一次元非調和格子の熱伝導と大自由度カオス

蕪木英雄、町田昌彦
日本原子力研究所
情報システムセンター

1　序論

FPU(Ferimi-Pasta-Ulam) 型の非線形相互作用を持つ一次元格子を用い、エネルギー輸送現象の微視的機構を解明するため非平衡状態での数値シミュレーションを行ない、定常熱伝導におけるフーリエの法則の成立する領域を示した。また、位相空間中の分離距離の測定を行ない、力学系と力学系が示す熱力学的振舞いとの関係を調べた。

調和項に３又は４次の非調和項を持った１次元 FPU(Ferimi-Pasta-Ulam) 格子による非平衡緩和数値実験 [1] 以来、位相空間中のストカスティック運動と熱力学的性質との関係についていくつもの理論的、数値的研究が行なわれてきた [2][3][4]。しかし、平衡状態にある１次元非線形格子のストカスティック運動が熱力学的極限でどの様に振舞うかについては明らかになっていない。一方、非平衡系において基本的な未解決の問題として、定常熱伝導におけるフーリエの法則の多体ハミルトン系からの導出がある。

Jackson 等 [5] は、100 個の粒子から構成される FPU 格子を用いて、非定常の熱伝導数値実験を行ない、非常に大きな非線形性を導入して、小さな直線的な温度勾配を観測している。また、Visscher 等 [6] もランダムに質量を分布させた非調和格子を用い直線的な温度勾配を観測している。しかし、熱浴と格子の間の温度ジャンプ、熱伝導率に与える非線形性の影響、また、熱伝導率の格子数依存性等フーリエの法則の数値実験による確認は得られなかった。

一方、Mokross と Büttner [8] は、1983 年に Diatomic Toda 格子を用いると定常熱伝導において温度分布が直線性を示すことを確認した。また、Jackson と Mistriotis [9] は、最大 400 個の Diatomic Toda 格子を用いて熱伝導率の格子数依存性及び不純物原子の質量依存性を調べた。しかしながら、温度分布の直線性、熱伝導率の温度依存性、測定温度範囲、熱浴との相互作用等についての考察が十分でなく、 熱伝導の微視的機構は明らかになっていない。一方、Casati 等 [7] は、非線形格子におけるストカスティックな運動を大きくして、格子内に発生するソリトン的な熱パルスを有効に減衰させるため、Ding-a-ling モデル を考案し、熱伝導数値実験を行ない、フーリエの法則が１０－２０個程度の格子で成立することを示した。しかし、このモデルでは、剛体球同士による衝突により意図的に気体的な振舞いを導入しているため、現実の固体における熱伝導モデルとの関係が明確でない。

われわれは、Diatomic Toda 格子を用いて Jackson と Mistriotis [9] の数値実験より幅広い格子数 (50-3000 個) 及び温度範囲でフーリエの法則の成立する領域を見い出した [10]。この数値実験により、10^3 個程度の粒子でフーリエの法則を実現するために重要なパラメータが明らかになった。これらは、非線形格子における非線形項の大きさ、平均温度（エネルギー）、外部温度勾配、格子数等である。

特に、FPU 格子においては、これらパラメータ領域の研究が十分でなく、1次元 FPU 格子における定常熱伝導フーリエの法則の成立性は明らかになっていなかった。そこで、十分大きな非線形項を持つ FPU 格子について、非線形項の温度勾配形成に与える影響、熱伝導率の格子数依存性を調べ、フーリエの法則の成立する条件について議論した [11]。また、熱力学系と力学系の関係を調べるため、非平衡系での数値実験結果において熱力学的エントロピーを測定し、力学系のストカスティシティの特性量である位相空間における分離距離の指数関数的増加率との関係を示した。

2 FPU 格子モデルと数値手法

熱伝導数値実験には、4次の非調和項を持った1次元 FPU 格子モデルを採用した。この格子の無次元化ハミルトニアンは次のように表される。

$$H=\sum_{i=1}^{n+1}\frac{p_i^2}{2m_i}+\sum_{i=1}^{n}[\frac{1}{2}(x_{i+1}-x_i)^2+\frac{1}{4}\beta(x_{i+1}-x_i)^4] \tag{1}$$

