

有限体系能量耗散运动的功率谱分析*

袁常青 赵同军† 王永宏 展 永

(河北工业大学理学院, 天津 300130)

(2005 年 2 月 6 日收到 2005 年 7 月 6 日收到修改稿)

研究了有限的多自由度耦合哈密顿系统能量耗散过程的动力学问题. 通过数值模拟, 实现有关自由度的能量耗散过程, 采用功率谱方法研究有关系统运动中的坐标 $q(t)$ 或动量 $p(t)$ 的演化过程. 结果发现: 在有关系统的能量耗散过程中, 有关自由度运动的频率成分向高频和低频方向都有明显展宽, 随着无关系统自由度增多, 展宽明显增加; 低频成分比较稳定, 高频成分随着时间的演变逐渐减少.

关键词: 有限系统, 能量耗散, 有关自由度, 功率谱

PACC: 0560, 0547, 0545

1. 引 言

有限多自由度体系能量耗散过程中不同自由度的动力学行为是统计物理学中的基本问题^[1], 也是当代科学很多领域(如核物理、生物物理等)的重要问题^[2-4], 讨论有限系统中能量耗散过程的动力学特性具有深远的意义. 已有的理论工作指出, 从微观动力学角度通过耦合主方程理论能够推导出输运方程来描述能量耗散过程^[5-10], 为进一步研究多自由度耦合体系的动力学问题提供了理论依据. 但在以往的相关研究中, 整个微观系统被分成“有关”和“无关”的两个子系统, 采用 Langevin 方程或 Fokker-Planck 方程对有限系统进行描述, 无关子系统往往被假设成有无限个自由度、具有遍历性的热浴或和时间有关的正则系综^[11, 12]. 若整个体系的自由度是有限的, 则不能简单地将无关子系统看作热浴.

在最新关于非线性多自由度耦合系统的理论研究中, 通过自洽集体坐标方法^[8]将多自由度体系最优化地划分成两个子系统, 取一个自由度作为集体(有关)自由度, 其余都看作内禀(无关)自由度, 对有关自由度的动力学特征进行了分析. 结果发现有关自由度的能量耗散运动经历了三个过程: 解相过程、非平衡弛豫过程和饱和过程, 同时发现能量耗散过程的非平衡弛豫是反常扩散^[6, 7]. 数值模拟可以给出耗散过程中各子系统哈密顿量随时间的变化曲线,

而从坐标或动量入手来研究耗散系统动力学问题更加简便. 本文的工作主要是对能量耗散过程中有关自由度运动的动力学变量 $q(t)$, $p(t)$ 构建功率谱, 以获得有助于深入理解能量耗散过程动力学特性的信息. 由于问题的复杂性, 这里只讨论与有关系统运动相关的功率谱.

2. 理论模型与数值模拟

在有限的哈密顿系统中, 引入正则坐标系, 借助自洽集体坐标方法把一个轨道分成集体自由度和内禀自由度, 系统被分成有关和无关两个子系统. 整个体系的哈密顿量可表示为

$$H = H_\eta + H_\xi + H_{\text{cou}}. \quad (1)$$

系统 $\eta \oplus \xi$ 被分成两个子空间 η 和 ξ , 这两个子空间中的正则坐标各自为 $\eta_a, \eta_a^* : a = 1, \dots$ 和 $\xi_a, \xi_a^* : a = 1, \dots$. 其中 H_η 只与 η 空间坐标有关, H_ξ 只与 ξ 空间坐标有关, 而 H_{cou} 与 η 和 ξ 两个子空间的坐标都有关. 这些坐标随时间的变化满足正则方程. 通过集体自洽坐标方法定义的正则坐标系消除了有关系统与无关系统之间的线性耦合^[5].

从分布函数 $\rho(\alpha, t)$ 的 Liouville 方程出发,

$$\dot{\rho}(\alpha, t) = -iL\rho(\alpha, t),$$
$$LA \equiv i\{H, A\} = i\left(\frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial A}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial A}{\partial q}\right), \quad (2a)$$

$$\rho(\alpha, t) \equiv \rho(\eta(t), \eta^*(t), \xi(t), \xi^*(t)). \quad (2b)$$

* 国家自然科学基金(批准号: 10375016, 10474018)和河北省自然科学基金(批准号: A200400005)资助的课题.

