

簡単なハミルトニアン・カオス系 での熱力学の構成

大滝 由一, 長谷川 博

Graduate School of Science & Engineering, Ibaraki University

概要

我々は複雑な位相空間の構造を持つ簡単なハミルトニアン系の熱力学を提案する。特に、ハミルトニアン系への外部操作による系の応答の解析を行う。系に対する適当な外部操作とその応答の理論は広い意味で、熱力学とみなすことができる。その意味で、我々の取り組みは長時間相関などが観測され、複雑な振舞をするハミルトニアン系への熱力学と捕らえることができる。我々は、エネルギーの応答の観測から系の熱力学的な可逆性を議論する。

1 序論

自然の多様な法則を理解することは重要な問題である。色々なレベルでの階層の出現はこのような多様性を与える。階層自身の中で閉じた理論は有効理論と呼ばれ、下の階層の基本的な力学には依存しない。典型的な有効理論は熱力学である。この論文で我々はハミルトニアンカオス系を用いて熱力学の拡張を試みる。

熱力学は、平衡な系や定常状態にある系へゆっくりと操作したとき、系がどのように応答するのかを記述する。近年、関本と佐々はランジバン方程式に支配されている系にゆっくりと外部操作を与えることにより、熱力学の法則を導いた[1, 2, 3]。ランジバン方程式では、熱によるノイズはホワイトノイズとして与えられる。

一般にハミルトニアンカオス系はパラメータに依存して色々な位相空間の構造を示す。カオスの強い領域では、位相空間はほとんど全ての領域でカオス的であり、力学的な変数の時間相関は指数関数的に減衰する。我々は、仮想的な熱浴からの熱揺らぎがこの指数関数的な減衰を作ったと考えた。

始めに、強いカオスの領域に関本-佐々の議論を適用する。そして準静的過程に対する可逆性を導出する。自然不変分布への外部操作を考える。外部操作に対する系のエネルギー分布の応答を観測することにより、我々は準静的な外部操作における熱力学的な可逆性を示す。相関時間は外部操作の時間スケールに比べて無視できるほど短い。この短い相関時間が、準静的過程に対する可逆性を導く一つのキーポイントだ。

次に、我々は弱いカオスの領域へ議論を拡張する。この場合、トーラスとカオスの海が位相空間に共存している。粒子は長い時間トーラスの周辺にとどまる。この粒子は間欠的にカオスの海に逃れる。そして再びトーラスの周辺に捕えられる。力学的な変数の時間相関は中的に減衰

し、パワースペクトルは $1/f^\alpha$ ノイズを示す。この場合、十分に遅い外部操作に対しても、数値計算の範囲では、系の可逆性は観測されない。

第二節では、まず我々のモデルを導入し、内部エネルギー、熱浴、仕事そして外部操作について説明する。第三節で、外部操作によって系に与えられる仕事を調べることで熱力学的な可逆性を議論する。終りの節(第四節)で結論とまとめを与える。

2 モデルの導入

我々は二次元トーラスの表面で与えられた位相空間上で周期的な瞬間力を受ける粒子を考える。ポテンシャルは時間にたいして周期的な δ 関数で与えられる。調和振動子を加えることによって、はじめの非自励系から自励系にハミルトニアンを書き直すことができる。時間に依存したハミルトニアンは新しい角変数 α に置き換えられる。我々が仮想的な調和振動子を熱浴とみなすと、オリジナルのシステムと熱浴の全体のエネルギーは保たれる。

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \delta(\alpha - \tau) + J \quad (1)$$

我々の扱う系のポアンカレ写像は標準写像である。標準写像は $V(x) = K/(2\pi)^2 \cos(2\pi x)$ とすることにより得られる。それは典型的な面積保存写像である。ストカスティックパラメータ K に依存してポアンカレ断面は色々な位相空間の構造を示す。カオスの海では粒子は不規則に運動する。我々はこの不規則な運動が仮想的な熱浴とのランダムなエネルギー交換の結果であると解釈する。我々の熱浴は数自由度でしかないけれども、熱浴内部の詳細は重要ではない。系と熱浴とのランダムなエネルギー交換が熱力学においては重要なのである。

