

学 位 論 文

**Between Determinism and Stochasticity:
Chaos and Nonthermal Relaxation in
Classical Hamiltonian System with Many
Degrees of Freedom**

決定論と統計性のはざま：大自由度ハミルトン
系のカオスと非熱的緩和過程

Hironori J. Matsuyama
Nonlinear Physics Laboratory (R-lab.)
Department of Physics, School of Science,
Nagoya University

松山 裕典
名古屋大学 大学院理学研究科
物質理学専攻（物理系）非線形物理研究室（R研）

平成27年3月25日

概要

自由度の大きな孤立系を長時間放置すると、その初期状態にかかわらず熱平衡状態と呼ばれる巨視的に不変な終局状態に到達する。これは熱力学を支える原理・経験則であるが、この「熱平衡状態への緩和」に対応する力学過程がいかなるものかは未だ十分に理解されていない。

平衡統計力学の基礎付けに関わるこの問題は大自由度ハミルトン系（エネルギー保存力学系）の研究対象となる。通常、熱平衡化を力学原理から説明する際には、「カオス」と呼ばれる乱雑で予測不能な運動の存在が想定され、カオスは平衡状態へのスムーズな緩和を導くと考えられている。しかしながら、大自由度系におけるカオスの発生と緩和ダイナミクスの関係については未だに解明されていない点が多い。Fermi, Pasta, Ulam は1次元非線形格子振動系がエネルギー等分配状態に向けてどのように緩和するかを考察した。それ以降この模型に対する多くの研究がなされ、非自明な遅い緩和の存在が報告されている。しかしながら、その遅い緩和の特性と起源を、相空間軌道の遍歴過程の文脈の中で理解する試みは十分とは言えなかった。本論文では、数値計算により、上記の Fermi-Pasta-Ulam 模型における緩和過程を相空間内の軌道の挙動と結びつけて理解することを目的とする。

筆者は、Fermi-Pasta-Ulam 模型 ($m = 1, \kappa = 1, \alpha = \beta = 1/8, N = 10, 12, 16, 32, 64, 128, 256, 512$) に対し、モードエネルギーの分散により定義した、粗視化した緩和指標を導入し、その時間発展と緩和時間の全エネルギー密度依存性を観察することで「遅い多段階緩和」を検出した。さらに Lyapunov 解析によって系の軌道不安定性を捉えるとともに、それを種々の粗視化量と対応させることで4つの動力学相、すなわち、準周期運動・淀み運動・ローカルなカオス・より強いカオスの存在を見出した。また、カオスが発生している時間領域においても、系に非熱的ゆらぎが伴うことが示唆された。

次に筆者は「緩和の停滞」の一般性に着目した。緩和が停滞している状況で微視的状态（運動量と座標）に変更を加えることで、停滞状態（プラトー）の摂動に対する安定性を議論した。結果として、微視的状态の操作のもとでも緩和の遅さは解消されることがなく、したがってこの緩和の停滞は相空間において決して稀な現象ではないことが推測された。さらに、熱力学極限に対する興味から、システムサイズが大きい場合の挙動について考察した結果、熱力学極限においても依然として遅い緩和が残存する可能性が示された。

以上、筆者は熱平衡状態への緩和を力学的に基礎付けるという問題意識のもと、大自由度ハミルトン系（Fermi-Pasta-Ulam 模型）がエネルギー等分配状態へ緩和する過程を研究した。その結果、「遅い多段階緩和」を検出し、軌道不安定性と粗視化量の挙動を対応させることで4つの動力学相の存在を見出した。さらに、この系の相空間においては、緩和の停滞が決して稀な現象ではないこと、熱力学極限においても遅い緩和が生き残る可能性があることを示した。

目次

概要	1
第 1 章 緒言	4
1.1 平衡統計力学の理論的基盤	4
1.1.1 等重率の原理, エルゴード性	4
1.1.2 非平衡状態から平衡状態への緩和, 混合性	5
1.1.3 本論文の構成	9
第 2 章 Hamilton 力学系の風景	10
2.1 Hamilton 力学系	10
2.1.1 Hamilton 正準方程式, Hamilton 相流	10
2.1.2 シンプレクティック性	11
2.1.3 決定論的法則から生まれる予測不能性 - カオスと Lyapunov 指数	11
2.2 可積分系	12
2.2.1 Liouville の定理	12
2.2.2 可積分系の幾何学的描像, Liouville-Arnold の定理	13
2.3 Hamilton-Jacobi の理論, 作用・角変数	14
2.3.1 Hamilton-Jacobi 方程式	14
2.3.2 separable な母関数, 作用・角変数	16
2.4 カノニカル摂動論	18
2.4.1 1 自由度系の場合	18
2.4.2 多自由度系の場合	21
2.4.3 小分母の困難	22
2.4.4 Kolmogorov-Arnold-Moser の理論, 近可積分系における周期軌道の残存	22
2.5 Poincaré の定理, 摂動による第一積分たちの消失	23
2.5.1 Poincaré の定理は, 統計力学を後押しするか?	28
2.6 相空間構造を覗く	28
2.6.1 Poincaré 断面の方法	28
2.6.2 面積保存写像, ツイスト写像	29
2.6.3 不動点とその安定性	30
2.7 相空間の階層構造	33
2.7.1 摂動されたツイスト写像, Poincaré-Birkhoff の不動点定理	33
2.7.2 相空間のフラクタル性	36

2.7.3	カオスの発生機構 - ホモ (ヘテロ) クリニック錯綜	36
2.8	Hamilton 系でみられる遅い運動の数々	44
2.8.1	淀み運動, KAM トーラスへの軌道の巻き付き	44
2.8.2	Arnold 拡散, 多自由度系における普遍的な不安定化機構	45
2.8.3	Nekhoroshev 安定性	47
2.8.4	Boltzmann-Jeans 則, 異なる自由度間の遅いエネルギー輸送 - 量子論誕生前の遺産	47
第 3 章	格子振動系における遅い緩和	48
3.1	黎明期: FPU paradox - Fermi-Pasta-Ulam 模型におけるエネルギー 等分配則の破れ [FPU55]	48
3.2	勃興期: stochasticity limit の存在, 熱力学極限での stochasticity limit の消失と残存	49
3.3	転換期: 動的性質への興味, 異なる緩和過程の存在	53
3.3.1	スペクトルの時間発展における 2 つの異なる動的領域	53
3.3.2	スペクトルの時間発展における 2 つの異なる定常状態	53
3.3.3	Strong Stochasticity Threshold (SST)	54
3.3.4	秩序・カオス遷移領域の特性 - N に関するスケーリング	55
3.3.5	Toda 格子 vs. FPU_α から特徴づけられる stochasticity threshold	58
3.3.6	熱力学極限における緩和のスケーリング	61
3.3.7	Chaotic Breather の形成と崩壊	66
3.4	中興期: FPU 問題再訪・系統的研究の興隆 - Metastable Perspective への招待	69
3.4.1	L. Berchiolla, L. Galgani, A. Giorgilli (2004) [BGG04]	72
3.4.2	L. Berchiolla, A. Giorgilli, S. Paleari (2004) [BGP04]	76
3.4.3	S. Paleari, T. Penati (2005) [PP05]	80
3.4.4	A. Giorgilli and S. Paleari, T. Penati (2005) [GPP05]	80
3.4.5	A. Carati, L. Galgani, A. Giorgilli, S. Paleari (2007) [CGGP07]	88
3.4.6	G. Benettin, A. Ponno (2011) [BP11]	88
3.5	本研究の背景と目的	99
第 4 章	模型と方法	100
4.1	模型	100
4.2	基準振動分解	101
4.3	初期条件	101
4.4	粗視化された緩和指標	102
4.5	Lyapunov spectrum 解析 - 軌道不安定性	103
4.5.1	Lyapunov 指数および Lyapunov スペクトルの定義	103
4.5.2	最大 Lyapunov 指数の数値的計算方法	105
4.5.3	Lyapunov スペクトルの数値的計算方法	107
4.6	Hénon-Heiles 模型の場合	110

第 5 章	Multistage Slow Relaxation	115
5.1	プラトーおよび遅い多重緩和過程	115
5.2	緩和時間 - 緩和の全体像を引き出す	116
5.3	励起時間 - モードの個性を引き出す	120
5.4	緩和時間のエネルギー密度依存性	123
5.5	励起時間のエネルギー密度依存性	126
5.6	有限自由度系での共通性	127
5.7	遅い緩和のダイナミクス - 4つの動力学相	127
5.7.1	Kolmogorov-Sinai エントロピー	127
5.7.2	Lyapunov スペクトル	131
5.7.3	モードエネルギー占有率 $\bar{\rho}_k$ のスペクトル	132
5.7.4	モードエネルギー $E_k(t)$ のパワースペクトル	133
5.8	緩和阻害構造の“ロバストネス”	133
5.9	熱力学極限における異常緩和の消失と残存	141
第 6 章	結果の要約と考察	145
6.1	異常緩和 - Multistage Slow Relaxation	145
6.2	4つの動力学相 - 軌道の遍歴過程	145
6.3	熱力学極限 - 矛盾する2つの主張に関する考察	147
6.4	異常緩和は“measurable”か?	148
6.5	implicit な多谷構造	148
6.6	今後の展望 - エネルギー輸送ネットワーク	149
	謝辞	152
	付録 A 数値積分法の詳細	153
A.1	ハミルトン系の時間発展 - Liouville 演算子による記述	153
A.2	シンプレクティック法	154
A.2.1	1次のシンプレクティック法	155
A.2.2	高次のシンプレクティック法	156
	参考文献	164