† E-mail: zhaotj66@eyou.com

引入一对约化的分布函数,

$$\begin{aligned} \rho_\eta(t) &\equiv \text{Tr}_\xi \rho(t), \\ \rho_\xi(t) &\equiv \text{Tr}_\eta \rho(t), \end{aligned} \quad (3a)$$

$$\text{Tr}_\eta \equiv \prod_a \int d\eta_a d\eta_a^*, \quad (3b)$$

$$\text{Tr}_\xi \equiv \prod_\alpha \int d\xi_\alpha d\xi_\alpha^*,$$

这里 $\rho_\eta(t)$, $\rho_\xi(t)$ 和 $\rho(t)$ 满足下述关系:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \rho(t) &= 1, \\ \text{Tr}_\eta \rho_\eta(t) &= 1, \\ \text{Tr}_\xi \rho_\xi(t) &= 1. \end{aligned} \quad (4)$$

算符 Tr 定义为

$$\text{Tr} \equiv \text{Tr}_\eta \text{Tr}_\xi = \text{Tr}_\xi \text{Tr}_\eta. \quad (5)$$

通过 (3a) 式给出的两个分布函数 (1) 式中的哈密顿量可以分解成以下形式:

$$\begin{aligned} H &= H_\eta + H_\xi + H_{\text{cou}} \\ &= H_\eta + H_\eta(t) + H_\xi + H_\xi(t) \\ &\quad + H_\Delta(t) - E_0(t), \\ H_\eta(t) &\equiv \text{Tr}_\xi H_{\text{cou}} \rho_\xi(t), \\ H_\xi(t) &\equiv \text{Tr}_\eta H_{\text{cou}} \rho_\eta(t), \\ E_0(t) &\equiv \text{Tr} H_{\text{cou}} \rho(t), \\ H_{\text{aver}}(t) &= H_\eta(t) + H_\xi(t), \\ H_\Delta(t) &\equiv H_{\text{cou}} - H_{\text{aver}}(t) + E_0(t). \end{aligned} \quad (6)$$

对应的 Liouville 算符可以表示为

$$\begin{aligned} L &= L_\eta + L_\xi + L_{\text{cou}}, \\ L_{\text{cou}} &= L_\eta(t) + L_\xi(t) + L_\Delta(t) - L_0(t), \\ L_\eta A &\equiv i\{H_\eta, A\}, \\ L_\eta(t) A &\equiv i\{H_\eta(t), A\}, \\ L_\xi A &\equiv i\{H_\xi, A\}, \\ L_\xi(t) A &\equiv i\{H_\xi(t), A\}, \\ L_{\text{cou}} A &\equiv i\{H_{\text{cou}}, A\}, \\ L_\Delta(t) A &\equiv i\{H_\Delta(t), A\}, \\ L_0(t) A &\equiv i\{E_0(t), A\} = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

借助一个与时间有关的投影算符^[5,8,9]

$$P(t) = \rho_\eta(t) \text{Tr}_\eta + \rho_\xi(t) \text{Tr}_\xi - \rho_\eta(t) \rho_\xi(t) \text{Tr}_\eta \text{Tr}_\xi, \quad (8)$$

可以把分布函数 $\rho(t)$ 分解成可分离部分和关联部分,

$$\begin{aligned} \rho_s(t) &\equiv P(t) \rho(t) = \rho_\eta(t) \rho_\xi(t), \\ \rho_c(t) &\equiv [1 - P(t)] \rho(t), \\ \rho(t) &= \rho_s(t) + \rho_c(t). \end{aligned} \quad (9)$$

从 (2) 式可以得到,

$$\dot{\rho}_s(t) = -iP(t)L\rho_s(t) - iP(t)L\rho_c(t), \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_c(t) &= -[1 - P(t)]L\rho_s(t) \\ &\quad - [1 - P(t)]L\rho_c(t). \end{aligned} \quad (11)$$

通过引入一个演化算符

$$g(t, t') = T \exp \left\{ -i \int_{t'}^t d\tau [1 - P(\tau)] L \right\}, \quad (12)$$

可以得到关于 $\rho_s(t)$ 的主方程,

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_s(t) &= -iP(t)L\rho_s(t) - iP(t)Lg(t, t_1)\rho_c(t_1) \\ &\quad - i \int_{t_1}^t dt' P(t)Lg(t, t') [1 - P(t')] L\rho_s(t'), \end{aligned} \quad (13)$$

这里 T 表示一个时序算符, t_1 表示初始时刻. 容易证明 (13) 式时间积分中的 Liouville 算符 L 可以替换成 L_{cou} . 把 $\rho_s(t)$, $P(t)$ 用 $\rho_\eta(t)$, $\rho_\xi(t)$ 来表示, 将算符 Tr_η 和 Tr_ξ 分别作用到 (13) 式两边, 从而得到耦合主方程