時刻 τ の粒子のエネルギーは、内部エネルギー U_τ と考えることができる。内部エネルギーの1ステップの間の差は、外部操作による寄与と熱浴との相互作用による寄与に分解することができる。

$$U_{\tau+1} - U_\tau = (U_{\tau+1}^{ex} - U_\tau^{ex}) + (U_{\tau+1}^{HB} - U_\tau^{HB}) \quad (2)$$

右辺第一項は外部操作によるエネルギー変化なので、系に与えられた仕事 ΔW_τ であり、第二項は熱浴からの熱量の流入 ΔQ_τ とみなすことができる。これは熱力学第一法則

$$\Delta U_\tau = \Delta W_\tau + \Delta Q_\tau \quad (3)$$

である。

例えば、外部から質量を変化させるという外部操作を考えると、内部エネルギーの変化は次のように分解できる。

$$\begin{aligned} U_{\tau+1} - U_\tau &= \frac{1}{2} m_{\tau+1} v_{\tau+1}^2 - m_\tau v_\tau^2 \\ &= \frac{1}{2} (m_{\tau+1} - m_\tau) v_\tau^2 + \frac{1}{2} m_{\tau+1} (v_{\tau+1}^2 - v_\tau^2) \\ &= \Delta W_\tau + \Delta Q_\tau \end{aligned} \quad (4)$$

質量の変化に依存した内部エネルギー変化は仕事量であり、もう一つの項は熱浴との相互作用によって与えられた熱量である。

カオス領域のなかで自然不変分布で分配されている粒子の集団を考える。外部操作がなければ、どの粒子にも仕事は与えられないから、仕事量の分布は δ 関数で与えられる。我々は外部操作としてストカスティックパラメータ K を周期的に変化させる。そして操作のあとの仕事量の分布を測定する。準静的過程のもとで我々の系が可逆であるならば、 δ 関数で与えられた仕事量の初期分布は、外部操作の後でも δ 関数に留まるだろう。

3 外部操作と熱力学的可逆性

我々の外部操作では質量とストカスティックパラメータ K の間には次の関係がある。

$$m \propto \frac{1}{K} \quad (5)$$

従って、 K を変化させることは質量 m を変化させることに置き換えることができる。周期 T の外部操作のあと、粒子に与えられた仕事量 W_T は

$$W_T = \sum_{n=0}^{T-1} \Delta W_\tau = \sum_{n=0}^{T-1} \frac{1}{2} (m_{\tau+1} - m_\tau) v_\tau^2. \quad (6)$$

我々は次の(図1)に示してあるような周期的な外部操作を導入する。時刻0から $T/2$ の間に K は直線的に K_1 から K_2 に変化する。そして、時刻 $T/2$ から T の間に K は直線的に K_2 から K_1 まで戻される。これは熱浴に接触したピストンのついた箱を考え、そのピストンを動かしてまた元に戻すという操作に対応している。このピストンのついた箱の場合、準静的操作の後の箱の中の状態は操作の前の状態に一致する。そしてこれは準静的操作に対して可逆であることを示している。我々のモデルにおいても、カオスの非常に強い領域では準静的操作における可逆性を示すことができる。

強いカオスの領域

このとき一本の軌道がくまなく位相空間全体を巡ることが数値計算の結果として知られている[4]。そして力学的な変数の時間相関は指数関数的に減衰する。

周期 T の外部操作のあとで、仕事量 W_T の分布は近似的にガウス分布になる(図2)。そしてその分散は周期 T に対して $1/T$ で減衰する(図3)。このことは有限の揺らぎにおける中心極限定理から説明できる。準静的操作のような長い周期の極限では、仕事の分布は δ 関数に保たれるであろう。これは準静的操作の極限でこの系が可逆であることを意味する。