第1章 緒言

1.1 平衡統計力学の理論的基盤

平衡統計力学とは、決定論的なニュートン力学に「等重率の原理，ミクロカノニカル分布」なる原理・確率分布を導入して熱力学を説明する体系である。これにより平衡状態に関する熱的な問題は「分配関数の計算」という一点に帰着される。平衡統計力学の下では，対応する力学系の詳細な性質を考慮する必要がなく，シンプルな手続きによって多彩な熱現象を説明できるという点で非常に強力である。一方で，力学と確率の整合，すなわち力学のもつ決定論的性質と統計力学・熱力学がもつ統計性がどのように橋渡しされるか，という統計力学の理論的基盤にかかわる問題は依然未解決問題として残されている。これはつまるところ，導入した確率分布が実現される力学過程がどのようなものであるかを問うことであり，ひいては決定論的力学系からいかにして熱が生まれ，エントロピーが増大し，非可逆過程が生ずるかを考察する問題となる。以上のような問題を，本論文においては「統計力学の基本問題」と呼ぶことにする。

この問題に関する研究は多岐にわたっており，問題意識が明確にされないまま議論されることが多い。統計力学の基本問題は大きく2つに分けることができるだろう。ひとつは系から時間情報が消失している「平衡状態」で力学と熱力学を結ぶための機構や仮説を議論するもので，もう一方は，「非平衡状態から平衡状態への緩和」を力学的に基礎付ける立場である。例えば，エルゴード仮説や相空間の典型性（エネルギー曲面上での微視的状态の没個性化）などの仮説を要請することで等重率の原理を保証し，力学の世界に確率分布を持ち込むことを正当化しようとする立場は，前者の範疇に含まれるだろう。一方，緩和過程に関して，たとえば相空間での軌道不安定化（カオス）を背景に「混合性」を仮定する方法が挙げられるが，依然として明確な知見がなく，理論物理学の難問のひとつとなっている。本論文では，特に後者に関する考察を行うこととする。

1.1.1 等重率の原理，エルゴード性

平衡統計力学はなぜ正しいのか？この問いに対して多くの人は「熱力学とのあいだに整合性が取れているから」とか「現実の物性を非常によく説明・予言するから」と答えるだろう。事実，統計力学の説明・適用範囲はきわめて広くその妥当性はやはりこの二点に集約される。したがって，その理論体系の中で据え置かれている仮定にもまた，一定の正当性があると考えるのが普通である。しかしながら，平衡統

計力学の基礎には、それ自体が物理として中心的な問題となりうるような、きわめて重要¹な仮定（“等重率の原理”）が含まれる。等重率の原理は、ミクロな力学からマクロな熱力学を説明するために要請された仮定であり、ここでは、決定論的な力学法則によって支配される運動が確率過程を模倣する状況（力学法則が生み出す時系列がマルコフ過程によって生成されたもののように振る舞う状況）が想定されている。この仮定がどのように統計力学の中に潜り込んでいるか、その詳細を考えてみることにする。

力学原理を出発点として統計力学を構成する際、相空間上に「等重率の原理」を要請して「ミクロカノニカル」確率分布を導入すると統計力学が正しく機能する。等重率の原理は、相空間内に定められたエネルギー曲面上のあらゆる微視的状态が、すべて平等に実現されることを要請する。この描像が成立するためには、エネルギー以外に余計な第一積分（保存量）が存在しないこと、すなわち、実際に軌道が巡ることのできる領域がエネルギー曲面よりも狭められないことが必要である（図1.1）。このような性質をもつ力学系を非可積分系という。非可積分系において等重率の原理が満たされるような力学過程を提唱したものととして歴史的に有名なものが「エルゴード仮説 (ergodic hypothesis)」である：

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t f(\mathbf{p}(t'), \mathbf{q}(t')) dt' = \frac{\int f(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \delta(\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) - E) d\mathbf{p}\mathbf{q}}{\int \delta(\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) - E) d\mathbf{p}\mathbf{q}}. \quad (1.1)$$

ここで、 \mathbf{p}, \mathbf{q} は系の運動量と座標、 \mathcal{H} はハミルトニアン、 E は全系のエネルギーの値を表す。このエルゴード仮説は、ある物理量 $f(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ に関して、運動方程式で駆動される軌道に沿った時間平均と、ミクロカノニカル分布に基づく相空間平均（アンサンブル平均）が等しいとする仮定である。すなわち、時間発展上、系の軌道はエネルギー曲面上を隈無く訪問し、各点での滞在時間がすべて等しいことを意味している。エルゴード仮説が“任意”の物理量 f に対する主張であること、観測時間が無限大であることなどを考慮すると、実際の系のスケールでこれが満たされることがないというのはよく知られた事実である。

現状では、ダイナミクスの詳細に立ち入らずに、とりあえず「等重率の原理」を認めることが統計力学の出発点となっているが、その背景にある力学過程についてはいまだに十分な知見がないと言えるだろう。最近では相空間の典型性（すなわち、相空間には「個性的な微視的状态」と「没個性的な微視的状态」があり、後者は前者を圧倒しており、平衡状態とは、そういった莫大な量の没個性的な状態点を軌道が巡ることだと解釈する立場）を用いた基礎付けがおこなわれつつある。

1.1.2 非平衡状態から平衡状態への緩和、混合性

次に時間の情報が入った系の振る舞い、すなわち緩和過程を考える。

——自由度の大きな孤立系を長時間放置すると、その初期状態にかかわらず「熱平衡状態」と呼ばれる巨視的に不変な終局状態に到達する——

¹つまり、「もっともらしいが、自明ではないような」

これは熱力学の基本原理である。では、この「非平衡状態から平衡状態への緩和」に対応する力学過程とは一体どのようなものであろうか？この問いかけに対して我々は現状でほとんど明確な答えを持ち合わせていない。平衡統計力学の基礎づけに関わるこの問題は、大自由度ハミルトン系（エネルギー保存力学系）の研究対象となる。

緩和を力学原理に依拠して説明しようとする場合、「非可積分性」だけではなく、エネルギー曲面上の「軌道の巡り方」に対してもある性質を要請しなくてはならない。緩和を説明する方法として、エルゴード性よりも厳しい条件である「混合性 (mixing)」を付与する立場がある。いま、時間発展演算子を \mathcal{T} とし、物理量 f と g の時間発展を

$$f(\mathbf{r}, t+T) = \mathcal{T}f(\mathbf{r}, t), \quad (1.2)$$

$$g(\mathbf{r}, t+T) = \mathcal{T}g(\mathbf{r}, t), \quad (1.3)$$

とする。ただし \mathbf{r} は相空間上の状態点を表す。混合性とは、物理量 f, g の相関関数が各々の平均値の積に緩和する性質を指す：

$$C(f, g, T) = \langle \mathcal{T}f, g \rangle - \langle f \rangle \langle g \rangle, \quad (1.4)$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} C(f, g, T) = 0. \quad (1.5)$$

いま、エネルギー曲面上の状態点を x として、ある領域 A とある領域 B に関する特性関数 f_A, f_B を次のように定義する：

$$f_A(x) = \begin{cases} 1(x \in A) \\ 0(x \notin A) \end{cases}, \quad f_B(x) = \begin{cases} 1(x \in B) \\ 0(x \notin B) \end{cases}. \quad (1.6)$$

混合性の成立条件 (1.5) における物理量 f, g として特性関数 f_A, f_B を選ぶと、混合性の条件 (1.5) は

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(\mathcal{T}A \cap B) = P(A)P(B). \quad (1.7)$$

となる。ここで $P(R)$ はある領域 R 内の状態が実現される確率を意味する。 $P(R)$ はエネルギー曲面上の全測度 Γ_E に対する領域 R の全測度 $\Gamma(R)$ の割合、すなわち $\Gamma(R)/\Gamma_E$ に等しい。測度を用いて混合性の条件を表現すると

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\Gamma(\mathcal{T}A \cap B)}{\Gamma_E} = \frac{\Gamma(A)}{\Gamma_E} \frac{\Gamma(B)}{\Gamma_E}, \quad (1.8)$$

となり、これより

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\Gamma(\mathcal{T}A \cap B)}{\Gamma(A)} = \frac{\Gamma(B)}{\Gamma_E}, \quad (1.9)$$

が導かれる。これにより、混合性が成立する場合には以下の描像が成り立つ [NH94]：

あるアンサンブルの成分系がエネルギー曲面上の部分領域 A に一様にセットされている状況を考える。この成分系のうち、 $t \rightarrow \infty$ の時間発展の後に、エネルギー曲面上の任意の部分領域 B 内にあるものの割合は、初期状態 A に関わらず $\Gamma(B)/\Gamma_E$ となる。これは、部分領域 A 内の状態点が時間発展とともに任意の部分領域 B に一様に広がること、すなわち領域 A の状態がエネルギー面上に混合されてゆくことを意味している。

混合性を仮定することは、時間相関の消失がおこる運動を想定することであると
 言える。エルゴード仮説の場合は、軌道がエネルギー曲面上のあらゆる点を訪問す
 るのに要する時間が無限大であるのに対し、混合性は実際の系における観測量の収
 束の速さを説明するためのひとつの方法となると考えられる。エルゴード性のよう
 に徐々に無限時間をかけて相空間を埋め尽くすのではなく、高い不安定性を持った
 軌道が、短時間のうちに相空間の「遠い場所」にまでその活動範囲を広げ、粗視化
 された意味で全域に軌道を経巡らせることが期待できる。(図 1.2 に「混合性のない
 エルゴード的な軌道」と「混合性をもつ軌道」の違いを示した。) 混合性のある
 相空間では、軌道が初期値近傍に停滞することを防ぐことができ、短時間で広範囲
 の運動を粗く経験することで、平均値への収束に必要な時間を短縮できると考えら
 れる。