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_\eta(t) &= -[L_\eta + L_\eta(t)]\rho_\eta(t) \\ &\quad - i\text{Tr}_\xi [L_\eta + L_{\text{cou}}] g(t, t_1)\rho_c(t_1) \\ &\quad - \int_{t_1}^t d\tau \text{Tr}_\xi L_\Delta(t) g(t, \tau) L_\Delta(\tau) \rho_\eta(\tau) \rho_\xi(\tau), \end{aligned} \quad (14a)$$

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_\xi(t) &= -[L_\xi + L_\xi(t)]\rho_\xi(t) \\ &\quad - i\text{Tr}_\eta [L_\xi + L_{\text{cou}}] g(t, t_1)\rho_c(t_1) \\ &\quad - \int_{t_1}^t d\tau \text{Tr}_\eta L_\Delta(t) g(t, \tau) L_\Delta(\tau) \rho_\eta(\tau) \rho_\xi(\tau). \end{aligned} \quad (14b)$$

(14) 式所给出的耦合主方程与 (2a) 式是完全等价的, 而且可以作为导出输运方程并解释其基本假设的一般性理论框架^[6]. 但是 (14) 式的具体形式十分复杂, 难以得到解析解, 为了研究有限多自由度耦合体系的运动, 需要用计算机来模拟^[6,7] 一个能量耗散过程.

在数值模拟中, 有关系统采用一维谐振子,

$$H_\eta(q, p) = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega^2 q^2, \quad (15)$$

式中 q 表示坐标, p 表示动量, M 表示谐振子质量, ω 为圆频率.

对无关系系统的模拟采用 β -Fermi-Pasta-Ulam (β -FPU) 模型,

$$H_\xi = \sum_{i=1}^{N_d} \frac{p_i^2}{2M} + \sum_{i=2}^{N_d} W(q_i - q_{i-1}) + W(q_{N_d}) \quad (16a)$$

$$W(q) = \frac{q^4}{4} + \frac{q^2}{2}, \quad (16b)$$

其中

$$q = \frac{1}{\sqrt{2}}(\eta + \eta^*), \quad (17a)$$

$$p = \frac{1}{\sqrt{2}}(\eta^* - \eta),$$

$$q_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi_i + \xi_i^*), \quad (17b)$$

$$p_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi_i^* - \xi_i),$$

N_d 代表无关系统自由度数.

关于两子系统之间的耦合作用, 选取下列非线性形式:

$$H_{\text{cou}} = \lambda(q^2 q_1^2 - q_0^2 q_{1,0}^2). \quad (18)$$

这里 q_0 和 $q_{1,0}$ 表示一个轨道在相互作用开启时刻集体自由度的坐标和某个内禀自由度的坐标; q_1 是 β -FPU 系统中第一个振子的坐标, 它在数值模拟中担任门变量的作用, 将无系统的影响传递给有关系统; λ 表示耦合强度.

分布函数 $\rho(t)$ 由伪粒子方法给出,

$$\rho(t) = \frac{1}{N_p} \sum_{n=1}^{N_p} \delta(q - q_n(t)) \delta(p - p_n(t))$$

$$\times \prod_{i=1}^{N_d} \delta(q_i - q_{i,n}(t)) \delta(p_i - p_{i,n}(t)), \quad (19)$$

式中 N_p 代表伪粒子总数, 即总的轨道数目. (19) 式定义了一个系综, 每个组成系统都由集体自由度与一个内禀轨道相耦合. 集体变量 $q_n(t)$ 和 $p_n(t)$ 以及内禀变量 $q_{i,n}(t)$ 和 $p_{i,n}(t)$ ($i=1, \dots, N_d$) 确定了 t 时刻第 n 个粒子的相空间代表点, 这些变量随时间的变化满足正则方程.

各部分哈密顿量和总哈密顿量定义为

$$H = \int H \rho(t) dq dp \prod_{i=1}^{N_d} dq_i dp_i. \quad (20)$$

数值模拟中, 参数选取如下: $M=1$, $\omega=0.25$, $\lambda=0.0015$, $N_p=3000$, $\tau_{\text{sw}}=100\tau_{\text{col}}$ (τ_{sw} 为开启耦合作用的时间, τ_{col} 表示有关系统的特征时间), 有关自由度能量 $E_\eta=30$, 每个无关自由度的能量 $\epsilon=10$, 以满足文献 [1] 中指出的三个微观条件. 图 1 给出了 H_η , H_ξ , H_{cou} 和总的哈密顿量 H 的统计平均值随时间 t 的变化情况.