ここで $r_i=x_{i+1}-x_i$ は相対変位、FPU 格子では $m_i=1.0$ であり、Diatomic FPU 格子では i が偶数のとき $m_i=1.0$、奇数のとき $m_i=0.5$ である。β は、非線形パラメータである。ここで、無次元化は平衡状態での格子間距離 l_0、調和項のバネ定数 κ、及び基準質量 $m_i=1.0$ により行なった。ハミルトニアン $\tilde{H}$ は、$H=\tilde{H}/\kappa l_0^2$ と無次元化される。また、$\beta=\lambda l_0^2/\kappa$ 非線形パラメータで、λ は4次の非調和項ポテンシャルの展開係数ある。

数値計算では、端の原子は固定とし、時間積分は 4 次の Runge-Kutta 法を用いた。また、カオスの数値計算には 4次精度の鈴木 - Trotter 分解に基づく時間積分手法 [12] を採用した。時間ステップは十分小さくとり ($\Delta t=5\times10^{-3}$)、エネルギーの計算精度は 10^{-7} 以下であった。

定常熱伝導は、$N+1$ 個の1次元格子の両端に高温及び低温の熱浴を取りつけることにより実現される。熱浴のモデル化は、1番目と N 番目の粒子の速度を各時間ステップ毎に高温 (T_h) と低温 (T_l) に対応するマックスウエル分布よりランダムに抽出して設定することにより行なう。0番目と $N+1$ 番目の粒子の変位は、0と仮定する。この様な熱浴を外部から与え、他の粒子の運動は式（1）によるハミルトニアンから導出したハミルトン方程式を決定論的に数値計算する。数値シミュレーションが定常になったか否かは、温度分布が十分直線的な温度勾配を示していること及び熱流束が一定になっていることにより判断する。

局所的な温度は、各粒子の運動エネルギーの時間平均の2倍で定義する。また、特性量の時間平均は10ステップ毎にサンプリングする。熱伝導率は、格子の両端で観測された温度差、格子数及び格子全体で定義した熱流束の時間平均 [5] より求めるここで温度差は、温度勾配を直線にフィットさせることにより求める。

3 FPU 格子の定常熱伝導数値実験の結果

式（1）で定義した FPU 格子において、非線形パラメータ $\beta=1.5$ の場合について熱伝導数値実験を行なった。FPU 格子では現在まで明確にフーリエ的な熱伝導が成立することは確認されていなかったが、われわれは、Diatomic Toda 格子における定常熱伝導数値実験の結果及び Diatomic Toda 及び FPU 格子におけるストカスティシティの測定より、非線形性を増加することにより十分 Diatomic Toda 格子と FPU 格子は同じ程度のストカスティックな振舞いをするこ

とを見い出した[13]。そこで、Fig.1に示すように、βを調節してDiatomic Toda格子と同程度のポテンシャル勾配を持つようにした。この操作により、粒子間の運動量交換の確率を増加することができ、Diatomic Toda格子と同じような力学的振舞いが期待できる。

Fig.2及びFig.3に、高温及び低温の無次元熱浴温度をそれぞれ$T_h = 100$、$T_l = 10$に設定した時、格子数$N = 300$及び$N = 3000$の場合の温度分布の結果を示す。Fig.2に示すように、格子数$N = 300$の場合でも直線的な温度勾配が観測された。また、熱浴と格子端の間には大きな温度ジャンプが見られた。しかし、格子数を増加したFig.3の$N = 3000$の場合では、格子端の温度ジャンプが減少していく傾向があることが分かった。これらの数値実験を格子数$N = 50, 100, 300, 500, 1000, 3000, 5000$について行ない、全ての場合で直線的な温度勾配が観測されかつ温度ジャンプが格子数を増加するに従い減少する傾向があることが観測された。$N = 300$の場合で、統計誤差を十分に減少させるのに必要な時間ステップは、5×10^7程度である。

非線形パラメータβの温度勾配形成に与える影響を調べるため、格子数$N = 1000$の格子について数値シミュレーションを行なった。Fig.4は、非線形パラメータ$\beta = 1.5, 0.1, 0.01$に対する温度分布の数値計算結果を示したものである。図より非線形パラメータを減少するにつれ、格子内に形成される温度勾配が減少していくのが分かった。Fig.5にベストフィットした温度勾配に対する非線形パラメータβの関係を示す。非線形パラメータを増加するに従い、格子内部に形成される温度勾配は増加するが、$\beta = 1$程度で一定になる傾向が見られた。