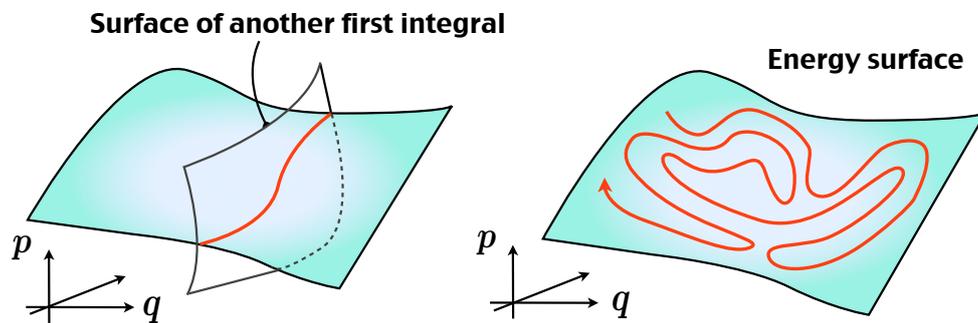


図 1.1: ミクロカノニカル統計力学が要請する等重率の原理が成り立つためには、対
 象となる力学系にエネルギー以外の第一積分（保存量）が存在しないこと、すなわ
 ち非可積分性が必要である（右図）。エネルギー以外に保存量がある場合、系の運動
 領域はその保存量で作る曲面とエネルギー曲面の共通部分だけに制限されてしまい
 （左図の赤い部分）、等重率の原理は成り立たない。

決定論的力学法則のもとで緩和がなぜ起こるのか、という問いかけに対して、上
 記で導入した混合性はひとつの回答になりうる。ではさらに問いを進めて、混合性
 を導く力学を考える。混合性が発達している場合、相空間上にとったある領域は、時
 間発展とともに自身の体積を保存しつつ複雑な形状に広がる（図 1.3）。このような
 相空間の複雑な構造を導くものとして、通常、「カオス (chaos)」と呼ばれる乱雑で予
 測不能な運動の存在が想定される。カオスとは、軌道が不安定性を獲得している状
 態を指し、その状況下で系はあたかも確率過程を模倣しているように振る舞う。上
 記で問題提起したような「非平衡状態から平衡状態への緩和」は、相関関数がすば
 やく消失するカオス的運動によってスムーズに実現されるものだと考えられている。
 しかしながら、大自由度系におけるカオスの発生と緩和ダイナミクスとの関係につい
 ては未だに解明されていない点が多い。

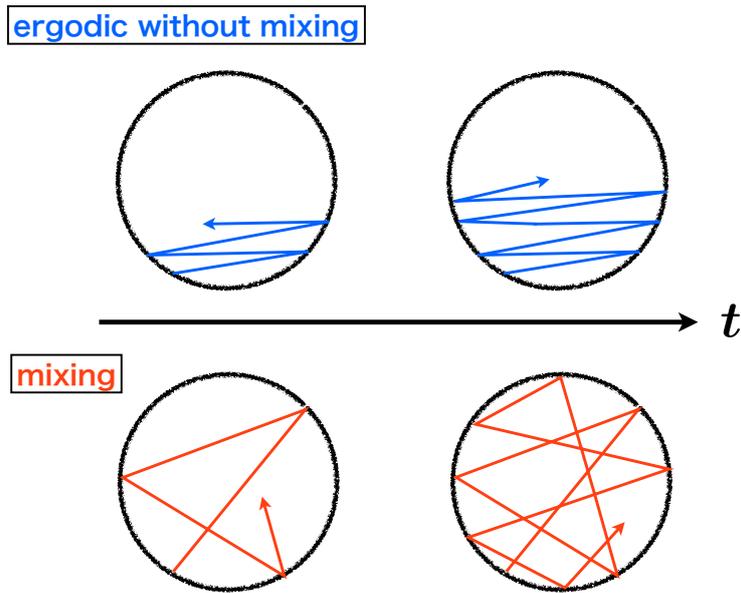


図 1.2: 混合性のないエルゴード的な運動と、混合性のある運動の比較イメージ図。混合性のないエルゴード的な軌道は無限時間でエネルギー曲面上を稠密に埋め尽くすが、その相関は消える事がなく、このため系が熱平衡状態へ緩和することが期待できない。緩和が起きるためには、混合性による相関の消失が必要とされる。

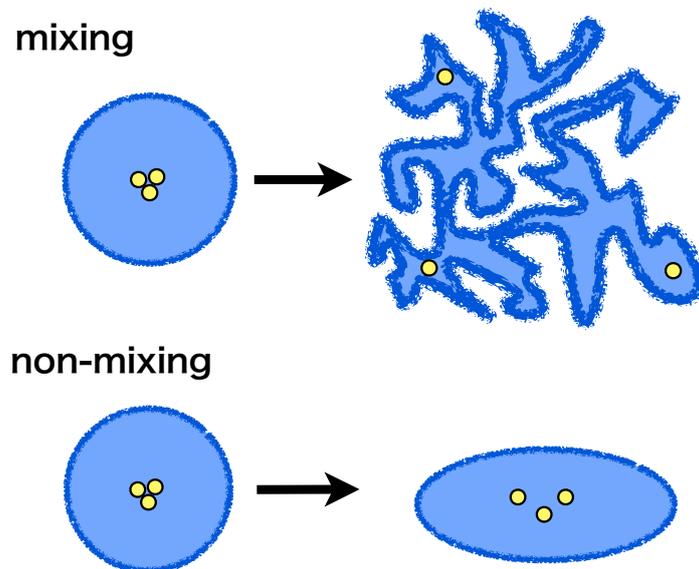


図 1.3: 混合性のある軌道のもとでは、相空間内のある状態の集合は時間発展とともに複雑な形状に変形され、内部の状態点は相関を失いながら輸送される。

1.1.3 本論文の構成

本論文は、「非平衡状態から平衡状態への緩和が、一体どのような力学プロセスによって特徴付けられるのか」という問題意識のもと、大自由度ハミルトン系における緩和過程を研究したものである。すなわち、前述した平衡統計力学の基本問題との関連性から、ハミルトン系で生起する運動がどのように軌道不安定性を獲得し、相空間上を運動するか、そしてそれが緩和過程とどのように結びつくかを中心的な興味とする。以下、本論文の構成を記す。

第2章「Hamilton 力学系の風景」では、ハミルトン力学系（エネルギー保存系）における一般論のレビューを行う。まず、2.1節でハミルトン力学系を定義し、それが満たすシンプレクティック性について述べる。さらにそこで発生すると考えられる予測不能で乱雑な運動（カオス）およびその定量的評価である Lyapunov 指数に関して簡単に解説する。2.2節では「解ける・積分できる力学系」すなわち可積分系を定義し、さらに可積分系の幾何学的描像を Liouville-Arnold の定理をもとに紹介する。2.3節ではハミルトン系において有用な作用変数・角変数を導入し、2.4節では可積分系に摂動を加えた系の挙動を調べるために、1自由度および多自由度系に対してカノニカル摂動論を考察する。多自由度系においては、1自由度系では顕在化しなかった摂動計算の発散問題が浮かび上がる。さらに、その発散を回避して摂動論を成功させる取り組みの中で発見された Kolmogorov-Arnold-Moser の理論（摂動ハミルトン系における周期運動の残存）を解説する。2.5節では、摂動ハミルトン系における保存量（第一積分）の消失について証明した Poincaré に定理を考察し、その統計力学との関連を述べる。2.6節では、相空間の構造を捉えるための方法である Poincaré 断面の方法を導入する。2.7節では、摂動によって相空間構造が変化し自己相似的構造を内包すること（Poincaré-Birkhoff の定理）、およびカオスの発生機構であるホモクリニック（ヘテロクリニック）錯綜を解説する。2.8節では、ハミルトン系で見られる遅い運動について事例を紹介する。第3章では、本論文で扱う Fermi-Pasta-Ulam 非線形格子振動モデルを導入し、このモデルが示す非自明な遅い緩和を取り上げて解析した先行研究を解説する。第4章では、本研究において扱うモデル、および数値計算方法（数値積分、緩和指標の導入、緩和時間の導入、Lyapunov 解析の方法など）を述べ、第5章では Fermi-Pasta-Ulam モデルにおいて見られた遅い多段階緩和（multistage slow relaxation）とその性質の詳細を報告する。第6章では本研究の要約と考察が述べられる。

第2章 Hamilton力学系の風景

古典平衡統計力学は、熱力学を力学から説明するものである。統計力学は力学に対して「等重率の原理」「ミクロカノニカル分布」なる確率分布を導入することで非常に巧みに熱現象を説明する。しかしながら、その確率分布を導入する理論的妥当性や、その確率分布の背景にある力学がどのようなものであるかに関しては依然として未解明のままとなっている。また、非平衡状態から平衡状態に系が緩和するとき、それに対応する力学過程がいかなるものであるかについても十分な知見が存在しない。このような統計力学の基本的な問題を考察するとき、エネルギー曲面上に不要な第一積分（保存量）が存在しないことや、軌道が強い不安定性を獲得していることが仮定される。そこには、力学系のカオスが暗黙のうちに想定されていると考えられる。どのような力学系がカオス性を獲得できるかという問題は、Poincaréが「力学の基本問題」と呼んだものであり、その様相は多自由度系に関しては未だに不明な点が多い。以下、Hamilton力学系のカオス [AJL92], [Tab89], [Haa71], [YO94] に関する一般論のレビューをおこなう。