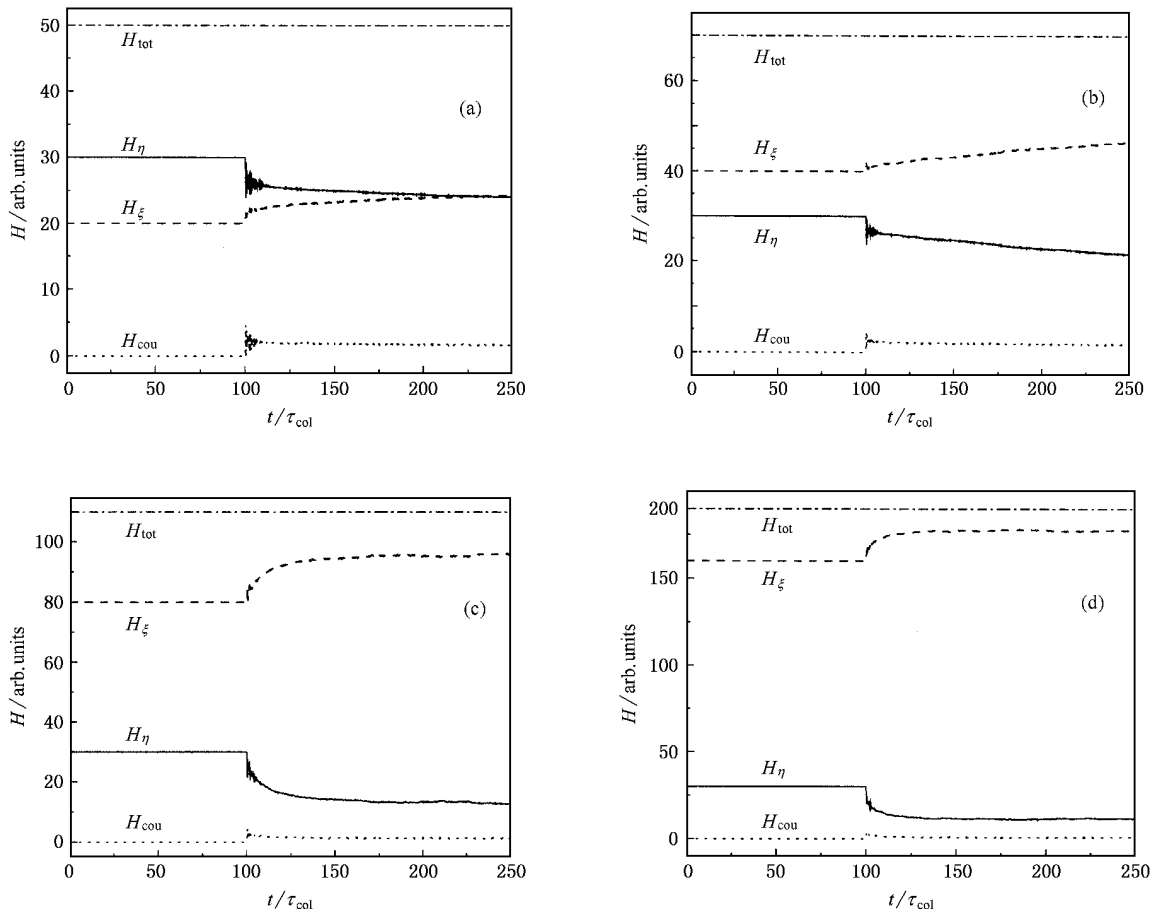


图 1 各部分哈密顿量和总哈密顿量 (a) $N_d=2$ (b) $N_d=4$ (c) $N_d=8$ (d) $N_d=16$

有限系统中的能量输运过程可以分为三个过程,即解相过程、非平衡弛豫过程和饱和过程^[6,7].有关自由度的运动在解相过程中能量变化非常剧烈,子系统之间能量输运达到平稳以后有关自由度运动的变化不再剧烈.从图 1 可以看出当无关自由度数比较大时,比如 $N_d = 8$ 或 16 时,整个系统最终满足能均分定理,所以以上给出的关于有关自由度能量耗散过程的数值模拟是合理的,可以继续讨论能量耗散过程中的动力学问题.

通过分析 $q(t)$ 和 $p(t)$ 的功率谱,能够从动力学角度得到关于能量耗散过程的信息.在统计物理学中,根据 Wiener-Khinchine 定理,与时间有关的变量 $x(t)$ 的谱密度定义为

$$S(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega\tau} x(t_0)x(t_0 + \tau) d\tau, \quad (21)$$

$x(t)$ 的关联函数定义为

$$\begin{aligned} C(\tau) &= x(t)x(t + \tau) \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T x(t)x(t + \tau) dt. \quad (22) \end{aligned}$$

(21) 式中的 t_0 表示起始时刻.作为初步研究,这里只讨论有关自由度的运动受到环境影响之后的变化.