Fig.6に非線形パラメータ$\beta = 1.5$とした場合の熱伝導率Kの格子数依存性を示す。格子数を増加するに従い、熱伝導率は増加して、一定値に近づく傾向があることが分かった。熱伝導フーリエの法則を確認するためには、格子内温度分布の直線性と同時に格子数に熱伝導率が依存しないことを確認する必要がある。格子数を増加するとフーリエ的な熱伝導が実現されていく過程をより良く見るために、Fig.7に数値実験から得られた温度分布から勾配を直線でベストフィットした結果を示す。図中の直線は、格子端での温度ジャンプが存在せず、外部温度勾配が理想的に格子に形成された場合を示している。格子数を増加すると、観測した温度勾配はこの直線に漸近していくことが分かる。この結果から外挿すると格子数約$N = 20000$程度でフーリエの法則が実現されることが予測できる。しかしながら、この格子数領域での数値シミュレーションは、高温熱浴領域でのゆらぎが大きくなり、計算時間が十分でないと実現が困難である。

Fig.8で、Diatomic Toda格子とDiatomic FPU格子の熱伝導率の結果を比較した。質量を分布させることにより、Diatomic FPU格子では、熱伝導率がFPU格子に比較してわづかに減少していることが分かる。これは、かなり強い非線形性を導入しているため質量の違いによる熱伝導率への影響は小さいものと予測される。一方、Diatomic Toda格子では、FPU格子に比較して小さな粒子変位に対する非線形性が強いので、熱伝導率が1/4程度減少していることが分かる。

4　熱力学的エントロピー生成率と分離距離との関係

今まで述べた非平衡状態の数値シミュレーションにより、1次元FPU格子でフーリエ的な熱伝導が成立する可能性を示した。ここでは、このモデルで得られた数値結果に対して、熱力学的エントロピー生成率$\dot{S}$の測定を行なった。計算は、格子数$N = 1000$の場合について行なった。この場合の温度分布では、格子両端で温度ジャンプが存在する。そのため、エントロピー生成率

は、これらの温度ジャンプを含めた場合 ($\dot{S_{tot}}$) と内部温度勾配による場合 ($\dot{S_{int}}$) に分けて測定した。格子全体の $\dot{S_{tot}}$ では、熱浴から格子に単位ステップ当たり出入りしたエネルギー ΔE_N,ΔE_1 と外部から設定した熱浴温度により評価し、内部温度勾配による $\dot{S_{int}}$ は、格子の両端に出入りする熱流束と観測された格子両端の温度で以下の式に従い決定する。

$$\dot{S_{tot}} = \frac{\Delta E_N}{\Delta t}\frac{1}{T_l} - \frac{\Delta E_1}{\Delta t}\frac{1}{T_h} \tag{2}$$

$$\dot{S_{int}} = \frac{J_{out(N)}}{T_{N-1}} - \frac{J_{in(1)}}{T_2} \tag{3}$$

一方、力学的なエントロピーに相当する量は、以下のようにして決定する。まづ、以下の位相空間中の分離距離を測定する。

$$D(t) = \sqrt{\sum_{i=1}^{N}(q_i' - q_i)^2 + \sum_{i=1}^{N}(p_i' - p_i)^2} \tag{4}$$

これは、ある特定粒子の初期条件を僅かにずらした 2 つの系を用意し、それらを同じ条件で時間発展させた時それぞれの系における位相空間中の軌道の分離距離を表している。初期条件としては、運動量を 2 つの系の間で 10^{-6} 違えた。フーリエの法則が成立していると予測される領域では、系のストカスティシティが十分強く、分離距離は十分指数関数的に成長していると考えられる ($D(t) = D(0)exp(\lambda t)$)。われわれは、色々な初期条件 $D(0)$ のもとで、分離距離の指数関数的成長率 λ を測定した。これらを平均して、熱力学的エントロピー生成率との関係を示したのが、Fig.9 である。この図は $N = 1000$ の場合で、λ を変化させるには格子の非線形パラメータ β を変化させている。図中の直線は $\dot{S} = \lambda$ の関係を示しており、ハミルトン系の位相空間を粗視化した時、微小な位相空間の体積があらゆる方向に指数関数的増加を示す理想的な場合に対応している。粒子数 $N = 1000$ 程度の格子では、全体及び内部のエントロピー生成率とも $\dot{S} = \lambda$ の関係より、かなり小さいことが分かった。Fig.10 は内部の温度勾配に対するエントロピー生成率と λ の関係を示したものである。同じ FPU 格子モデルでは、格子数が増加するに従い同じ λ でもエントロピー生成率が大きくなることが分かった。また、非線形性が強い Diatomic Toda 格子では、同じ格子数でも FPU 格子より大きなエントロピー生成率を示すことが分かった。今後、より熱力学的な振舞いを示している系について温度、非調和項等のパラメータがエントロピー生成率にどの様に影響し、リヤプノフ指数の分布とどの様な関係にあるかを調べる予定である。