弱いカオスの領域

このとき位相空間は複雑な構造をしめす。つまりトーラスがカオスの海のなかに自己相似的に埋め込まれているのである。そして、このとき $1/f^\alpha$ ノイズが観測され長時間相関が存在している。

周期 T の外部操作のあとで、仕事量 W_T の分布は近似的に二種類の分布の重ね合わせで書き表すことができた(図4)。

短い周期の外部操作では、仕事量 W_T の分布の分散は $1/T^2$ に比例して減衰するが、長い周期については分散は外部操作の周期について巾的に増加する (図 5).

この結果は系に特徴的な二つの時間スケールが存在している可能性を示す.

長い周期の外部操作において仕事量 W_T の分布の分散が増加することは、長周期の外部操作でさえ可逆から遠い過程であることを意味している. このことは相沢らによって議論されている非定常カオス [5] がこの現象のキーポイントであると考えられる.

4 結論とまとめ

強いカオスの領域

外部操作のあとで、仕事量の分布は近似的にガウス分布になる. そしてその分散は周期 T に対して $1/T$ で減衰した. これは有限の揺らぎにおける中心極限定理から説明される. 準静的過程のような長い周期の外部操作の極限では、仕事量の分布は δ 関数に保たれるであろう. この結果は準静的な外部操作において系が可逆であることを意味する.

弱いカオスの領域

外部操作のあとで、仕事量の分布は近似的に二種類の分布の重ね合わせになる. これは大きな揺らぎにおける一般化中心極限定理によって説明できる可能性がある. 分散は長い周期の外部操作において巾的に増加した. これは長い周期の外部操作においてでさえ、可逆から遠い過程であることを意味している. 非定常カオスがこの現象に大きな役割をはたしていると我々は考えている.

参考文献

- [1] K.Sekimoto, J.Phys. Soc.Japan, **66**, 1234, (1997).
- [2] K.Sekimoto, and S.Sasa, J.Phys. Soc.Japan, **66**, 3326, (1997).
- [3] K.Sekimoto, 第 42 回 物性若手夏の学校 講義ノート.
- [4] B.V.Chirikov, Phys.Rep, **52**, 265, (1979).
- [5] Y.Aizawa, Y.Kikuchi, T.Harayama, K.Yamamoto, M.Ota and K.tanaka, Prog. Theor.Phys. Suppl, **98**, 36, (1989).

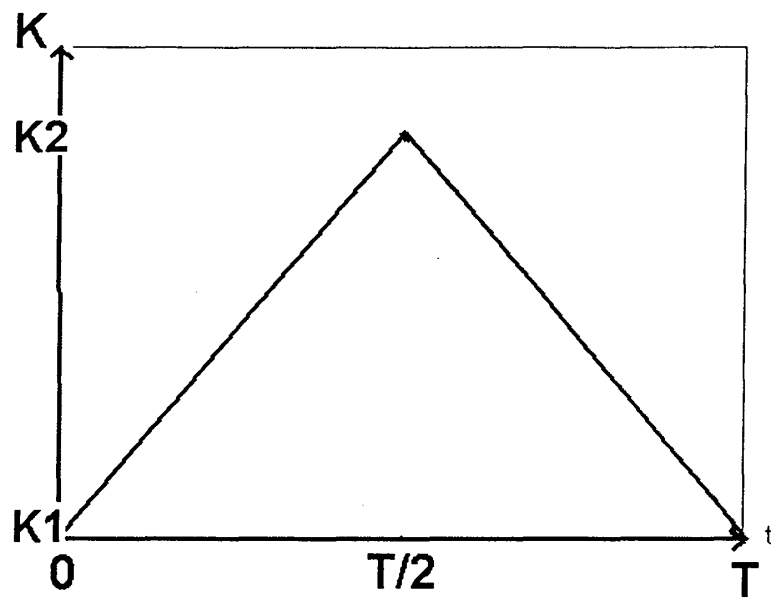


図 1: 周期 T の外部操作. ストカスティックパラメータ K を変化させる.

