第 10 回 相関基礎科学演習 II の要旨　　平成 13 年 7 月 16 日

ハミルトン力学系におけるリアプノフ解析とエントロピー

寺田 洋平 (指導教官 佐々真一)

1　はじめに

自然に対しては「できること」と「できないこと」があって、そのことをよく表している物理として熱力学がある。熱力学には、断熱環境下ではエントロピーを減少させるような平衡状態間遷移を行うことができない、という熱力学的不可逆性がある。その一方で、熱力学の系は多数の分子から構成されていて、それらの分子は可逆な力学の法則に従って運動している。特に断熱環境下にある系の分子の運動は、ハミルトン力学系であるとみなすことができる。そこで力学と熱力学的不可逆性との関係について調べてみたいと思う。

ハミルトン系で、かつカオス系でリアプノフ解析を用いて「不可逆情報損失量」I という新しい量を定義すると [1]、1 粒子ビリヤードモデルではマイクロカノニカルアンサンブルから選ばれた初期条件での平均 $\langle I\rangle_{mc}$ が常に減少しないことが数値計算で示されている [2]。つまり I は熱力学的不可逆性と関係のある量であるとみなせる。

今研究では、この I を多粒子系で計算する。そしてボルツマンエントロピー S_B との関係を調べることにより、I が熱力学的不可逆性と関係のある量であることを示したい。

2　理論

カオス系の性質として、軌道の近傍にあった相空間上の点は時間がたつと、元の軌道から指数関数的に離れていってしまう初期値鋭敏性がある。この軌道の拡大の度合を数値計算で求める手法として、リアプノフ解析というものがある。これにより軌道の発展方程式を線型化して、ある時刻の軌道上にある k 次元空間の時間発展の様子を得ることができる。

ハミルトニアンは、時間に依存するパラメータ α を含む $H(\Gamma(t),\alpha(t))$ とする。ここで $\Gamma(t)$ は時刻 t での N 次元の運動量と座標のセットであり、$2N$ 次元空間上の点を表す。

ある時刻 s に $\Gamma(s)$ における接空間で定義される単位直交化ベクトルのセット $\{e_i(s)\}(1\le i\le 2N)$ を考える。この時 Gram-Schmidt の直交化により、時刻 $t(>s)$ での $\{e_i(t)\}$ は、線型発展方程式 $T(t,s)$ を用いて、

$$T(t,s)e_i(s)=\sum_{j=1}^{2N}L_{ij}(t,s)e_j(t) \tag{1}$$

と表せる。ここで、i 番目のリアプノフ指数は

$$\lambda_i(t)=\frac{d}{dt}\log L_{ii}(t,s) \tag{2}$$

の長時間平均となる。

ここからは $2N$ 次元空間のうち、不安定方向を向いた N 次元空間の時間発展について考える。$e_i(t)$ 及び $\lambda_i(t)$ は時刻 s での $e_i(s)$ の選び方に依存してしまう。そこで、時刻 s で任意に選んだ二組の直交ベクトルセット $\{e_i(s)\}$、$\{e'_i(s)\}$ を十分長時間発展させ、$|1-(e_i(t),e'_i(t))|<\epsilon$ を満たすことを確認する。ここで (e,e') は内積、ϵ は任意の値で、ここでは 10^{-6} とする。この時、$\{e_i(t)\}$ は時刻 t で最も不安定な N 次元空間を張るベクトルのセットであるとみなすことができる。これをリアプノフベクトルと呼ぶ。リアプノフベクトルを式 (1) で時間発展させることにより、式 (2) から局所増大率 λ_i を求めることができる。

さて、系を時刻 τ_- から τ_+ まで時間発展させる。この時、時刻 $t_0(\tau_-<t_0<\tau_+)$ でパラメータ α を $\alpha_0\to\alpha_1$ のように変化させる。するとパラメータ変化後の軌道では、変化前の軌道で作ったリアプノフベクトルは意味を持たなくなる。それでもそのまま時間発展させていったものを「前進リアプノフベクトル」$e_i^{(F)}$ と呼ぶことにする。一方パラメータ変化を加えた後の新しいエネルギー面でリアプノフベクトルになるものを「後退リアプノフベクトル」$e_i^{(B)}$ と呼ぶ。そして各ベクトルの局所増大率をそれぞれ $\lambda_i^{(F)}$、$\lambda_i^{(B)}$ とする。この時、「不可逆情報損失量」I を

$$I=\lim_{\tau_\pm\to\infty}\int_{\tau_-}^{\tau_+}dt\sum_{i=1}^{N}\left\{\lambda_i^{(F)}(t)-\lambda_i^{(B)}(t)\right\} \tag{3}$$