5 結論

1 次元 FPU 格子において、非平衡系の数値シミュレーションを行ない熱伝導フーリエの法則が成立する可能性を示した。また、非調和項の温度勾配形成に与える影響及び熱伝導率の格子数依存性を明らかにした。さらに、力学系と熱力学系の関係を調べるため、位相空間中の分離距離の指数関数的成長率と熱力学的エントロピー生成率との関係を明らかにした。

参考文献

[1] E.Fermi,J.Pasta, and S.Ulam, Collected Papers of E.Fermi, ed. E.Segre (University of Chicago, Chicago, 1965).

[2] H.Kantz, Physica D(1989)p.322.

[3] M.Pettini and M.Cerruti-Sola, Phys. Rev. A44(1991) p.975.

[4] L.Galgani,A.Giorgilli,A.Martinoli,and S.Vanzini, Physica D 59 (1992) p.334.

[5] E.A.Jackson, J.R.Pasta, and J.F.Waters, J. Compt. Phys. 2 (1968) p.207.

[6] W.M.Visscher, Methods of Computational Physics 15 (1976) p.371.

[7] G.Casati, J.Ford, F.Vivaldi, and W.M.Visscher, Phys. Rev. Lett. 52 (1984) p.1861.

[8] F.Mokross and H.Büttner, J. Phys. C: Solid State Phys., 16 (1983) p.4539.

[9] E.A.Jackson and A.D.Mistriotis, J. Phys. C: Condens. Matter 1 (1989) p.1223.

[10] H.Kaburaki, M.Machida, and N.Ito, Int. Meeting on Compt. Phys. for Conden. Matter Phenomena (CPCMP) II(Tokyo,1992) p.42; Full papers are in preparation.

[11] H.Kaburaki and M.Machida, Phys.Lett.A181(1993)p.85.

[12] M.Suzuki, Phys.Lett.A 165(1992)p.387.

[13] M.Machida and H.Kaburaki, Molecular Simulation (1993), to be published.