2.1 Hamilton力学系

2.1.1 Hamilton正準方程式, Hamilton相流

正準共役な変数である一般化運動量 \mathbf{p} と一般化座標 \mathbf{q} が Hamiltonian $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ を通じて次のような微分方程式 (Hamiltonの正準方程式) で関連づけられているとき、これを N 自由度 Hamilton力学系という：

$$p_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (i = 1, \dots, N). \quad (2.1)$$

系の力学的状態は $2N$ 次元の相空間上のある一点で指定される。ここで $\mathbf{r} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ とすると、相空間上の軌道の運動は速度場 (Hamilton相流)：

$$\frac{d}{dt}\mathbf{r} = \mathbf{J} \cdot \nabla H \quad \nabla H(\mathbf{r}) = \left(\frac{\partial H}{\partial r_1}, \dots, \frac{\partial H}{\partial r_{2N}} \right), \quad (2.2)$$

によって記述される。ここで \mathbf{J} はシンプレクティック行列

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbb{I} \\ -\mathbb{I} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

を表す。ただし、 \mathbb{I} は単位行列をあらわす。

2.1.2 シンプレクティック性

正準方程式の解である q, p に関して,

$$\sum_{i=1}^N dq_i(t) \wedge dp_i(t) = \sum_{i=1}^N dq_i(0) \wedge dp_i(0), \quad (2.4)$$

なる関係が成立する。この2次微分形式の保存は、Hamilton 相流が相空間面積を保つこと (Liouville の定理) を意味する (図 2.1)。さらに、時間発展を記述するヤコ

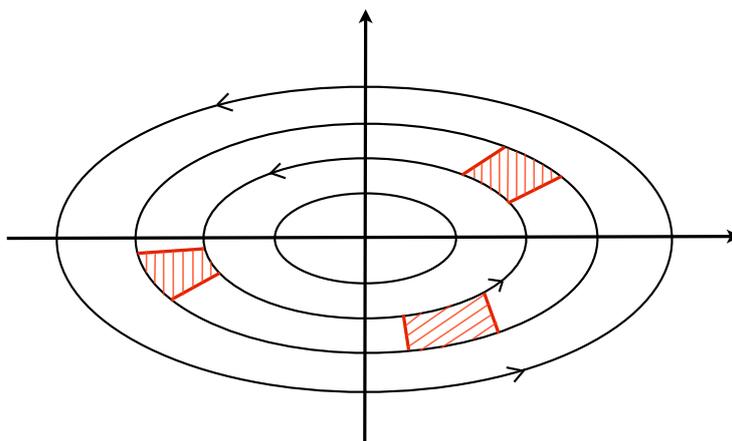


図 2.1: ハミルトン系では、相空間内の体積 (面積) 要素の形状は変化してもその大きさが保存するように軌道が時間発展する。体積要素内の状態点は途中で消滅したり、他の状態点と重なることはない。Liouville の定理は各時刻での状態密度が不変であることを意味する。

ビ行列 (モノドロミー行列)

$$\mathbf{M} = \frac{\partial(r(t))}{\partial(r(0))}, \quad (2.5)$$

に関して,

$${}^t\mathbf{M}\mathbf{J}\mathbf{M} = \mathbf{J}, \quad (2.6)$$

が成立し、Hamilton 系の時間発展がある種のカノニカル変換であることを示している。

2.1.3 決定論的法則から生まれる予測不能性 - カオスと Lyapunov 指数

ニュートン方程式に代表される決定論的法則は、初期条件の厳密な設定・観測によって未来永劫にわたる物理的状态の予測を可能にする。しかしながら、システムに非線形性が伴う場合 (実は自然界にはそのようなケースが圧倒的に多い)、シス

テムは初期条件に対してきわめて強い敏感性が示し、結果として事実上¹の予測不能性をもつこととなる。この初期値鋭敏性は決定論的カオス（あるいは単にカオス）と呼ばれる。このカオスと呼ばれる現象は、数理的興味を超えて、自然界における不可逆性の問題、熱化の問題と密接に関連する。また、Hamilton 力学系におけるカオスは非常に豊富な構造をもつことが知られている。ここでは「初期値鋭敏性」を基軸にカオスを定義し、その定量的表現である Lyapunov 指数を導入する。

いま、ある力学系

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad (2.7)$$

と、それに対する変分方程式

$$\frac{d}{dt}(\delta\mathbf{x}) = \mathbf{Df}(\mathbf{x}) \cdot \delta\mathbf{x}, \quad (2.8)$$

を考える。カオスは初期条件の情報がすばやく消失する性質をもち、それはすなわち変分方程式の解 $\delta\mathbf{x}(t)$ が

$$|\delta\mathbf{x}(t)| \sim \|\delta\mathbf{x}(0)\| \exp(\lambda t), \quad \lambda > 0, \quad (2.9)$$

で示されるような指数的挙動を示すことに等しい。これは、初期時刻において酷似していた2つの軌道間のわずかな「ずれ」が時間発展とともに指数的に増大することを意味し、その意味でカオス力学系は「記憶喪失過程」であると言える。ここでその誤差の増大率、情報の損失率を表す量 λ

$$\lambda(\mathbf{x}) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log \frac{\|\delta\mathbf{x}(t)\|}{\|\delta\mathbf{x}(0)\|}, \quad (2.10)$$

を Lyapunov 指数と呼び、これが正の値を取るとき、一般に系はカオスであるという (図 2.2)。

2.2 可積分系

2.2.1 Liouville の定理

調和振動子やケプラー問題は解析的に解くことができる。しかしながら、自然界に展開する運動の大部分はいわゆる求積法によって求めることが（原理的に）できない。まずは、力学系が積分できる（解ける）性質、すなわち可積分性について述べる。実は、Hamilton 力学系が求積法によって解けるのは、系の自由度と同じ数だけの第一積分が存在する場合に限られる。いま自由度 N の Hamilton 系において、 N 個の保存量（第一積分）が存在している状況を考える：

$$\Phi_1(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \alpha_1, \Phi_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \alpha_2, \dots, \Phi_N(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \alpha_N. \quad (2.11)$$

¹カオスは予測不能性を伴うと言いつつも、依然として決定論的法則のもとで発生している。仮に無限精度での初期値の制御が可能であれば、未来はやはり正確に予測できる。しかしながら無限精度の観測や制御は事実上不可能である。

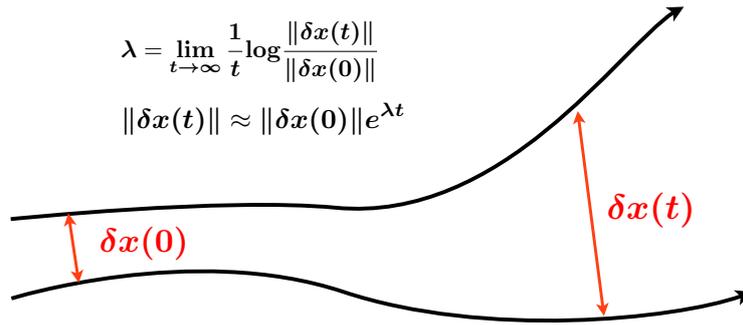


図 2.2: Lyapunov 指数はある変位方向に対する軌道不安定性の指標となる。Lyapunov 数が正であるとき、2つの独立な軌道は、「時刻ゼロでは酷似していた」ということを指数関数的に“記憶喪失”する。カオスが、決定論的な法則から生まれる予測不能な運動だと言われる所以はここにある。初期の誤差がどんなに小さくても、やがて増大し、2つの軌道の相関は消えてしまう。

ただし、このうち1つは Hamiltonian 自身（系の全エネルギー）であるとする。また、これらの第一積分には、互いの Poisson 括弧が消える条件：

$$\{\Phi_i, \Phi_j\} = \sum_{k=1}^N \left\{ \frac{\partial \Phi_i}{\partial q_k} \frac{\partial \Phi_j}{\partial p_k} - \frac{\partial \Phi_i}{\partial p_k} \frac{\partial \Phi_j}{\partial q_k} \right\} = 0, \quad (2.12)$$

が課されているものとする。条件 (2.12) がすべての i, j に対して満たされるような N 個の第一積分の組を「包含系をなす第一積分」と呼ぶ。さらにこれらは1価の第一積分であるとする。「1価の第一積分」とは、相空間上の一点 (\mathbf{p}, \mathbf{q}) を指定すると一意的にその値が決まり、その等高線が相空間内に孤立した曲面をつくるような保存量をいう。一方、相空間内に孤立曲面を定めることのできない保存量、すなわちある領域内のあらゆる場所に等高線が及んでしまうような第一積分は「無限多価の第一積分」と呼ばれ可積分性とは無関係な保存量であるため考慮されない。

このような包含系をなす1価の第一積分が N 個存在する場合、系は求積可能である (Liouville の定理²⁾)。また、全系のエネルギーを定数倍した保存量や、複数の保存量を足し合わせた保存量のように、自明な操作によって無数に生成されてしまう保存量は関数的に独立ではなく、求積可能性に関して全く寄与しない。

2.2.2 可積分系の幾何学的描像, Liouville-Arnold の定理

積分可能な Hamilton 系に対して Arnold は幾何学的理解を与えた。すなわち、可積分系の軌道はトーラスのトポロジーを持つことを示した。

いま、 N 自由度 Hamilton 力学系を考える。この系には包含系をなす独立な第一積分 $\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_N$ が存在するとする。これらの第一積分によって定まる積分曲面

