

少体硬球系统的动力学与统计研究^{*}

付文玉 侯锡苗 贺丽霞 郑志刚[†]

(北京师范大学物理系, 北京 100875)

(2004 年 8 月 18 日收到, 2004 年 11 月 8 日收到修改稿)

研究了少数几个封闭于箱子中的硬球组成的系统的动力学与统计行为. 着重研究单粒子位形空间的碰撞分布. 计算表明, 硬球的半径较小时, 单粒子统计分布函数在空间主要是均匀分布. 随着半径的增大, 均匀分布部分逐渐减小. 当硬球半径与箱子尺寸比值超过临界值时, 单粒子分布函数呈现双峰形式. 还利用少体硬球系统模拟布朗运动. 研究表明, 当硬球系统作为介质时, 系统不存在扩散过程. 发现大粒子的平均平方位移与时间是平方关系, 说明大粒子在硬球介质中的输运是弹道输运过程.

关键词: 硬球, 动力学, 布朗运动, 遍历

PACC: 0500

1. 引 言

统计力学的研究对象——热力学系统的一个根本特点就是热力学过程的不可逆性^[1]. 不可逆性在热力学上由第二定律给出, 而其微观动力学根源迄今为止一直是统计力学中一个古老而重要的问题. 在牛顿力学的框架下, 系统的几率分布演化由刘维定理给出了可逆的描述. Boltzmann 推导出稀薄气体单体约化概率分布的演化方程, 并推导出 H 定理, 使我们从统计层面上看到了不可逆性. 为了从动力学上解释这个定理, Boltzmann 提出了遍历性假说^[2]. 遍历性理论架起了从动力学向统计过渡的桥梁. 二十世纪非线性动力学和混沌的研究使人们对动力学系统的统计特征有了深一步的理解, 在此期间遍历性、混合性、K 流等不同概念提了出来^[3]. 研究表明, 动力学系统的全局性混沌是系统统计成立的根本要素. 在此意义上, 系统的无限大自由度已不是决定性的因素. 人们已建立了少自由度系统的统计力学及热力学^[4]. 遍历性理论也不仅仅是数学家们的研究对象, 它也为物理学家理解热力学系统中的许多问题(如相变, 玻璃态等)提供了新的启示^[5, 6].

另一方面, 热力学体系非平衡性质与微观动力学特征之间的关系研究近年来成为新的热点. 一方面, 人们探讨了热力学系统的输运系数的规律以及它们与非线性动力学指数(如李雅普诺夫指数, KS 熵, 分维等)之间的关系, 并已经取得了丰富的成果^[6]. 另一方面, 对非平衡问题的研究, 如小体积的非平衡过程如热传导、扩散、自由膨胀、绝热压缩等, 这些研究中很多问题尚不清楚, 特别是系统遍历性在其中的作用, 少体系统的热力学定律成立与表现等问题. 这些研究有助于从微观动力学上理解宏观非平衡过程的起源, 值得引起注意.

动力学与统计的关系问题研究中一个非常经典且有效的模型是硬球系统^[7, 8]. 本文将研究几个封闭于箱子中的硬球组成的系统的动力学与统计行为. 我们首先研究单粒子位形空间的碰撞分布. 研究表明, 碰撞分布可以分为几个区域. 当硬球的半径较小时, 单粒子统计分布函数在空间主要是均匀分布. 随着半径的增大, 均匀分布部分逐渐减小. 当硬球半径与箱子尺寸比值超过临界值时, 单粒子分布函数呈现双峰形式. 其次, 我们用少体硬球系统模拟了大粒子在小硬球体系当中的运动. 我们计算发现硬球系统不存在扩散过程(不是布朗运动), 大粒子平均平

^{*} 国家重点基础研究规划(973)项目(批准号: G2000077304), 全国优秀博士论文作者专项基金(批准号: 200120), 教育部青年教师奖专项基金项目(批准号: 209), 高校博士点基金(批准号: 20020027011), 霍英东教育基金会(批准号: 81006), 北师大本科生研究基金资助的课题.