3. 功率谱分析

利用傅里叶变换可以分别得出 $q(t)$ 和 $p(t)$ 的谱密度.如果 N_d 给定,则无论对于有关自由度还是无关自由度,讨论 $q(t)$ 的谱密度分布和讨论 $p(t)$ 的谱密度分布是等价的,即 $q(t)$ 的功率谱若在某个频率 ω 处出现峰值,则在 $p(t)$ 的功率谱中也会相应地在 ω 处出现峰值,以下给出的都是关于 $p(t)$ 的功率谱.

图 2 给出当 (21) 式中 $t_0 = \tau_{sw}$ 时有关自由度动量 $p(t)$ 的功率谱随环境自由度数增加的变化情况.

表 1 列出了图 2 所示功率谱的频率特征细节, $\Delta\omega$ 表示有明显峰值出现的频率范围, ω_c 表示最强峰值对应的频率, τ_0 表示 $t_0 = 100\tau_{col}$ 时 $p(t)$ 的关联

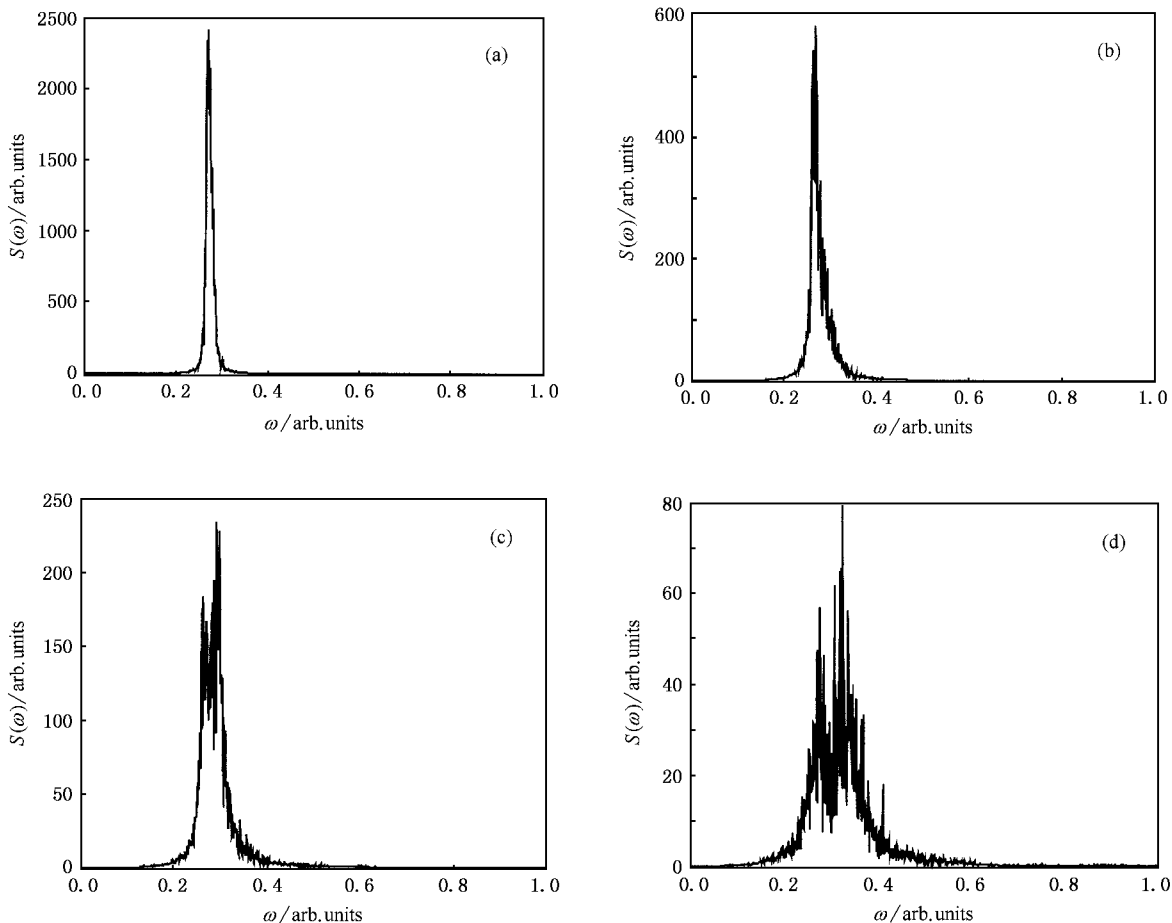
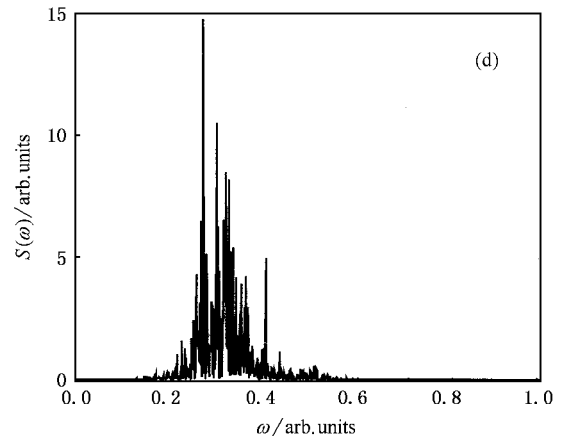
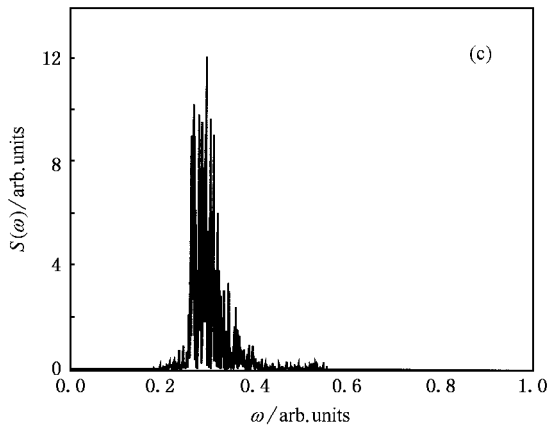
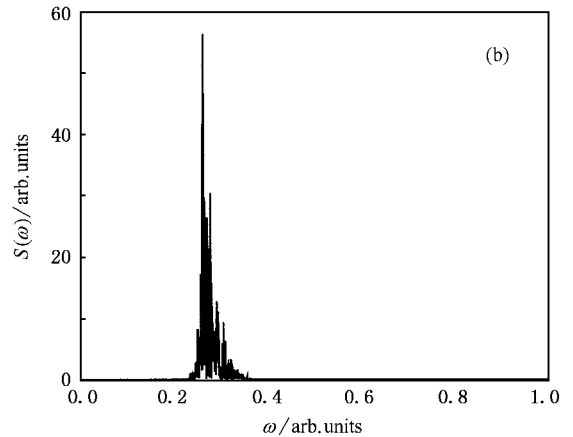
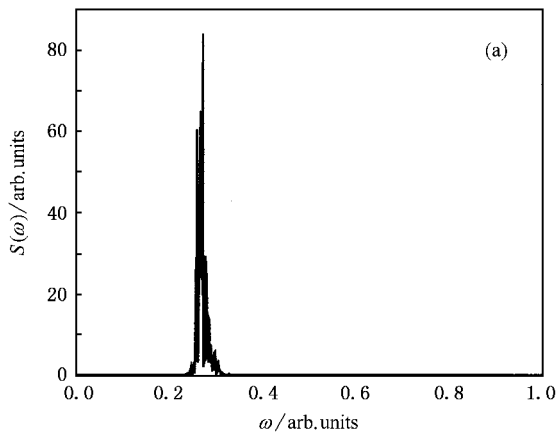