²相空間の面積保存, シンプレクティック性に関する Liouville の定理とは別。

の共通部分（すなわち実際に系の軌道が這うことのできる領域）を \mathcal{D}_α （レベルセット）とする：

$$\mathcal{D}_\alpha \equiv \{(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \mid \Phi_i(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \alpha_i \quad (i = 1, 2, \dots, N)\}. \quad (2.13)$$

このレベルセット \mathcal{D}_α に対して以下の2つが成立する：

- (1) レベルセット \mathcal{D}_α はコンパクトで連結な多様体である。
- (2) 勾配ベクトル $\nabla\Phi_i(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ がレベルセット \mathcal{D}_α 上の各点で一次独立であると仮定するなら、 \mathcal{D}_α は N 次元トーラス T^n ：

$$T^n = \{(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N) \bmod 2\pi\}, \quad (2.14)$$

のトポロジーをもち、軌道はこのトーラス上を準周期運動する。

可積分系の軌道が形成するトーラスを図2.3に示した。2次元トーラスは、周期境界条件が課された2次元平面上の運動と対応している。また、図2.4に示したように、 θ_1 と θ_2 の比が有理比の場合（右）は、軌道は有限時間内の閉じるが、無理比の場合（左）には、軌道は閉じることがなくエルゴード的にトーラスを埋め尽くす。

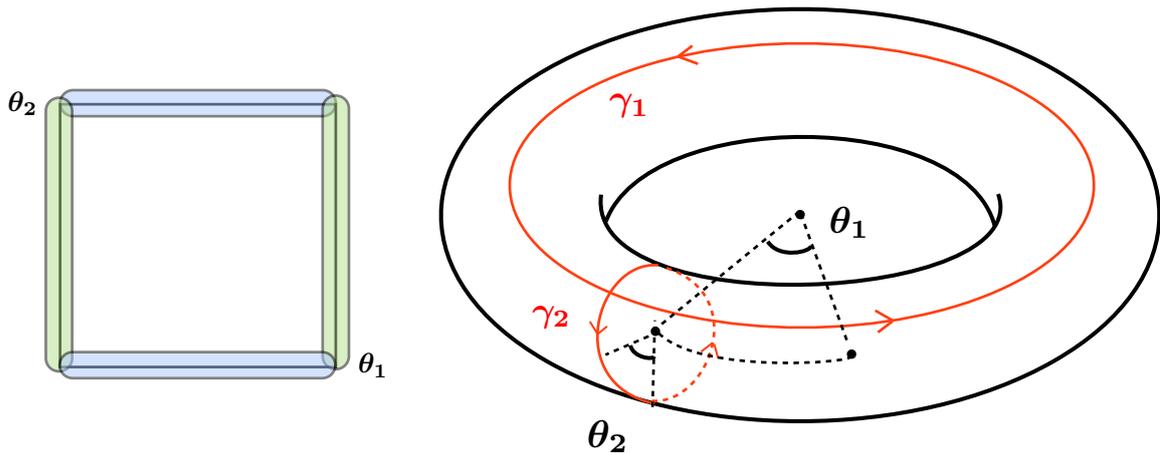


図 2.3: 可積分系の軌道が形成するトーラス。ここでは2次元トーラスを示している。2次元トーラスは θ_1, θ_2 で特徴付けられ、その運動は周期境界条件が課された2次元平面上の運動と対応している。左図の青い辺と緑の辺に対してそれぞれ周期境界条件を課したものは2次元トーラスとなる。

2.3 Hamilton-Jacobi の理論, 作用・角変数

2.3.1 Hamilton-Jacobi 方程式

Hamilton 系の求積を実行する強力な方法として Hamilton-Jacobi の方法が挙げられる。ある有用なカノニカル変換 $(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \rightarrow (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$ によって Hamiltonian が正準共役

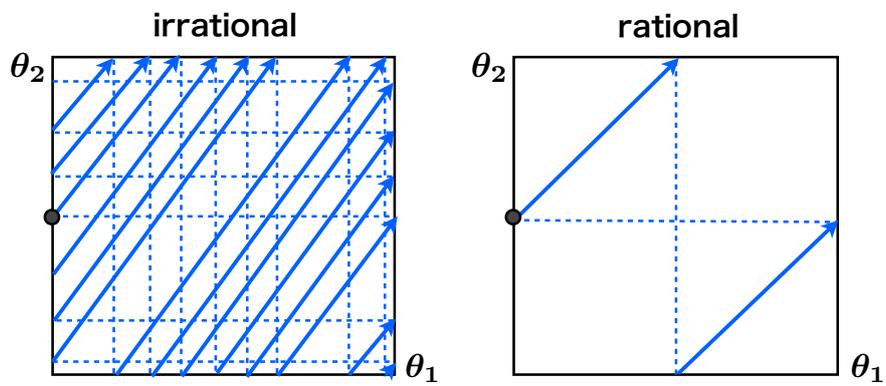
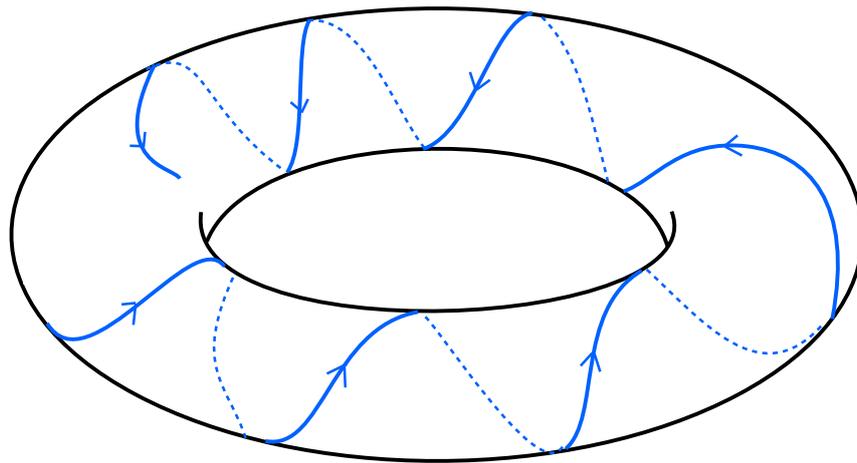


図 2.4: θ_1 と θ_2 の比が無理数比の場合, 軌道はトーラス表面を稠密に埋め尽くすが, 有理数比の場合には有限の時間で軌道が閉じる。

な変数のうち片方の組だけで表現される場合（たとえば α だけで書かれる場合）を考える。このような変換を見つける事ができれば運動方程式はきわめて簡潔な形で与えられる：

$$\frac{d\alpha_i}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}(\alpha)}{\partial \beta_i} = 0, \quad (2.15)$$

$$\frac{d\beta_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}(\alpha)}{\partial \alpha_i} = c_i \text{ (const.)}. \quad (2.16)$$

ゆえに、

$$\alpha_i = \text{const.}, \quad \beta_i = c_i t + d_i, \quad (2.17)$$

となり、定数解と時間比例解が得られる。ただし、 d_i は積分定数である。解がこのような単純な挙動を示すように見える座標系へのカノニカル変換はある母関数 $S(\alpha, q)$ によって

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}, \quad \beta_i = \frac{\partial S}{\partial \alpha_i}, \quad (2.18)$$

のように生成される。重要な作業はこの母関数を求める事である。このとき、母関数 S は次の Hamilton-Jacobi 方程式に従う：

$$H(\nabla S, q) = \mathcal{H}(\alpha) = E(\alpha), \quad \nabla S = \left(\frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_N} \right). \quad (2.19)$$

ここで E は全系のエネルギーを表す。この偏微分方程式に対して N 個の任意定数を含むような完全解 $S = S(\alpha, q)$ を求めることができれば運動はすべて解けたことになる。

2.3.2 separable な母関数, 作用・角変数

しかしながら、Hamilton-Jacobi 方程式が解けるのは実質的に母関数 S が separable である場合に限られる。いま母関数が separable な形式

$$S(q, \alpha) = \sum_{i=1}^N S_i(q_i, \alpha), \quad (2.20)$$

で与えられている場合を考える。ここで分離された各母関数 S_i は q_i ただ一つを通じてのみ“旧”座標依存性をもつ。また p_i は

$$p_i = \frac{\partial}{\partial q_i} S_i(q_i, \alpha), \quad (2.21)$$

となり“旧”座標に関して q_i だけの関数となる。

ここで新たな変数（作用変数） J_i を次のように導入する：

$$J_i = \frac{1}{2\pi} \oint_{\mathcal{C}} p_i dq_i. \quad (2.22)$$

q_i はそれぞれが周期運動をし、系全体が多重周期運動をしているとし、積分は q_i に関する 1 周期の閉軌道 \mathcal{C} にわたって実行する。この \mathcal{C} は図 2.3 の 2 次元トーラスの場合には、 γ_1 および γ_2 となる。このとき J_1 と J_2 はそれぞれ γ_1 と γ_2 の半径に相当する。また、 J_i に正準共役な変数として角変数 θ_i が導入される。(2.22) において、(2.21) より、 p_i は \mathbf{q} に関しては q_i のみを含むことから、作用変数 J_i は (2.17) における定数解 α だけの関数となる。

$$J_i = J_i(\alpha). \quad (2.23)$$

したがってカノニカル変換 $(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \rightarrow (\alpha, \beta) \rightarrow (\mathbf{J}, \boldsymbol{\theta})$ によって変換された Hamiltonian は作用変数だけの関数となる：

$$\mathcal{K} = \mathcal{K}(\mathbf{J}). \quad (2.24)$$

カノニカル変換 $(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \rightarrow (\mathbf{J}, \boldsymbol{\theta})$ を生成する母関数 \tilde{S} は、 S と同様に separable であり、および (2.23) であることから

$$\tilde{S}(\mathbf{q}, \mathbf{J}) = \sum_{i=1}^N \tilde{S}_i(q_i, \mathbf{J}), \quad (2.25)$$