[†] E-mail: zgzheng@bnu.edu.cn.

方位移与时间是平方关系,说明大球在小球碰撞下是典型的弹道输运过程.

2. 硬球模型

硬球系统由局限在一个长度为 L 的箱子中的 N 个相互弹性碰撞、半径为 R 的硬球组成,如图 1 所示.系统的哈密顿可以写为

$$H = \sum_{i=1}^N m_i v_i^2 / 2, \quad (1)$$

这里 m_i 代表第 i 个硬球的质量, v_i 为其速度.我们假定硬球之间、硬球与器壁之间的碰撞都是完全弹性的.所以对球-壁碰撞,我们有 $v_i^\alpha \rightarrow -v_i^\alpha$, 其中 α 代表垂直于器壁的方向.对球-球碰撞,碰撞前后的总动能和总动量守恒. i, j 球碰撞后的速度为

$$\begin{aligned} v_i &\rightarrow v_i + \frac{M_{ij}}{m_i} (v_j - v_i) \cdot \hat{r}, \\ v_j &\rightarrow v_j + \frac{M_{ij}}{m_j} (v_i - v_j) \cdot \hat{r}, \end{aligned} \quad (2)$$

其中 $M_{ij} = 2m_i m_j / (m_i + m_j)$ 为约化质量, $\hat{r} = r / |r|$ 为单位矢量, 这里 $r = r_j - r_i$ 为两个硬球质心间的方向矢量.硬球系统看起来很简单,动力学上却是非常复杂的.研究已经表明,在二维和三维空间中运动的硬球系统只要 $N \geq 2$ 就是遍历的 K 系统,并满足全局混沌^[9].在此基础上我们可以建立少体系统的统计力学和热力学.我们曾详细研究了硬球系统的速度、空间位置平衡态的统计分布,并用少体的玻尔兹曼熵研究了向由非平衡态平衡态的演化^[9].我们还研究了少体硬球的热力学第二定律^[10].最近几年,硬球系统还被用来研究热传导问题^[11].下面我们空间三维硬球系统为例进行讨论.

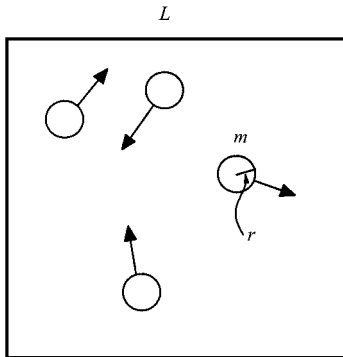


图 1 硬球模型示意图

3. 空间碰撞分布

硬球系统动力学研究中最重要就是碰撞过程.我们关注硬球碰撞时的空间位置分布.以 x 分量为例,我们研究其中一个硬球的空间碰撞位置分布 $P_c(x)$.以前我们研究过硬球的空间位置分布,并且对于 $N = 2$ 的情形可以给出相应的解析表达式^[9].对碰撞分布,碰撞时的两球的质心位置需满足条件 $|r| = 2R$, 因此一球的分布要取决于与其碰撞的另一球的位置.另外,在器壁附近,球的位置分布也必然与器壁有关系.这样解析的求解是较为困难的,但不难数值上进行统计.实际上,虽然我们无法解析求解,但基本上可以把单粒子碰撞位置分布分成以下几个区域:

(1) 自由区:此区中一球的位置分布并不明显依赖于另外与其碰撞的球,故分布为均匀的, $P_c(x) = P_0$.这个区通常在容器中央区域,且当球比容器尺寸小很多时存在;

(2) 禁飞区:在非常靠近器壁的地方,当一个球在的时候,另外一个球就不能从靠近器壁的区域通过,此时的分布为 $P_c(x) = 0$;

(3) 关联区:在离开器壁相对较远但两个球仍然相互影响很大的区域,分布可能为较复杂的形式.