图 2 $t_0 = 100\tau_{col}$ 时有关自由度动量 $p(t)$ 的功率谱 (a) $N_d = 2$ (b) $N_d = 4$ (c) $N_d = 8$ (d) $N_d = 16$

表 1 $t_0 = 100\tau_{\text{col}}$ 时有关自由度动量 $p(t)$ 的功率谱频率特征

N_d	$\Delta\omega$	ω_c	τ_0
2	0.25—0.33	0.27	5.7
4	0.19—0.42	0.28	5.5
8	0.17—0.63	0.30	5.3
16	0.11—1.20	0.32	4.8

时间. 从图 2 中可以看出, 随着 N_d 增大, $p(t)$ 功率谱上出现峰值的频率范围明显展宽, 最强峰值向高频方向移动, $p(t)$ 的关联时间减小. 随着 N_d 的变化, 有关系统的运动都不同程度地趋向于混沌. 由于在谱密度的计算中 t_0 取为 $100\tau_{\text{col}}$, 所以图 2 给出的功

图 3 $t_0 = 120\tau_{\text{col}}$ 时有关自由度动量 $p(t)$ 的功率谱 (a) $N_d = 2$ (b) $N_d = 4$ (c) $N_d = 8$ (d) $N_d = 16$ 表 2 $t_0 = 120\tau_{\text{col}}$ 时有关自由度动量 $p(t)$ 的功率谱频率特征

N_d	$\Delta\omega$	ω_c	τ_0
2	0.25—0.32	0.27	5.7
4	0.22—0.38	0.28	5.5
8	0.19—0.55	0.30	5.3
16	0.15—0.82	0.32	4.6

率谱主要体现解相过程中有关系统运动的频率特征.