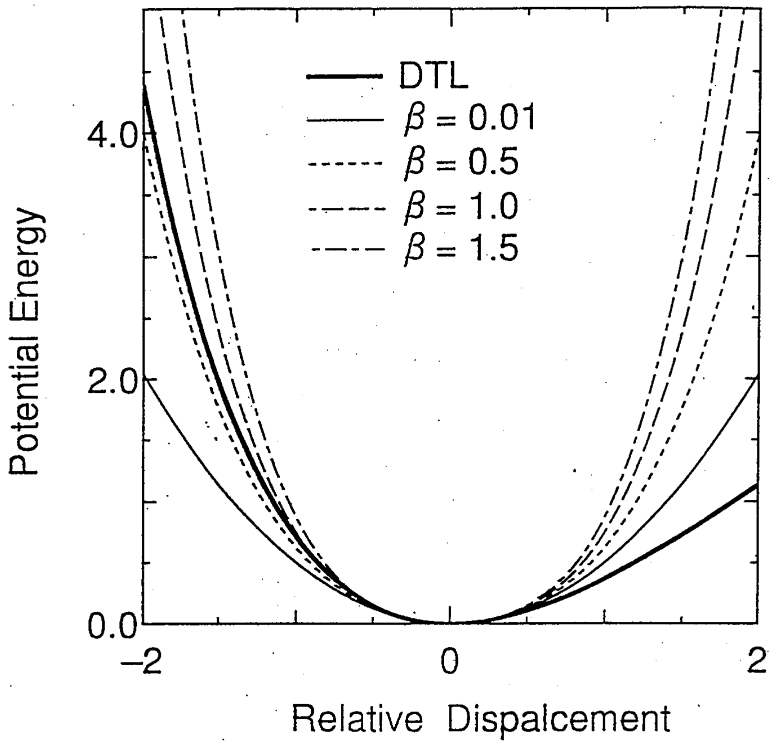

Fig.1 FPU格子のポテンシャルのβによる影響（図中のDTLは、Diatomic Toda格子のポテンシャルを示す）

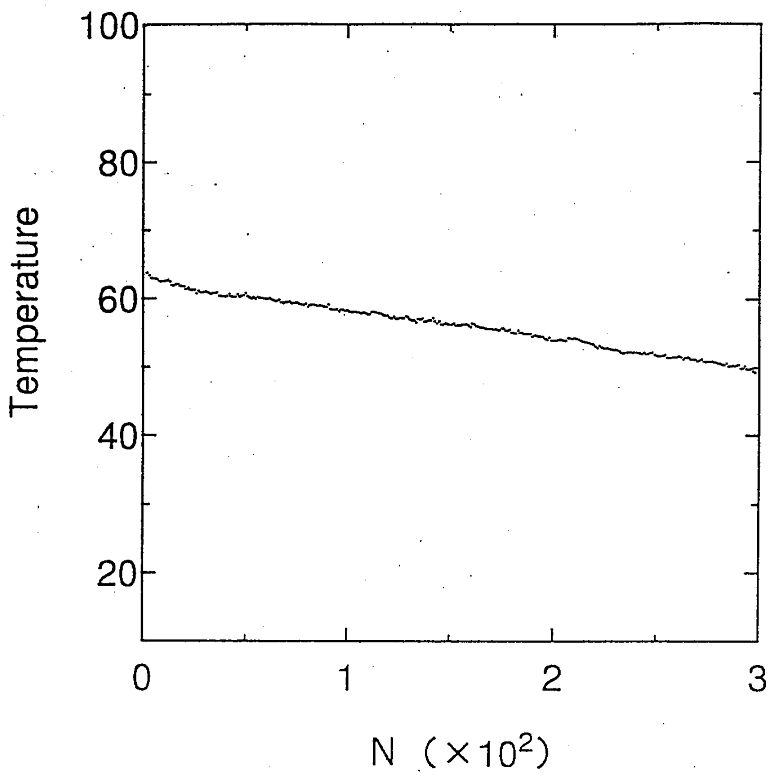

Fig.2 粒子数300個のFPU格子における温度分布

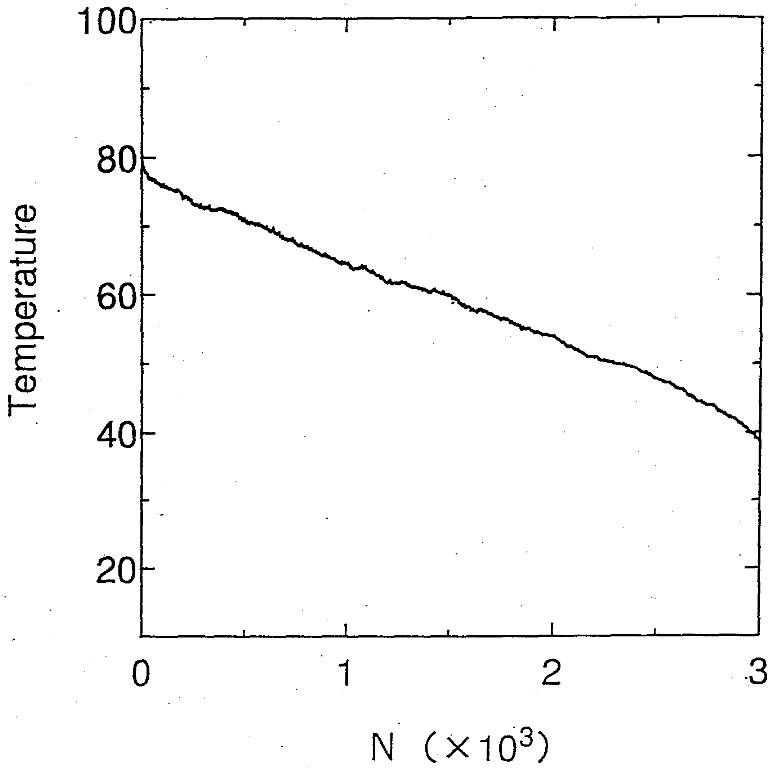