图 2 给出了当 $N = 2, L = 10, m_1 = m_2$ 情况下不同半径硬球系统的空间碰撞分布.我们假定容器的区域为 $(x, y, z) \in ([0, L] [0, L] [0, L])$.可以清楚看到上面所提到的三个区域.禁飞区满足 $x \in [0, R]$ 或 $[L - R, L]$.自由区位于 $x \in [3R, L - 3R]$. R 越小,自由区越大,这从图 2(a)~(d)可以清楚观察到.当 $3R \geq L - 3R$ 即 $R \geq R_c = L/6$ 时,自由区将消失.对于我们的参数, $R_c = 5/3 \approx 1.666\dots$.在位于 $[R, 3R]$ 及其 $[L - 3R, L - R]$ 的区域,分布为直线,为关联区.在 $x = R$ 或 $L - R$ 处,分布不连续;随着靠近中央区域,分布概率线性增加,说明碰撞发生于中部的机会更大.这是比较容易理解的.当自由区消失后,从图 2(f)可看出,在中央区域出现了一个低谷,在此处的碰撞机会相对较小,分布出现双峰结构.这是因为,硬球很大时,球基本上被局限于一个角落,很难越过去,所以此时中央区域反而发生碰撞的机会较小.

下面我们看一下硬球质量不同对空间碰撞位置的影响.图 3 给出了不同质量比时的碰撞分布,左边

是质量大的球,右边是质量小的球.当球的半径较小时,如图 3(a),(b),可以看到质量比的大小对分布没有明显的影响.而当球的半径较大时,大的质量比对大球的碰撞位置分布就较大,而对小球分布基本

上没有影响.这是因为小球碰撞后会具有很大的运动速度,因而在一段时间内可以很快达到遍历分布;而大球则每次与小球碰撞得到较小的速度改变,运动缓慢,因而分布远未达到遍历分布.