当 $t_0 = 120\tau_{\text{col}}$ 时, 对应有关系统运动的非平衡弛豫过程如图 3 所示, 有关自由度动量 $p(t)$ 的功率谱与图 2 的结果相比, 分布峰值的频率范围向高频方向的展宽明显减弱 (N_d 越大展宽就越明显), 最强峰值对应的频率没有明显变化, 但是峰值明显减弱, $p(t)$ 的关联时间进一步减小 (见表 2), 有关系统的运动达到混沌. 随时间的推迟, $p(t)$ 功率谱中高频成分减弱 (N_d 越大减弱就越明显), 但是低频成分没有明显变化, 说明 $p(t)$ 长期变化的规律相对稳定,

这是因为解相过程相对于非平衡弛豫和饱和过程是很短暂的.

当 $t_0 = 200\tau_{\text{col}}$ 时, 对应有关系统运动的饱和过程如图 4 所示, 有关自由度动量 $p(t)$ 的功率谱频率特征与图 3 相比没有明显变化, 而 $p(t)$ 的关联时间进一步减小 (见表 3).

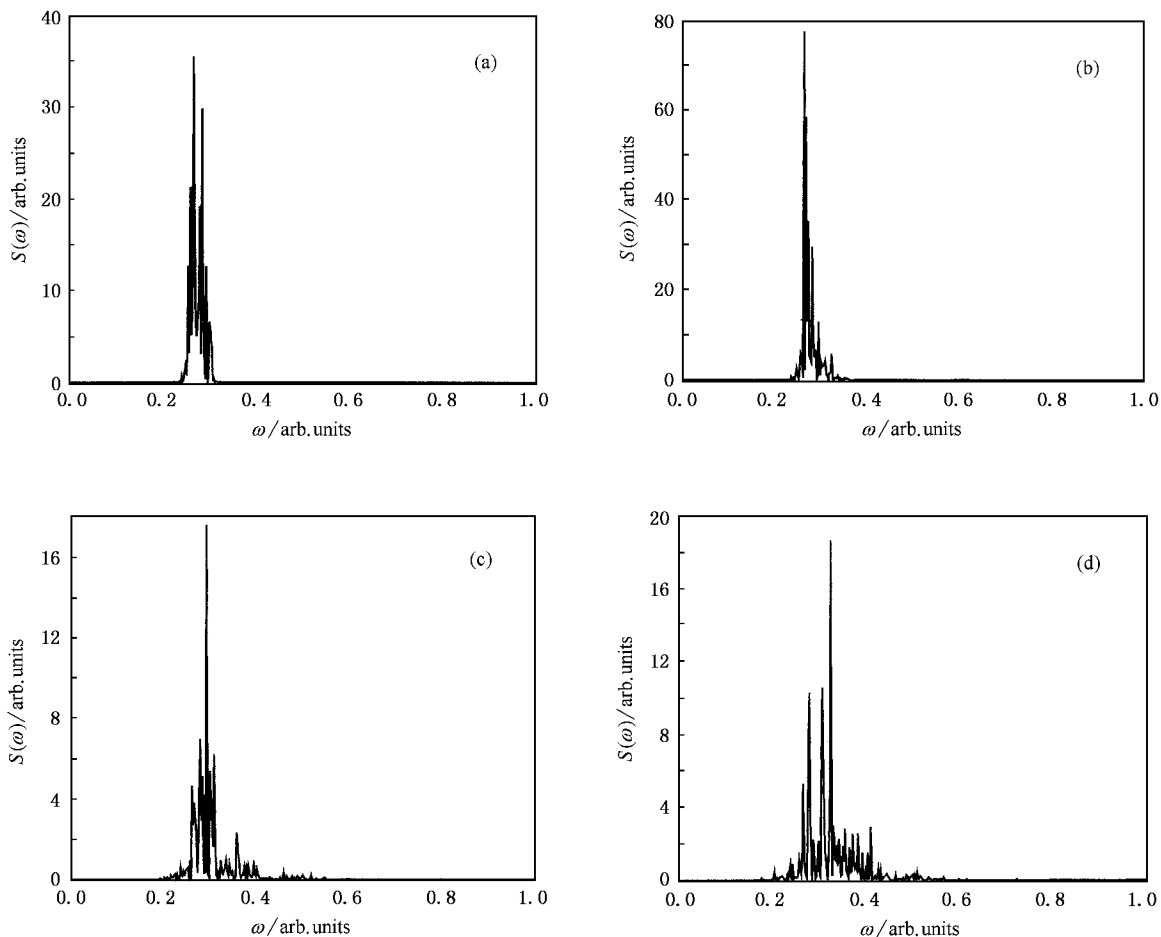


图 4 $t_0 = 200\tau_{\text{col}}$ 时有关自由度动量 $p(t)$ 的功率谱 (a) $N_d = 2$ (b) $N_d = 4$ (c) $N_d = 8$ (d) $N_d = 16$