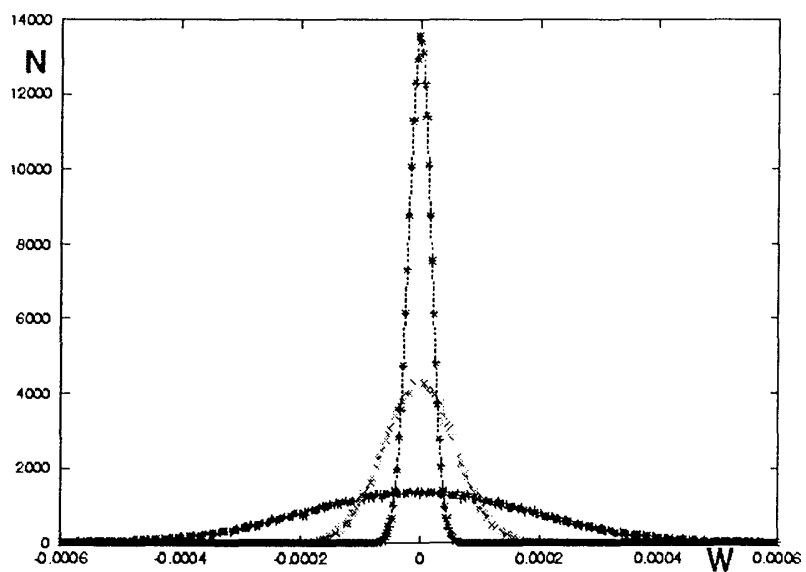


図 2: 周期 T の外部操作の後の仕事量のヒストグラム. 図中央の下から順に $T = 10, T = 100, T = 1000$. $K_1 = 10, K_2 = 11$.

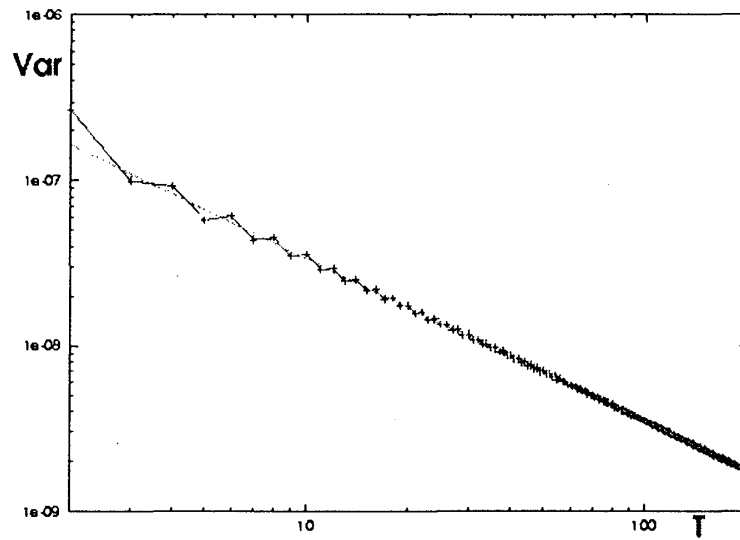


図 3: 仕事量の分布の分散の図. 横軸に外部操作の周期を取り縦軸に分散を取った.+印のついた線が数値計算の結果. $K_1 = 10, K_2 = 11$.