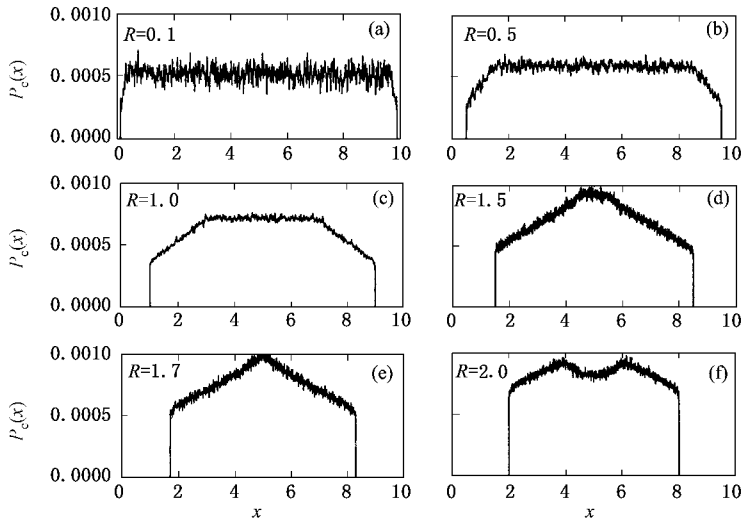


图 2 等质量硬球碰撞空间分布

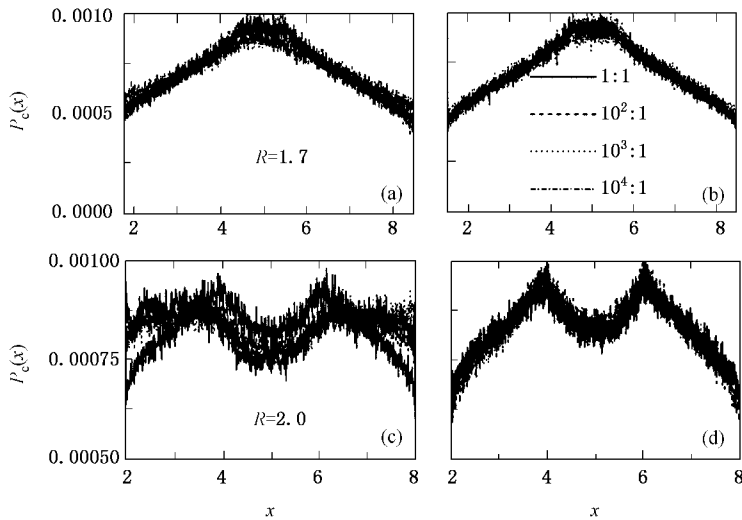


图 3 不同质量比下大球和小球的碰撞位置分布

4. 用少体硬球模拟布朗运动

布朗运动描述了大颗粒在液体中的无规则运动.液体分子对大颗粒物质的频繁碰撞产生随机力,使得大颗粒产生扩散性的运动.考虑一个质量为 m 的大颗粒在随机力下的运动:

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -m\gamma\dot{\mathbf{r}} + \xi(t), \quad (3)$$

这里 γ 为阻尼系数, $\xi(t)$ 为强度为 $k_B T$ 的白噪声.布朗运动的扩散系数 D 满足爱因斯坦关系: $D =$

$$k_B T / m\gamma.$$

这里我们用硬球来进行类似的模拟,研究系统的输运过程.我们关心用少量硬球能否模拟随机噪声的影响.设所有硬球具有同样的半径,但有一个硬球具有非常大的质量,其余小质量硬球产生对大球的频繁碰撞(这些小球扮演着液体分子的角色,提供随机力).为了方便,我们使用周期边界条件,即假定大球遇到容器边界就进入一个新的完全一样的容器,而在每个箱子中有数目固定且相同的小球,这样球的密度是固定的.为了考察扩散性,我们可以计算

大球的平均平方位移:

$$\Delta r^2(t) = r^2(t) - r^2(0) = 2Dt^\alpha, \quad (4)$$

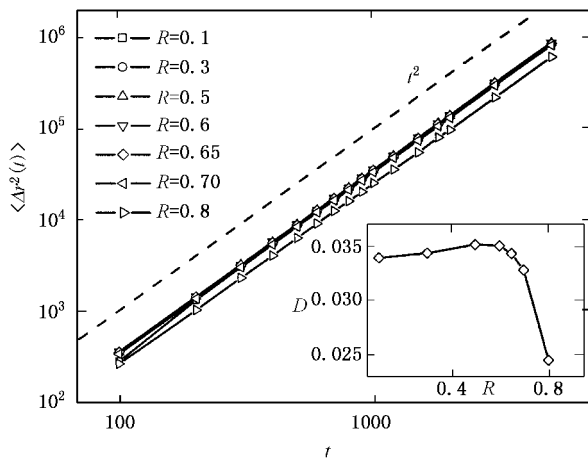


图4 大球平均平方位移随时间的变化;小图为 D 与球半径的关系

其中上面是系综平均,即对于大量随机初始条件进行平均。 $0 \leq \alpha \leq 2$ 是标度指数。当 $\alpha = 1$ 时,系统输运是扩散性的, D 为扩散系数;当 $\alpha = 2$ 时,系统输运是弹道性的, D 与弹道运动速度成正比。

在图4中,我们计算了大球与小球质量比为 100:1,容器长度 $L = 5$,每个容器有 3 个小球时大球的平均平方位移。可以看到, $\Delta r^2(t)$ 随时间的长时间变化并不是线性的。我们仔细研究发现,

$\Delta r^2(t)$ 随时间是平方的关系,即 $\alpha \approx 2$ 。这一结果说明,少体硬球系统不能很好模拟布朗运动,大球的输运过程不是扩散过程,而是弹道输运。图4的小图给出了系数 D 随球半径 R 的变化关系。可以看到,当球半径较小时,大球的弹道输运系数基本不变;当球半径变大时,系数 D 在 $R > 0.6$ 时迅速变小。大球在小球系统中的弹道输运说明,少体硬球系统虽然可以具有很强的混沌性,但还无法很好模拟完全随机的噪声。要实现扩散型的输运,我们还需要更多的硬球数目。