と与えられる。その変換則は

$$p_i = \frac{\partial \tilde{S}}{\partial q_i} = \frac{\partial \tilde{S}_i}{\partial q_i}, \quad \theta_i = \frac{\partial \tilde{S}}{\partial J_i}, \quad (2.26)$$

となる。ここで運動方程式とその解は

$$\frac{dJ_i}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{K}(\mathbf{J})}{\partial \theta_i} = 0, \quad \therefore J_i = \text{const}. \quad (2.27)$$

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{K}(\mathbf{J})}{\partial J_i} = \omega_i(\mathbf{J}), \quad \therefore \theta_i = \omega_i t + \delta_i. \quad (2.28)$$

となる。作用変数に関して、(2.26) と定義 (2.22) より、

$$J_i = \frac{1}{2\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{\partial \tilde{S}_i}{\partial q_i} dq_i, \quad (2.29)$$

となり 1 周期あたりの S_i の変化分を与えている。一方、ある q_m を 1 周期分だけ変化させる間にその他の \mathbf{q} を止めておく場合、この操作中の θ_i の変化 $\delta\theta_m$ を求めると、

$$[\delta\theta_i]_m = \oint_{\mathcal{C}} \frac{\partial \theta_i}{\partial q_m} dq_m = \oint_{\mathcal{C}} \frac{\partial^2 \tilde{S}}{\partial q_m \partial J_i} dq_m = \frac{\partial}{\partial J_i} \oint_{\mathcal{C}} p_m dq_m = \frac{\partial J_m}{\partial J_i} \cdot 2\pi = 2\pi \delta_{im}, \quad (2.30)$$

となる。途中計算には (2.26), (2.22) を用いた。ここで q_i の周期が T_i であるとするなら、 $i = m$ より

$$[\delta\theta_i]_i = \omega_i T_i = 2\pi, \quad (2.31)$$

であり、 ω_i は運動の振動数であることが分かる。このように作用・角変数は、運動が 1 周期だけ時間発展するとともに 2π ずつ増加するような正準変数の組として導入されている。

2.4 カノニカル摂動論

可積分系を摂動した近可積分系をカノニカル摂動論によって論じる。1自由度系の場合、カノニカル摂動論は問題なく成功するが、対象が2自由度以上になると摂動論はたちまち発散の問題（小分母の困難, small divisor problem）を抱える事となる。この多自由度系での摂動論の破綻は、興味深い事にカオスの発生という物理的実体と密接に関連する。Kolmogorov, Arnold, Moser は、小分母の困難を回避して摂動論を収束させる文脈の中で、可積分系で見られる周期軌道が、ゼロでない測度で摂動系においても残存することを示した（KAMの定理）。これは、可積分系に近い摂動ハミルトン系においてエルゴード性がしばしば破れることを示唆したものであり、微弱な非線形性の存在から系の熱化やカオス化を説明する従来の素朴な期待に対し、非線形性とカオスの関連がそう単純ではないことを明らかにしている。

2.4.1 1自由度系の場合

最終的目標は多自由度系の摂動論を議論することであるが、まずは1自由度系を議論する。可積分系に対する摂動ハミルトニアン：

$$H = H_0 + \epsilon H_1 + \epsilon^2 H_2 + \dots, \quad (2.32)$$

を考える。非摂動系での作用変数、角度変数をそれぞれ J_0, θ_0 とする。いま、カノニカル変換によって新たなハミルトニアンを新たな作用変数だけで書けることを目指す。このような変換を生成するハミルトン・ヤコビの母関数 S を ϵ で級数展開した形式

$$S = S_0 + \epsilon S_1 + \epsilon^2 S_2 + \dots, \quad (2.33)$$

として考える。ここで非摂動系から摂動系への変数変換 $(J_0, \theta_0) \rightarrow (J, \theta)$ は S を通して次のように生成される：

$$J_0 = \frac{\partial S}{\partial \theta_0}, \quad \theta = \frac{\partial S}{\partial J}, \quad S = S(J, \theta_0). \quad (2.34)$$

$\epsilon \rightarrow 0$ の無摂動極限で S_0 は恒等変換 ($J = J_0, \theta = \theta_0$) を与える必要があるから、 $S_0 = J\theta_0$ とする。すなわち

$$S = J\theta_0 + \epsilon S_1 + \epsilon^2 S_2 + \dots, \quad (2.35)$$

となる。また、摂動系ハミルトニアンは無摂動系の変数を用いて

$$H = H_0(J_0) + \epsilon H_1(J_0, \theta_0) + \epsilon^2 H_2(J_0, \theta_0) + \dots, \quad (2.36)$$

と書かれる。以上から、母関数 S に対するハミルトン・ヤコビの方程式は

$$H_0\left(\frac{\partial S}{\partial \theta_0}\right) + \epsilon H_1\left(\frac{\partial S}{\partial \theta_0}, \theta_0\right) + \epsilon^2 H_2\left(\frac{\partial S}{\partial \theta_0}, \theta_0\right) + \dots = E(J), \quad (2.37)$$

となり, さらに新たなハミルトニアン $E(J)$ も ϵ に関する級数に展開しておく。

$$E(J) = E_0(J) + \epsilon E_1(J) + \epsilon^2 E_2(J) + \dots \quad (2.38)$$

ここで,

$$J_0 = \frac{\partial S}{\partial \theta_0} = J + \epsilon \frac{\partial S_1}{\partial \theta_0} + \epsilon^2 \frac{\partial S_2}{\partial \theta_0}, \quad (2.39)$$

に注意して (2.37) の各項を $J_0 = J$ のまわりでテイラー展開すると,

$$\begin{aligned} H_0 \left(\frac{\partial S}{\partial \theta_0} \right) &= H_0(J) + \epsilon \left[\frac{\partial S_1}{\partial \theta_0} \left(\frac{\partial H_0}{\partial J_0} \right)_{J_0=J} \right] \\ &\quad + \epsilon^2 \left[\frac{\partial S_2}{\partial \theta_0} \left(\frac{\partial H_0}{\partial J_0} \right)_{J_0=J} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial S_1}{\partial \theta_0} \right)^2 \left(\frac{\partial^2 H_0}{\partial J_0^2} \right)_{J_0=J} \right] + O(\epsilon^3), \\ H_1 \left(\frac{\partial S}{\partial \theta_0}, \theta_0 \right) &= H_1(J, \theta_0) + \epsilon \left[\frac{\partial S_1}{\partial \theta_0} \left(\frac{\partial H_1}{\partial J_0} \right)_{J_0=J} \right] + O(\epsilon^2), \\ H_2 \left(\frac{\partial S}{\partial \theta_0}, \theta_0 \right) &= H_2(J, \theta_0) + O(\epsilon), \end{aligned} \quad (2.40)$$

となり, これらを (2.37) に戻して, (2.38) から摂動パラメタの各次数の係数比較を行うと,

$$\epsilon^0 : H_0(J) = E_0(J), \quad (2.41)$$

$$\epsilon^1 : \frac{\partial S_1}{\partial \theta_0} \frac{\partial H_0}{\partial J_0} + H_1(J, \theta_0) = E_1(J), \quad (2.42)$$

$$\epsilon^2 : \frac{\partial S_2}{\partial \theta_0} \frac{\partial H_0}{\partial J_0} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial S_1}{\partial \theta_0} \right)^2 \frac{\partial^2 H_0}{\partial J_0^2} + \frac{\partial S_1}{\partial \theta_0} \frac{\partial H_1}{\partial J_0} + H_2(J, \theta_0) = E_2(J), \quad (2.43)$$

を得る。目標は, 新たな摂動ハミルトニアンを新たな作用変数だけで表現できるようなカノニカル変換を生成する母関数 S を求めることであった。

(2.41) から, 新ハミルトニアンの E_0 は旧ハミルトニアンの H_0 において J_0 を J に置き換えたものになることが分かる。(2.42) および (2.43) については以下のように S_1, S_2, \dots を求める。オリジナルの力学変数は p, q であり, これらはカノニカル変換によって作用変数 J_0 と角度変数 θ_0 に移された。 p, q は θ_0 の周期関数であり周期 1 をもち, それゆえ (2.35), (2.36) の $H_1, H_2, \dots, S_1, S_2, \dots$ をフーリエ級数で表現しておく。

$$\begin{aligned} H_1 &= \sum_n H_n^{(1)}(J_0) \exp(2\pi i n \theta_0), & H_2 &= \sum_n H_n^{(2)}(J_0) \exp(2\pi i n \theta_0). \\ S_1 &= \sum_n S_n^{(1)}(J) \exp(2\pi i n \theta_0), & S_2 &= \sum_n S_n^{(2)}(J) \exp(2\pi i n \theta_0). \end{aligned} \quad (2.44)$$

これらを (2.42), (2.43) に代入し, 1 周期分の平均を取ることを考える。 $\partial S_1 / \partial \theta_0, \partial S_2 / \partial \theta_0$ のフーリエ級数において $n = 0$ の項は消えるので, 1 周期分の平均値は 0 と