と定義する。

I を各初期条件ごとに数値計算で求めることにより、分布関数 $\Pi(I)$ が求まる。もしこの I が fluctuation theorem

$$\log \Pi(I) - \log \Pi(-I) = I \tag{4}$$

を満たすなら、ここから $\langle \exp(-I) \rangle_{mc} = 1$ という関係が導け、Jensen の不等式 $\langle \exp(-I) \rangle_{mc} \geq \exp(-\langle I \rangle_{mc})$ より、$\langle I \rangle_{mc} \geq 0$ が導ける。つまり I は熱力学的不可逆性と何らかの関係のある量であると考えることができる。

3　計算

I の値を数値計算で求め、その分布が fluctuation theorem 式 (4) を満たすことを調べる。モデルは平均場近似をした 1 次元強誘電体で、そのハミルトニアンは

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^{N} \left(a q_i^4 + b q_i^2 \right) - c \langle q \rangle \sum_{i=1}^{N} q_i - eE \sum_{i=1}^{N} q_i \tag{5}$$

である。ここで q_i, p_i は i 番目の粒子の変位、運動量、N は粒子数、m は粒子の質量、a, b, c はポテンシャルのパラメータ、e は粒子の有効電荷、E は外部電場である。また $\langle q \rangle$ は q_i の平均である。計算では $N = 4$、$m = 1.0$、$a = 5.0$、$b = 0.0$、$c = 10.0$、$e = 1.0$、初期エネルギー密度を $H/N = 5.0$ とした。また、時間変化させるパラメータは E とし、ある時刻 $t = t_0$ に $0.0 \to 10.0$ とステップ的に変化させた。

4　結果及び考察

I の分布を調べると、確かに fluctuation theorem を満たしている。よって $\langle I \rangle_{mc} \geq 0$ が成り立つことがいえる。このように I が熱力学的不可逆性と関係のある量であることはいえそうである。さらにボルツマンエントロピーを計算し、パラメータ変化前後でのボルツマンエントロピーの変化分 ΔS_B と I の関係を調べる。

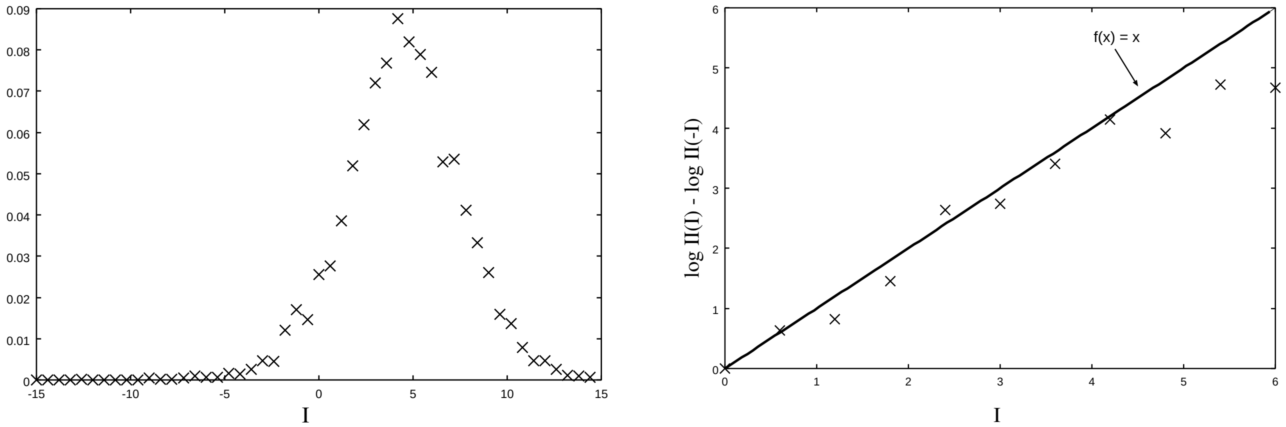

図 1: I の分布 (左) と fluctuation theorem のチェック (右)(4295 サンプル)

参考文献

1. S. Sasa and T. S. Komatsu, *Prog. Theor. Phys*, **103**, 1 (2000)
2. S. Sasa, nlin.CD/0006042(http://xxx.yukawa.kyoto-u.ac.jp)