . به طور واضح یک جریان انرژی از انتهای گرم تر به انتهای سردتر خواهیم داشت که در حالت پایا جریان گرما مقداری ثابت می باشد . چنین دستگاهی یک حالت پایای دور از تعادل را نمایش می دهد که با استفاده از تابع توزیع احتمال بالا نمی توان آن را شرح داد.

در مثال دوم یک نمونه فرومغناطیس را در نظر می گیریم که در ابتدا در دمای بالاتر از دمای کوری می‌باشد.[۱۵] در این حالت سیستم در تعادلی است که مغناطش کامل ندارد.حال می خواهیم دمای دستگاه را به زیر دمای کوری برسانیم تا در این دما به طور خود به خود مغناطیده شود . اگر دما را به آرامی کاهش دهیم به طوری که در هر لحظه در تعادل باقی بماند آن را در چارچوب مکانیک آماری تعادلی می توان بررسی کرد .

---

[۲] Many Body System

اما چنانچه دستگاه را سریعاً سرد کنیم در طی این سرد کردن دستگاه در حالت تعادلی نیست . زمان لازم برای رسیدن دستگاه به حالت تعادل جدید با شروع از یک وضع بسیار دور از تعادل را زمان واهلش می نامند .

برای بررسی این فرایند واهلش به حالت تعادل ، می توان از مکانیک آماری دور از تعادل استفاده کرد و هدف یافتن دینامیک سیستم ، در این فرایند واهلش می باشد .

مثال دیگر از دستگاه های دور از تعادل ، گازهای شبکه ای واداشته با برهم کنش مغز سخت می باشند . این گازهای شبکه ای واداشته متعلق به یک گروه کلی تر مدل های دور از تعادل به نام دستگاه های پخشی واداشته می باشند . برای مطالعه این پدیده ها می توان آن ها را مدل سازی کرد . ساده ترین مدل شبیه سازی شده از دستگاه های پخشی واداشته شده یک بعدی که بسیار مورد استفاده قرار گرفته است، مدل طرد ساه نامتقارن می‌باشد . که در یک بعدی با مرزی باز است که شامل یک زنجیر به طولL می باشد و در آن ذرات تک گونه ای با یکدیگر واکنش می کنند. هر خانه از این شبکه می تواند پر یا خالی باشد. قوانین حرکت به این صورت است که ذرات در بدنه ی زنجیر در یک حرکت ترجیحی حرکت می کنند. یعنی حرکت این ذرات به چپ و راست تصادفی است و ممکن است آهنگ آن به چپ و راست متفاوت باشد (نامتقارن). ذرات فقط وقتی می توانند به نقاط مجاور بروند که آن نقطه خالی باشد (طرد) و ذرات یکدیگر را هل نمی دهند (ساده). برای توصیف حالت ایستای این سیستم با شرایط مرزی دوره ای و غیره دوره ای (همراه با ورود و خروج ذرات) کارهای زیادی انجام شده است. بر اساس این مدل می توان بسیاری از پدیده های دور از تعادل را مدل سازی کرد.

در طول دهه ی گذشته به دلیل تمامی این کاربردها در نواحی متفاوت فیزیک دور از تعادل و خواص جالبی که این مدل ها به همراه داشته اند مثل گذار فاز دور از تعادل، شکست خودبه خودی تقارن و ساختار شوک ها، مطالعه درباره ی چنین دستگاه هایی اهمیت بیشتری پیدا کرده است. بسیاری از دستگاه های بررسی شده در این زمینه ها از دسته دستگاه هایی هستند که آنها را دستگاه های ذرات واکنش دار[۳] می نامیم. دستگاه‌های ذرات واکنش دار، دستگاه هایی هستند که در آنها ذرات روی یک زنجیر به طولL حرکت می کنند.

برای این که بتوانیم چنین دستگاه هایی را مورد بررسی قرار دهیم لازم است دینامیک میکروسکوپی دستگاه را در نظر بگیریم. این دینامیک را می توان بر حسب یک سری معادلات حرکت که حل آنها مشکل است نوشت. بنابراین به جای این معادلات؛ یک توصیف احتمالی از دینامیک دستگاه را بررسی می کنیم یا به عبارت دیگر می توان احتمال اینکه دستگاه از یک پیکربندی میکروسکوپیک به پیکربندی دیگری برود را بررسی کرد.