なる。

$$\frac{\overline{\partial S_1}}{\partial \theta_0} = \int_0^1 d\theta_0 \sum_n 2\pi i n \cdot S_n^{(1)}(J) \exp(2\pi i n \theta_0) = 0. \quad (2.45)$$

一方, $\partial H_1/\partial J_0$, $\partial H_2/\partial J_0$ はフーリエ級数の $n = 0$ の項だけが残る, 平均値は

$$\frac{\overline{\partial H_1}}{\partial J_0} = \int_0^1 d\theta_0 \sum_n \frac{\partial H_n^{(1)}}{\partial J_0} \exp(2\pi i n \theta_0) = \int_0^1 \frac{\partial H_0^{(1)}}{\partial J_0} d\theta_0, \quad (2.46)$$

となる。以上から, (2.42), (2.43) の 1 周期分にわたる平均を取れば,

$$E_1(J) = \overline{H_1}(J, \theta_0), \quad (2.47)$$

$$E_2(J) = \overline{H_2}(J, \theta_0) + \frac{1}{2} \overline{\left(\frac{\partial S_1}{\partial \theta_0} \right)^2 \frac{\partial^2 H_0}{\partial J_0^2}} + \frac{\overline{\partial S_1} \overline{\partial H_1}}{\partial \theta_0 \partial J_0}, \quad (2.48)$$

として E_1, E_2 が決定される。これらを用いれば (2.42), (2.43) を S_1, S_2 について解くことができる。

ここで, θ_0 に関する任意の関数 $f(\theta_0)$ に対して

$$\tilde{f} = f - \overline{f}, \quad (2.49)$$

とすると, \tilde{f} は θ_0 の関数の純粋な周期部分をあらわす。したがって (2.42), (2.43) は, この定義と (2.47), (2.48) より,

$$\frac{\partial}{\partial \theta_0} S_1(J, \theta_0) = -\frac{\widetilde{H_1}(J, \theta_0)}{\omega_0(J)}, \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta_0} S_2(J, \theta_0) = -\frac{1}{\omega_0(J)} \left[\widetilde{H_2}(J, \theta_0) + \frac{1}{2} \overline{\left(\frac{\partial S_1}{\partial \theta_0} \right)^2 \frac{\partial^2 H_0}{\partial J_0^2}} + \frac{\overline{\partial S_1} \overline{\partial H_1}}{\partial \theta_0 \partial J_0} \right], \quad (2.51)$$

を得る。ただし, 周波数は $\omega_0 = \partial H_0/\partial J_0$ と定義した。これを S_1, S_2 について解くことを考える。(2.44) と同様に $\widetilde{H_1}$ をフーリエ級数で展開すれば,

$$\widetilde{H_1}(J, \theta_0) = \sum_{n \neq 0} \widetilde{H_n^{(1)}}(J) \exp(2\pi i n \theta_0), \quad (2.52)$$

となる。ただし, $\widetilde{H_1}$ が純粋に周期的な部分だけを含むことから, フーリエ級数における定数項が存在しないため $n = 0$ を除外した。これとすでに提示した S_1 のフーリエ級数表現を (2.50) に代入すれば,

$$S_1(J, \theta_0) = \frac{i}{2\pi} \sum_{n \neq 0} \frac{\widetilde{H_n^{(1)}}(J)}{n\omega_0(J)} \exp(2\pi i n \theta_0), \quad (2.53)$$

と定まる。 S_2 についても同様の手順で決定される。これより、摂動系における新たな角度変数 θ 、作用変数 J 、振動数 ω は

$$\theta = \theta_0 + \epsilon \frac{\partial}{\partial J} S_1(J, \theta_0), \quad (2.54)$$

$$J_0 = J + \epsilon \frac{\partial}{\partial \theta_0} S_1(J, \theta_0), \quad (2.55)$$

$$\omega(J) = \omega_0(J) + \epsilon \frac{\partial}{\partial J} E_1(J), \quad (2.56)$$

となり、無摂動系に対して ϵ の 1 次の補正が加わることがわかる。以上から、1 自由度系においては摂動論を成功的に遂行することができる。

2.4.2 多自由度系の場合

多自由度系を考える。多自由度系の場合も 1 自由度系の場合と同様に、摂動ハミルトニアン：

$$H(\mathbf{J}_0, \boldsymbol{\theta}_0) = H_0(\mathbf{J}_0) + \epsilon H_1(\mathbf{J}_0, \boldsymbol{\theta}_0) + \epsilon^2 H_2(\mathbf{J}_0, \boldsymbol{\theta}_0) + \dots, \quad (2.57)$$

を考え、ハミルトン・ヤコビの母関数を

$$S = \mathbf{J}\boldsymbol{\theta}_0 + \epsilon S_1 + \epsilon^2 S_2 + \dots, \quad (2.58)$$

と展開しておく。対応するハミルトン・ヤコビ方程式

$$H_0(\nabla_{\boldsymbol{\theta}_0} S) + \epsilon H_1(\nabla_{\boldsymbol{\theta}_0} S, \boldsymbol{\theta}_0) + \epsilon^2 H_2(\nabla_{\boldsymbol{\theta}_0} S, \boldsymbol{\theta}_0) + \dots \quad (2.59)$$

$$= E_0(\mathbf{J}) + \epsilon E_1(\mathbf{J}) + \epsilon^2 E_2(\mathbf{J}) + \dots, \quad (2.60)$$

の各項を $\mathbf{J}_0 = \mathbf{J}$ のまわりでテイラー展開し、摂動パラメタの次数で整理して係数比較をおこなえば、

$$\epsilon^0 : H_0(\mathbf{J}) = E_0(\mathbf{J}). \quad (2.61)$$

$$\epsilon^1 : \nabla_{\boldsymbol{\theta}_0} S_1 \cdot \nabla_{\mathbf{J}_0} H_0 + H_1(\mathbf{J}, \boldsymbol{\theta}_0) = E_1(\mathbf{J}), \quad (2.62)$$

.....

を得る。ここで H_1, H_2, \dots や S_1, S_2, \dots のフーリエ級数展開は系が多自由度であるから多重周期運動を考え、多重フーリエ級数として

$$H_1 = \sum_{\mathbf{n}} H_{\mathbf{n}}^{(1)}(\mathbf{J}_0) \exp[2\pi i(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\theta}_0)], \quad (2.63)$$

$$S_1 = \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^{(1)}(\mathbf{J}) \exp[2\pi i(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\theta}_0)],$$

と展開される。 \mathbf{n} は整数ベクトル (n_1, n_2, \dots, n_N) を表す。また、(2.49) で導入した $\boldsymbol{\theta}_0$ の関数 f の、1 周期にわたる平均値は多自由度系においては

$$\bar{f} = \int_0^1 \dots \int_0^1 f d\theta_{0,1} d\theta_{0,2} \dots d\theta_{0,N}, \quad (2.64)$$

と定義され、 $\tilde{f} = f - \bar{f}$ である。これらを用いると (2.47) に対応するものとして

$$E_1(\mathbf{J}) = \overline{H_1}(\mathbf{J}, \boldsymbol{\theta}_0), \quad (2.65)$$

が、また (2.50) に対応するものとして

$$\boldsymbol{\omega}_0(\mathbf{J}) \cdot \nabla_{\boldsymbol{\theta}_0} S_1(\mathbf{J}, \boldsymbol{\theta}_0) = E_1(\mathbf{J}) - H_1(\mathbf{J}, \boldsymbol{\theta}_0) = -\widetilde{H_1}(\mathbf{J}, \boldsymbol{\theta}_0), \quad (2.66)$$

が得られる。ただし周波数は $\boldsymbol{\omega}_0 = \partial \mathbf{H}_0 / \partial \mathbf{J}_0$ である。(2.52) 式の多重バージョンを

$$\widetilde{H_1}(\mathbf{J}, \boldsymbol{\theta}_0) = \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{0}} \widetilde{H_{\mathbf{n}}^{(1)}}(\mathbf{J}) \exp [2\pi i(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\theta}_0)], \quad (2.67)$$

とする。1自由度の場合と同様に整数ベクトル \mathbf{n} が零ベクトル $\mathbf{0}$ である項は排除した。そして最終的に (2.53) の対応物として

$$S_1(\mathbf{J}, \boldsymbol{\theta}_0) = \frac{i}{2\pi} \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{0}} \frac{\widetilde{H_{\mathbf{n}}^{(1)}}(\mathbf{J})}{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\omega}_0(\mathbf{J})} \exp [2\pi i(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\theta}_0)], \quad (2.68)$$

が定まる。

2.4.3 小分母の困難

1自由度では摂動展開が成功するが、多自由度の場合、周波数 ω_0 が互いに有理比をなす場合、(2.68) の分母が

$$(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\omega}_0) = 0, \quad (2.69)$$

を満足するような、零ベクトルではない整数の組 (n_1, n_2, \dots, n_N) を選ぶことができる (これを縮退あるいは共鳴という)。このとき、フーリエ係数は発散してしまう。さらに、たとえ周波数が互いに無理比であっても、分母が厳密にゼロにならないまでも、その値がきわめて小さくなってしまいうような整数ベクトルをやはりみつけることができしまい、この場合も摂動論は破綻する。この問題は小分母の困難 (small divisor problem) と呼ばれる。

2.4.4 Kolmogorov-Arnold-Moser の理論, 近可積分系における周期軌道の残存

Kolmogorov, Arnold, Moser はこの小分母の困難がある条件の下で回避され、摂動展開が収束することを証明した [Kol91, Arn63b, Arn63a, Mos67]。