Fig.3 粒子数3000個のFPU格子における温度分布

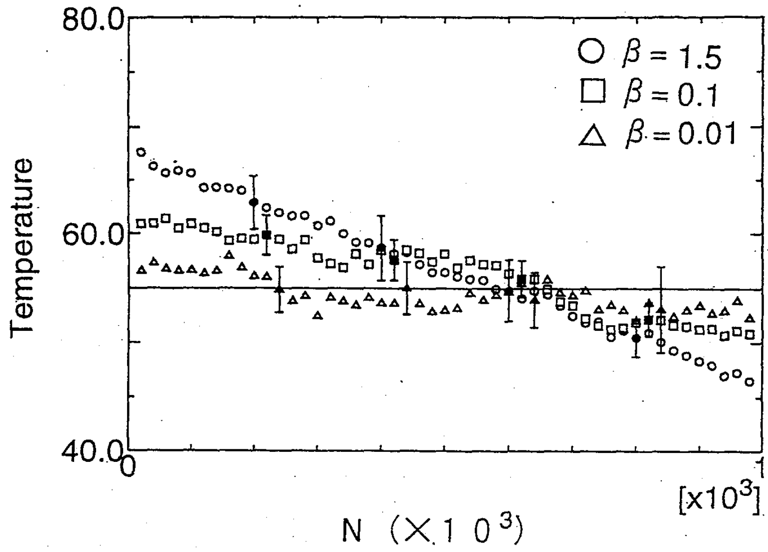

Fig.4 格子内温度勾配形成に与える非線形パラメータβの影響

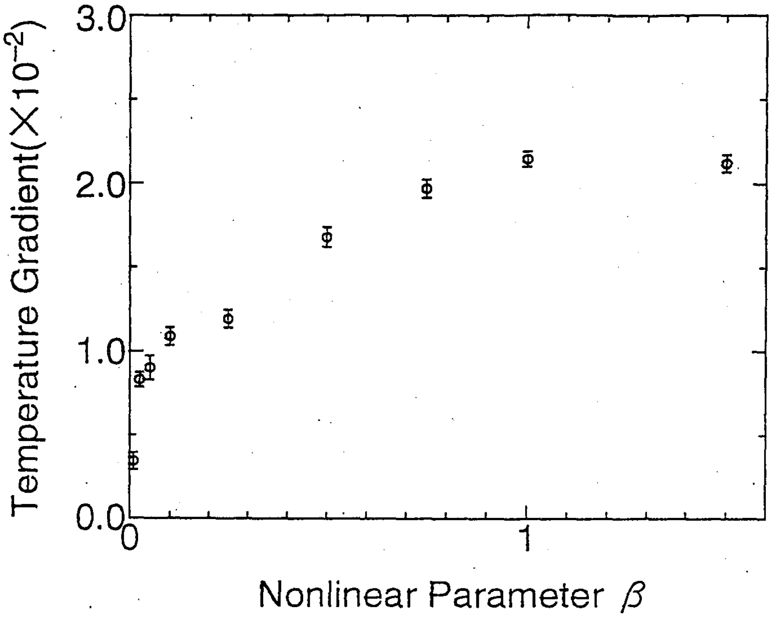

Fig.5 粒子数 $N=1000$ の FPU 格子における、観測された内部温度勾配と非線形パラメータ β の関係