表 3 $t_0 = 200\tau_{\text{col}}$ 时有关自由度动量 $p(t)$ 的功率谱频率特征

N_d	$\Delta\omega$	ω_c	τ_0
2	0.25—0.32	0.27	5.6
4	0.22—0.36	0.28	5.2
8	0.19—0.55	0.30	5.0
16	0.17—0.72	0.32	4.6

4. 结 论

本文讨论了多自由度耦合体系中有关自由度的动力学行为,结果发现有关自由度的运动在环境影响下,谱密度分布向高频方向移动,频率分布范围明显展宽,有关自由度的运动也达到混沌状态。从有

关自由度的动量 $p(t)$ 的频率成分随时间的变化看,在各无关自由度的影响下,有关系统运动的频率成分向低频和低频方向都有展宽,解相过程出现明显高频成分,在随时间的演变过程中高频成分明显减弱,整个过程中低频成分无明显变化,即长期的变化规律相对稳定。环境自由度越多,则在解相过程中有关自由度的动量 $p(t)$ 频率分布的展宽越大,最强峰值对应的频率值向高频方向的移动就越明显,在非平衡弛豫过程中,高频成分的减少也就越明显,这主要是因为环境自由度越多对有关系统的运动影响就越大。

感谢中国原子能科学研究院卓益忠研究员、北京师范大学晏世伟教授和包景东教授的有益讨论。

[1] Yan S W, Sakata F, Zhuo Y Z et al 2001 Phys. Rev. E 63 021116

[2] Tan W, Wang Y N 2004 Chin. Phys. 13 459

- [3] Shi X , Lu Q S 2005 *Chin. Phys.* **14** 77
- [4] Zou Y , Zhu J , Chen G R 2005 *Chin. Phys.* **14** 697
- [5] Sakata F , Matsuo M , Marumori T *et al* 1989 *Ann. Phys. (NY)* **194** 30
- [6] Yan S W , Sakata F , Zhuo Y Z 2002 *Phys. Rev. E* **65** 031111
- [7] Yan S W , Sakata F , Zhuo Y Z 2003 *Phys. Lett. A* **319** 60
- [8] Marumori T , Maskawa T , Sakata F *et al* 1980 *Prog. Theor. Phys.* **64** 1294
- [9] Willis C R , Picard R H 1974 *Phys. Rev. A* **9** 1343
- [10] Zhuo Y Z , Wu X Z 1979 *High Ener. Phys. Nucl. Phys.* **3** 501
(in Chinese)[卓益忠、吴锡真 1979 高能物理与核物理 **3** 501]
- [11] Dang G D , Klein A , Reinhard P G 1999 *Phys. Rev. C* **59** 2065
- [12] Bianucci M , Mannella R , West B J *et al* 1995 *Phys. Rev. E* **51** 3002
- [13] Casetti L , Pettini M , Cohen E G D 2000 *Phys. Rep.* **337** 237

Spectrum analysis on dissipative motion in finite systems^{*}

Yuan Chang-Qing Zhao Tong-Jun Wang Yong-Hong Zhan Yong

(*School of Science , Hebei University of Technology , Tianjin 300130 , China*)

(Received 6 February 2005 ; revised manuscript received 6 July 2005)

Abstract

Dynamical problems about energy dissipation in a finite multi-degree of freedom Hamiltonian system are studied. The energy dissipation in the relevant system is realized by numerical simulation. By employing power spectrum analysis on $q(t)$ or $p(t)$ of the motion in the relevant system, it is found that during the dissipative process, distribution of the power spectral density about the motion extends to both lower and higher frequencies. The more irrelevant degrees of freedom are, the broader the distribution extends. Higher frequencies decrease as time evolves but there are no remarkable changes for lower frequency components.

Keywords : finite system , energy dissipation , relevant degree of freedom , power spectrum

PACC : 0560 , 0547 , 0545

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10375016 , 10474018) and the Natural Science Foundation of Hebei Province , China (Grant No. A200400005).