5. 小 结

本文研究封闭区域中的少体硬球组成的系统的动力学与统计行为。对单粒子位形空间碰撞分布的研究表明,碰撞分布可以分为几个区域,这些区域随硬球半径的增加而发生变化或消失。当硬球半径较小时,单粒子统计分布在位形空间大部分是均匀分布,随着硬球半径的增大,这些均匀分布部分逐渐减小。一直到硬球半径与箱子尺寸比值超过临界值时,单粒子分布函数会呈现双峰形式。还我们用少体硬球系统模拟了大粒子在小硬球体系当中的无规运动。计算发现,硬球系统不能很好模拟布朗运动,不存在扩散过程,大粒子的平均平方位移与时间呈现平方关系,说明大球在小球碰撞下是典型的弹道输运过程。

- [1] Reichl L E 1980 *A Modern Course in Statistical Physics* (Austin: Univ. Texas Press).
- [2] Krylov N S 1979 *Works on the Foundations of Statistical Physics* (Princeton, NJ: Princeton University Press)
- [3] Zaslavsky G M 1987 *Chaos in Dynamic Systems* (London: Harwood Academic Publishers)
- [4] Zheng Z G 2004 *Spatiotemporal Dynamics and Collective Behaviors in Coupled Nonlinear Systems* (Beijing: Higher Education Press) [郑志刚 2004 耦合非线性系统的时空动力学与合作行为(北京:高等教育出版社)]
- [5] Palmer P G 1982 *Adv. Phys.* **31** 669
- [6] Franzosi R and Pettini M 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 060601
Franzosi R, Pettini M and Spinelli L 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 2774
Casetti L, Cohen E G D and Pettini M 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 4160

- Caiani L, Casetti L, Clementi C and Pettini M 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 4361
- Casetti L, Clementi C and Pettini M 1996 *Phys. Rev. E* **54** 5969
- [7] Li H, Cao Z and Hu G 2003 *Phys. Rev. E* **67** 041102
- [8] Munakata T and Hu G 2002 *Phys. Rev. E* **65** 066104
- [9] Zheng Z, Hu G and Zhang J 1996 *Phys. Rev. E* **53** 3204
- [10] Hu G, Zheng Z, Yang L and Kang W 2001 *Phys. Rev. E* **64** 045102
- [11] Gendelman O V and Savin A V 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 074301
Dhar A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 5882
Dhar A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 3554
Savin A V, Tsironis G P and Zolotaryuk A V 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 154301



Dynamics and statistics in few-body hard-ball systems^{*}

Fu Wen-Yu Hou Xi-Miao He Li-Xia Zheng Zhi-Gang[†]
(*Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China*)
(Received 18 August 2004 ; revised manuscript received 8 November 2004)

Abstract

The dynamic and statistical properties of several hard balls restricted in a box are studied. The collision distribution in configuration space is main object of the research. Numerical simulations indicate that the distribution function is uniform (horizontal line) when the radius of balls is very small. This uniform part decreases with increasing size of the balls, and a double-peak distribution is found when the radius exceeds a critical value. Brownian motion is simulated by using hard-ball systems. It can be found that the mean square displacement is proportional to the square of time, i. e., the transport process is dominated by ballistic transport, rather than a diffusion behavior.

Keywords : hard balls, dynamics, Brownian motion, ergodicity

PACC : 0500

^{*} Project supported in part by the Special Foundation for State Major Basic Research Program of China (Grant No. G2000077304), the National Foundation for the Author of Excellent Doctoral Dissertation of China (Grant No. 200120), the TRAPOYT in Higher Education Institutions of MOE (Grant No. 209), the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20020027011), the Fok-Ying-Tong Education Funds for Excellent Young Teachers (Grant No. 81006), and the Fund for Undergraduate Students of BNU.

[†] Author of Correspondence. E-mail : zgzhen@bnu.edu.cn