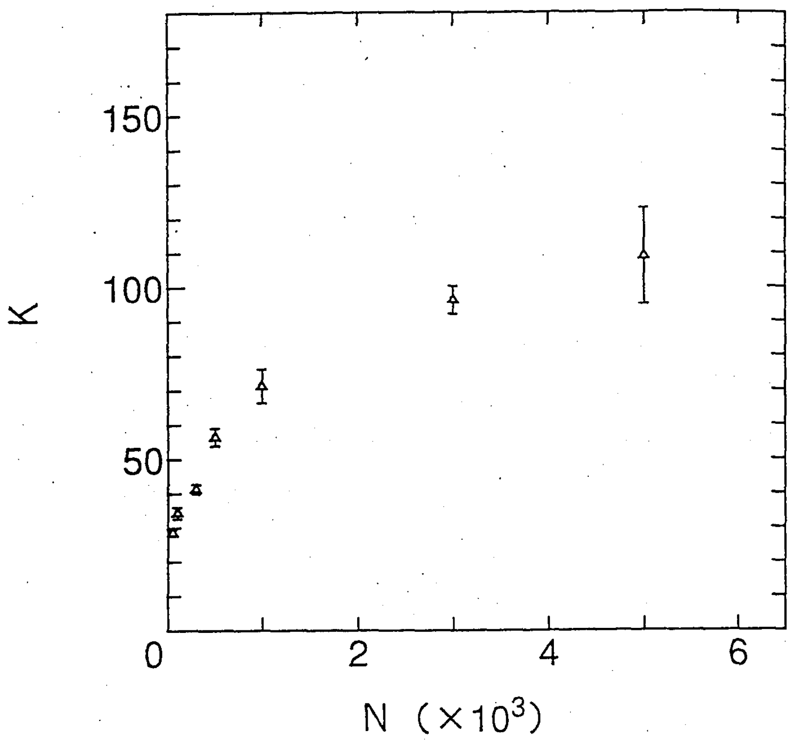

Fig.6 $\beta=1.5$ の FPU 格子に対する熱伝導率 K の粒子数 N 依存性

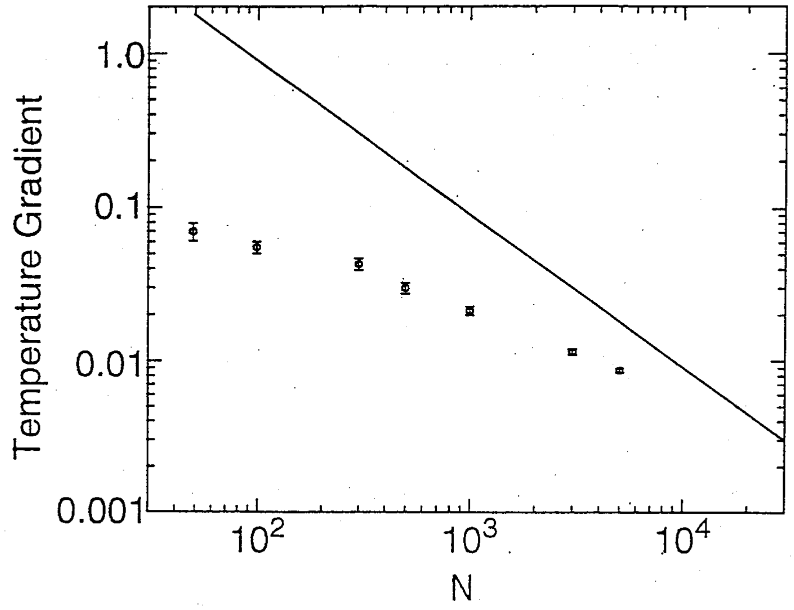

Fig.7 観測された内部温度勾配の粒子数依存性

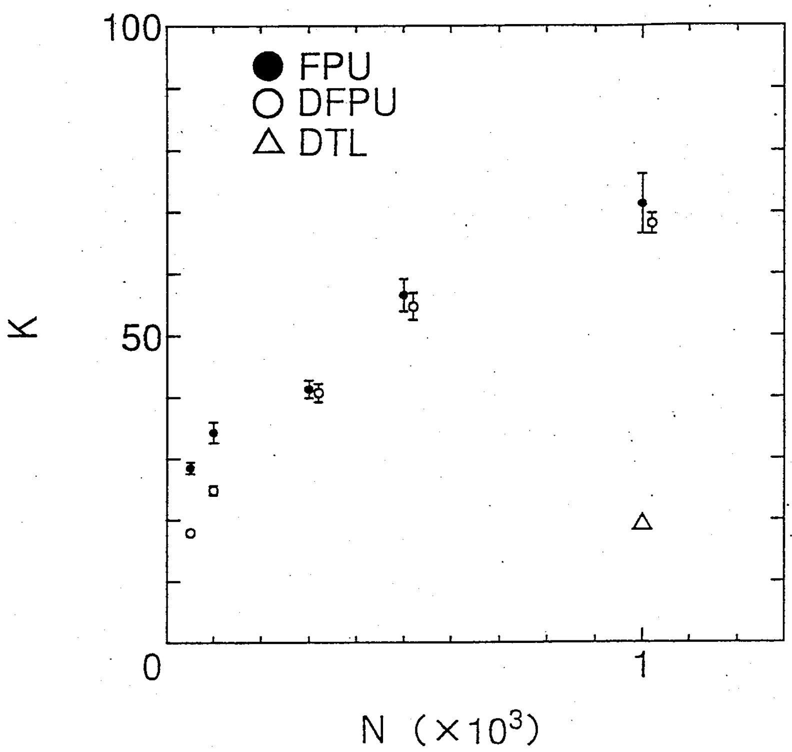