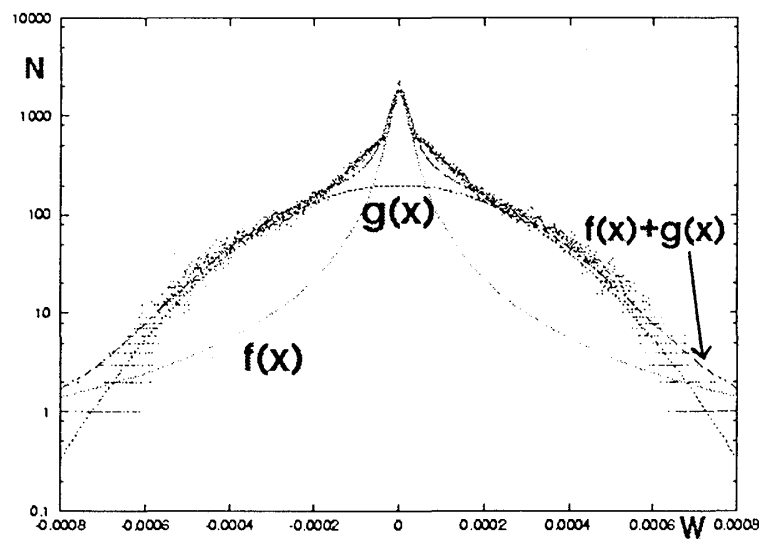


図 4: 周期 $T = 500$ の外部操作の後の仕事量のヒストグラム. $\cdot$ が数値計算の結果. この場合 $f(x) = 1800/(10^9 x^2)$, $g(x) = 200 \exp(-10^7 x^2)$ という二つの関数の和によって近似的に書き表すことができた. $K_1 = 0.8, K_2 = 0.85$

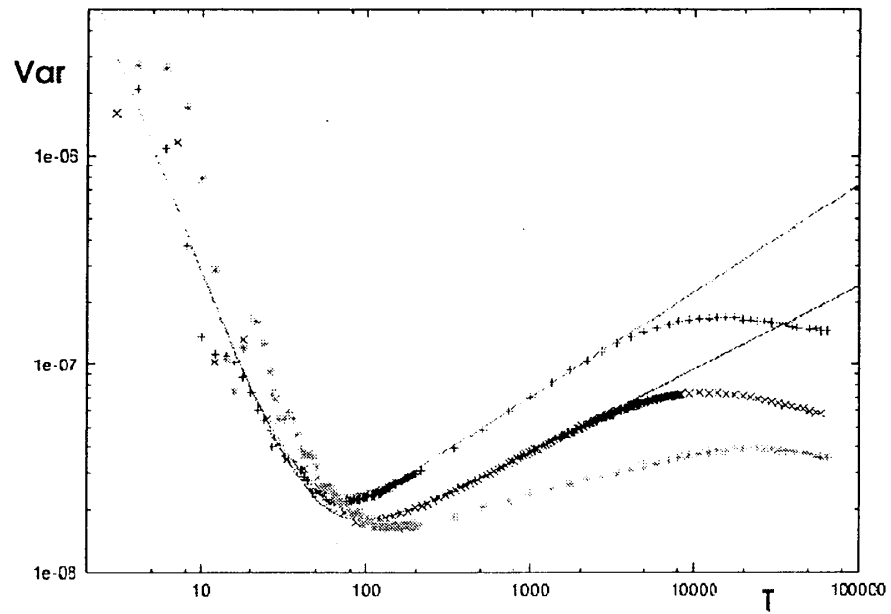


図 5: 仕事量の分布の分散の図. 横軸に外部操作の周期を取り縦軸に分散を取った. 図の右側の下から順に $(K_1 = 0.7, K_2 = 0.75)$, $(K_1 = 0.8, K_2 = 0.85)$, $(K_1 = 0.9, K_2 = 0.95)$ の数値計算の結果. これらはそれぞれ図の右側の下から順に $e^{-10.5}T^{-2} + e^{-18.99}T^{0.21}$, $e^{-10.5}T^{-2} + e^{-19.85}T^{0.40}$, $e^{-10.5}T^{-2} + e^{-20.0}T^{0.51}$ という関数で近似できる.