بسته به دینامیک این مدل ها، آنها را می توان به دو دسته دیگری تقسیم کرد، مدل هایی که در آنها زمان

[۳] Interacting Particle Systems

پیوسته است و تحول زمانی یا روزآمد به طور پیوسته انجام می گیرد. و مدل های دیگر که در آنها زمان گسسته می باشد. این مدل ها می تواند به صورت شرایط مرزی باز، دوره ای و یا انعکاسی مورد بررسی قرار گیرند. رویکردهای گوناگونی برای مطالعه ی مدل های دور از تعادل یک بعدی مورد استفاده قرار گرفته است. از آن جمله می توان تقریب میدان میانگین (MF) [۴] ، نهاده ی جبری بته[5] ،روش بازه تهی(EIM) [۶]، و روش ضرب ماتریسی(MPF) [۷] را نام برد. افزون بر این روش های تحلیلی، می توان از شبیه سازی مونت کارلو نیز استفاده کرد.

۳.۱ گذار فازها

گذار فازها [۱۵]از پدیده های مهم در مکانیک آماری تعادلی می باشند، رویکردهای متفاوتی برای توصیف این پدیده-ها وجود دارد. از آنجایی که گذار فازها یکی از جالب ترین جنبه های مدل های دور از تعادل یک بعدی می- باشند، افراد زیادی نظریه هایی برای توصیف این پدیده در دستگاه های دور از تعادل داده اند.

از نظر فیزیکی می توان گذار فازها را به دو دسته تقسیم کرد. گذار فاز مرتبه ی اول، مانند ذوب شدن یخ که در آن یک گذر فاز بین جامد با چگالی بالا و مایع با چگالی پایین اتفاق می افتد وگذر فاز پیوسته (مرتبه‌های بالاتر) که در آن ها افت و خیزها و هم بستگی ها طوری هستند که از نظر ماکروسکوپیکی قابل مشاهده می‌باشند. وقتی آب می جوشد، تحت یک گذار فاز از یک فاز مایع به یک فاز گازی می رود. معادله ی حالت در هر یک از این فازها یک تابع منظم، پیوسته با مشتقات پیوسته است؛ اما در رفتن از یک فاز به فاز دیگر، معادله ی حالت شدیداً به یک تابع منظم دیگر تغییر می یابد. گذار مایع-گاز یک گذار فازی مرتبه ی اول است، از این نظر که مشتق اول پتانسیل گیبس در عبور از مرز فاز، گسسته است. از روابط ماکسول$V=-(\frac{\partial G}{\partial P})_T$ و$S=-(\frac{\partial G}{\partial T})_P$ دیده می شود که چگالی و آنتروپی گسسته اند.

در گذارهای مرتبه ی دوم مشتقات اول Gپیوسته اند، اما مشتقات دوم به طور گسسته تغییر می کنند. چند مثال دیگر عبارتند از گذار مایع - گاز در نقطه ی بحرانی، گذار فرومغناطیسی و گذار ابررسانایی.از جمله گذار فاز مرتبه دوم می توان به مدل آیزینگ دو بعدی اشاره کنیم که در آن تقارن مدل به طور خودبه خودی شکسته می شود ومنحنی تغیرات ظرفیت گرمایی بر حسب دما هنگامی که به دمای بحرانیT_C نزدیک می شویم واگرا

[۴] Mean Feild approximation

[5] Algebric Betheansatz

[۶] Empty Interval Method

[۷] Matrix Product Formalism

می‌شود. این امر نشان دهنده ی وجود یک گذر فاز در دستگاه می باشد. در واقع گذر فاز مرتبه ی اول را می‌توان به صورت ناپیوستگی در مشتق مرتبه ی اول انرژی آزاد تعریف کرد. ناپیوستگی در مشتقات مرتبه ی بالاتر انرژی مربوط به گذار فاز مراتب بالاتر با گذار فازهای پیوسته است.

فصل ۲

بررسی سیستم های تصادفی

۱.۲ سیستم تصادفی

در سال های اخیر علاقه ی فزاینده ای به مطالعه ی دستگاه هایی که به روش تصادفی با زمان تغییر می کنند ، به وجود آمده است. مدل های ریاضی چنین دستگاه هایی به نام فرایندهای تصادفی[۱] معروف اند[۱۷،۲۰] . در ا ینجا به معرفی و بررسی مفاهیم بنیادی این فرایندها می پردازیم.