Fig.8 FPU 格子と Diatomic FPU 格子の熱伝導率の比較

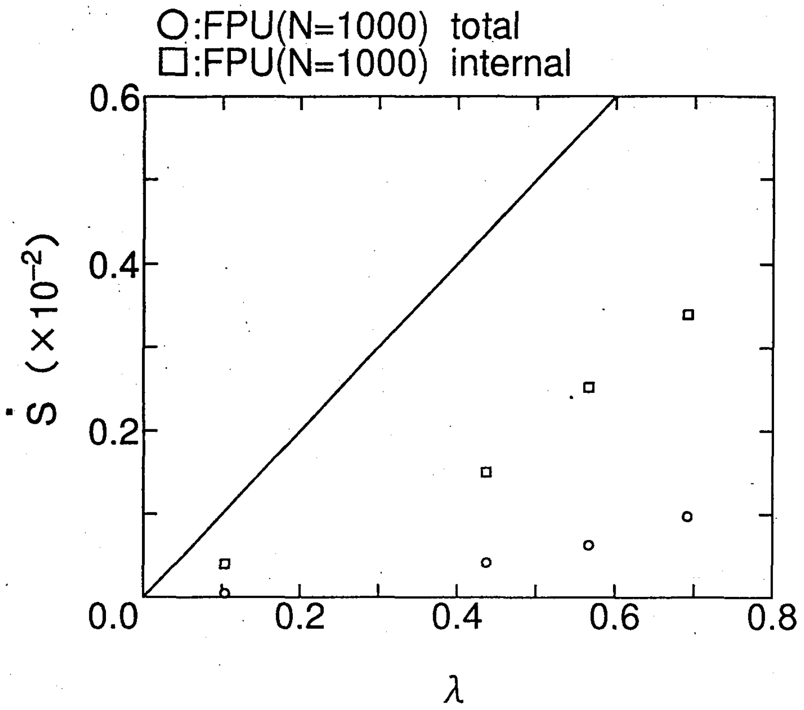

Fig.9 エントロピー生成率と λ の関係（粒子数 $N=1000$ の FPU 格子）

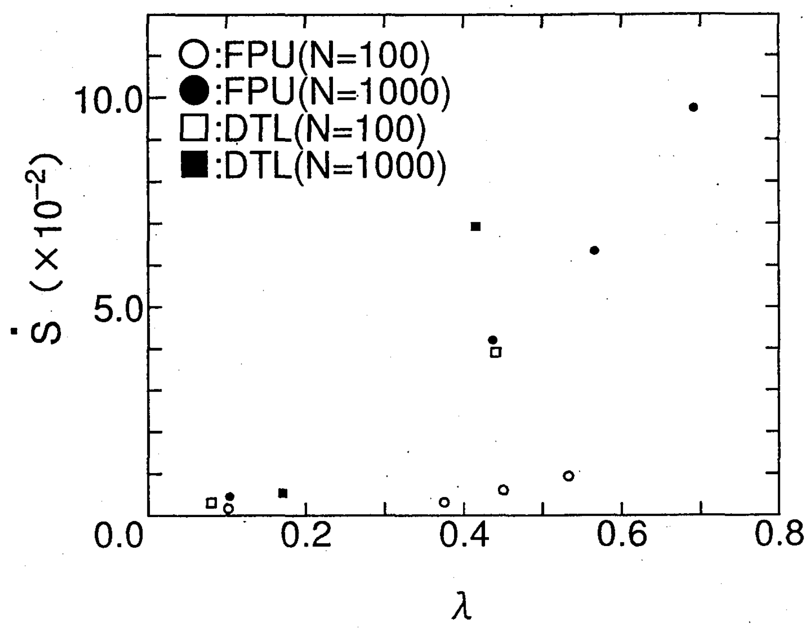

Fig.10 エントロピー生成率と λ の関係（FPU 格子と Diatomic Toda 格子の比較）