۱.۱.۲ تعریف سیستم های تصادفی

در فیزیک کلمه ی آماری به ملاحظات احتمالی اتلاق می شود . بر طبق مفاهیم شهودی یک رویداد احتمالی رویدادی است که نتیجه ی آن نامشخص و غیره قابل پیش بینی است . خصوصاً این نوع رویداد ، به رویدادی اطلاق می شود که برای آن یک تغییر بی نهایت کوچک در شرایط اولیه ، نتیجه را به طور بنیادی تغییر می دهد [۱۶]. اگر یک سکه را بیندازیم ممکن است شیر بیاید یا خط . معین کردن حالت سکه قبل از انداختن سکه با داشتن شرایط اولیه ی دقیق امکان پذیر است ، اما تعین دقیق شرایط اولیه ی سکه عملاً کار آسانی نیست . قبل از انداختن سکه می توان راجع به احتمال آمدن شیر یا خط صحبت کرد . مثلاً اگر سکه سالم و متقارن باشد احتمال آمدن شیر ۱/۲ و احتمال آمدن خط ۱/۲ است . اینک این ایده ها را دقیق تر فرمول بندی می کنیم. فرض می کنیم nآزمایش در شرایط یکسان انجام می شوند . اگر نتیجه ی درn_A آزمایش بدست آید ،در این صورت احتمال این که A رخ دهد عبارت است از :

[۱] stochastic systems

$$P_A = lim_{n\to\infty} \frac{n_A}{n} \tag{۲.۱}$$

از این تعریف خصوصیات بنیادی احتمال که در زیر می آید نتیجه می شود:

- اگر دو رویداد A وB متقابلاً انحصاری باشند ، در این صورت احتمال آنکه A یا B رخ دهد برابر است با حاصل جمع احتمالات $P_A + P_B$.
- اگر دو رویداد A وB مستقل از یکدیگر رخ دهند ، در این صورت احتمال وقوع همزمان آنها برابر است با $P_A P_B$.

در یک آزمایش که نتیجه آن باید یکی از رویدادهای متقابلاً انحصاری باشد که با اندیس های$1, ..., k$ نشان داده شده اند ، احتمال $1, ..., k$وابسته بهp_i ام یک عدد واقعی است که

$$P_i \geqslant 0 \tag{۲.۲}$$

$$\sum_{i=1}^{k} P_i = 1 \tag{۲.۳}$$

را برآورده می سازد . در استفاده از این تعریف برای اندازه گیری احتمال از نظر تجربی ، مشکلات عملی وجود دارد . اول آنکه زمان بی نهایت در اختیار نداریم . دوم آنکه هیچ دو آزمایشی کاملاً یکسان نیستند . بدین ترتیب وظیفه ی واقعی این تعریف آن است که ما را به نسبت دادن یک احتمال قبلی به رویدادها راهنمایی می‌کند. اینکه آیا این نسبت درست است یا نه توسط روبه رو شدن نظریه با واقعیت تعیین می شود [۱۶].

یک متغیر آماری ، کمیتی است که مقادیر آن با یک توزیع احتمال مشخص رخ می دهند . این متغیر وقتی تعیین می شود که :

- گستره ی مقادیر ممکنy
- احتمال $P(y)$برای وقوعy

ساده ترین متغیر آماری عبارت است از نتیجه یy در انداختن یک سکه. فرض می کنیم که سکه ناقص است، به طور ی که احتمال آمدن شیر مساوی Pو آمدن خط مساوی$1 - P$ باشد . مقادیر ممکن را می توان انتخاب کرد عبارتند از :

$$y = \begin{cases} 1 \quad \text{if} \quad (\text{شیر}) \\ 0 \quad \text{if} \quad (\text{خط}) \end{cases} \tag{۲.۴}$$

با ااحتمال

$$P(1) = P \tag{۲.۵}$$

$$P(0) = 1 - P \tag{۲.۶}$$

۲.۱.۲ فضای برداری

یک سیستم تصادفی Nحالتی را در نظر می گیریم . می خواهیم برای این سیستم یک فضای برداری N بعدی بسازیم . به این ترتیب که به هر حالت سیستم یک بردار ستونیN مؤلفه ای نسبت می دهیم بردار مربوط به حالتi ام را باE_i نشان می دهیم . E_iبرداری است که مؤلفه ی iام آن ۱ است وبقیه ی مولفه هایش ۰ هستند . مثلاً حالت اول را با E_1 وحالت دوم را باE_2نشان می دهیم که:

$$\mathbf{E_1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \mathbf{E_2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \ldots \tag{۲.۷}$$

E_iهاپایه های فضای برداری مورد نظر را می سازند . به این پایه ، پایه ی فیزیکی می گوییم . در این فضای برداری ، بردار حالت سیستم راکه با نشان $\langle P \mid$ می دهیم به صورت زیر تعریف می کنیم:

$$|P\rangle = \sum_{i=1}^{N} P_i E_i \tag{۲.۸}$$