まず条件：

$$\det \left(\frac{\partial^2 H_0}{\partial J_0^i \partial J_0^j} \right) \neq 0, \quad (2.70)$$

を要請する。これは Poincaré の定理の節で扱った非退化条件であり、作用変数ベクトルで指定されるトーラスを周波数ベクトルで特徴付けるための条件である。この

条件の下, すべての整数ベクトル \mathbf{n} に対し, 適当な正の数 C, μ に対してディオファンティン条件

$$|\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\omega}_0| \geq C |\mathbf{n}|^{-\mu}, \quad |\mathbf{n}| = \sum_{i=1}^N |n_i|, \quad (2.71)$$

が成立している場合, 無限回のカノニカル変換が可能で, 次々と摂動パラメタ ϵ の高次項を排除してゆき, その結果極限的なハミルトニアンが作用変数のみで表現できるとした。すなわち小さな摂動を受けた系でもなお, 可積分系的な準周期運動 (トーラス) の「ほとんど」が残存することが証明された。摂動展開の収束条件は他にも次のように書かれることもある。簡単のため 2 自由度の場合の表現を用いる。条件:

$$\text{すべての整数 } r, s \text{ に対して} \quad \left| \frac{\omega_1}{\omega_2} - \frac{r}{s} \right| > \frac{K(\epsilon)}{s^{2.5}} \quad (\epsilon \rightarrow 0 \text{ で } K(\epsilon) \rightarrow 0), \quad (2.72)$$

が満たされるトーラスは摂動によって破壊されずに残る。この条件は, 二つの周波数比 ω_1/ω_2 が無理比であるとき, これを有理数でどの程度の精度まで近似することができるかという問題と関連する。「無理数性」が強い場合, すなわち無理数を有理数近似したときにその誤差が (2.72) のように $K(\epsilon)/s^{2.5}$ よりも大きくなるようなトーラスは摂動に耐えて生き残る。一方, 「有理数に近い無理数」, すなわち

$$\left| \frac{\omega_1}{\omega_2} - \frac{r}{s} \right| < \frac{K(\epsilon)}{s^{2.5}}, \quad (2.73)$$

となるような周波数も持つ無理数トーラスは摂動によって破壊される。

以上の KAM 理論の帰結は, 摂動系においても広い範囲で摂動に耐えたトーラス (準周期運動) が生き残っており, 可積分系と同様の性質が引き継がれている場合が多いことを示唆している。

2.5 Poincaré の定理, 摂動による第一積分たちの消失

力学系の不安定性は, その系の保存量の個数と密接に関連している。一般に, 系の自由度と同じ数の保存量 (包含系をなす独立な第一積分) が存在する場合, 積分法によって解析解を求めることができるが, 保存量の数が系の自由度よりも少ない場合は解析解を得ることができない。

ミクロカノニカル統計力学は, エネルギーを一定とするようなアンサンブルを扱い, 孤立系の力学発展が, 相空間の等エネルギー超曲面上の全域で平等におこなわれることを要請する。孤立系において全系のエネルギーは保存量であるが, 仮にこれとは別に独立な保存量が存在したとすると, 等エネルギー面はその保存量の表式が定める面によって分割され, 運動可能領域は等エネルギー面上よりも狭められてしまう。すなわち, ミクロカノニカルアンサンブルを生成するような力学系はエネルギー以外の保存量を持つてはならない。すなわち, 力学系の非可積分性が統計力学的描像が成立させると考えられる。

たとえば, N 個の質点からなる調和振動子系は, N 個の独立な保存量

$$\Phi_1 = J_1 \omega_1, \quad \Phi_2 = J_2 \omega_2, \quad \dots, \quad \Phi_k = J_N \omega_N, \quad (2.74)$$

を持つ。 J_k は作用変数, ω_k は角度変数の 1 階時間微分 $\dot{\theta}_k$ である。じつはこの保存量 $J_k\omega_k$ は, 各基準振動のエネルギーである。このような系はマイクロカノニカル統計に従う力学系の例にはならない。この系に初期に与えられた各 Φ_k が保存されるということは, 初期の基準振動へのエネルギー分配の状況が未来永劫持続することに対応する。

通常, 統計力学の基本問題に取りかかろうとするとき, 系には非線形性が導入されるが, これは, 全系のエネルギーを唯一の保存量とし, それ以外の保存量が不在となるような力学系を構成するためである。1950 年代に行われた Fermi, Pasta, Ulam の実験 (非線形格子振動系の緩和ダイナミクスに関する数値実験) に代表されるようなこのような姿勢の根底には, 以下に示す Poincaré の定理があったと言える。

Poincaré の定理は, 可積分系に摂動が添加された系において, ハミルトニアン以外に (包含系をなす独立な) 第一積分が存在しない [Poi92] ことを示した定理である。

以下, Poincaré の定理を証明する。

いま, 可積分系ハミルトニアン H_0 に対して ϵ を摂動強度パラメタ (きわめて小さい) とした摂動が加えられたハミルトン系:

$$H = H_0(\mathbf{J}) + \epsilon H_1(\mathbf{J}, \boldsymbol{\theta}) + \epsilon^2 H_2(\mathbf{J}, \boldsymbol{\theta}) + \dots, \quad (2.75)$$

を考える。 \mathbf{J} , $\boldsymbol{\theta}$ はそれぞれ可積分系に関する作用変数, 角度変数であり, H_1, H_2, \dots は角度変数 $\boldsymbol{\theta}$ について 2π 周期の周期関数であるとする。いま, 非退化条件:

$$\det \left(\frac{\partial^2 H_0}{\partial J_i \partial J_j} \right) \neq 0, \quad (2.76)$$

を課す。この条件は可積分系ハミルトニアン H_0 のヘシアンが恒等的に non-zero であることを示す。いま振動数 ω_i が

$$\omega_i = \frac{\partial H_0}{\partial J_i}, \quad (2.77)$$

と定義されることから, 非退化条件 (2.76) は,

$$\det \left(\frac{\partial \omega_i}{\partial J_j} \right) \neq 0, \quad (2.78)$$

と書き改められる。これは可積分系において作用変数の組 (J_1, J_2, \dots, J_N) で指定されるそれぞれのトーラスを, 異なる振動数で特徴付けられることを意味する。

以上の条件のもとで, (2.75) 系に

$$\Phi = \Phi_0(\mathbf{J}, \boldsymbol{\theta}) + \epsilon \Phi_1(\mathbf{J}, \boldsymbol{\theta}) + \epsilon^2 \Phi_2(\mathbf{J}, \boldsymbol{\theta}) + \dots, \quad (2.79)$$

なる形式の第一積分が存在しないことを示す。

証明スキームは, (2.79) なる保存量の存在を仮定した上で次の通りおこなわれる。

- (i) Φ_0 が角度変数 $\boldsymbol{\theta}$ を含まず, 作用変数のみによって $\Phi_0 = \Phi_0(\mathbf{J})$ と書けることの証明

- (ii) Φ_0 は可積分系ハミルトニアン H_0 のみの関数 $\Phi_0 = \Phi_0(H_0)$ となることの証明
 (iii) 摂動系で仮定した第一積分 Φ は摂動ハミルトニアン H だけの関数であり、ハミルトニアンと包含系をなす独立な保存量にはなりえないことの証明

なお、以下、簡単のため自由度 2 の場合の証明を示す。 Φ が第一積分となる条件はハミルトニアンとのポアソン括弧が消えることである。すなわち、

$$\{\Phi, H\} = 0, \quad (2.80)$$

$$\therefore \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \theta_i} \frac{\partial H}{\partial J_i} - \frac{\partial \Phi}{\partial J_i} \frac{\partial H}{\partial \theta_i} \right) = 0. \quad (2.81)$$

ここに展開形式の (2.75), (2.79) を用いてさらに ϵ の次数に関して整理すれば

$$\{H_0, \Phi_0\} + \epsilon \left[\{H_0, \Phi_1\} + \{H_1, \Phi_0\} \right] + \epsilon^2 \left[\{H_0, \Phi_2\} + \{H_1, \Phi_1\} + \{H_2, \Phi_0\} \right] + \dots = 0, \quad (2.82)$$

となる。これが任意の (十分に小さな) 摂動パラメタ ϵ について恒等式として成立するためには、各 ϵ^n の係数がすべてゼロとなる必要がある。したがって、少なくとも

$$\{H_0, \Phi_0\} = 0, \quad (2.83)$$

$$\{H_0, \Phi_1\} + \{H_1, \Phi_0\} = 0, \quad (2.84)$$

は成立していなくてはならない。

- (i) $\Phi_0 \neq \Phi_0(\boldsymbol{\theta})$, $\Phi_0 = \Phi_0(\mathbf{I})$ の証明

Φ_0 を角度変数 $\boldsymbol{\theta}$ についてフーリエ級数展開すると、

$$\Phi_0 = \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{J}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta})}, \quad (2.85)$$

と書ける。いま、特に 2 自由度を考えているので、整数ベクトル: $\mathbf{k} = (k_1, k_2)$, 角度変数ベクトル: $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2)$ であり、 $(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta}) = k_1 \theta_1 + k_2 \theta_2$ である。この表式のもとで、 Φ が第一積分であるための第一の条件 (2.83) は

$$\sum_{\mathbf{k}} \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\partial H_0}{\partial \mathbf{J}_i} \right) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{J}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta})} = 0, \quad (2.86)$$

となる。これは恒等的に成立すべきであるから、すべての整数ベクトル \mathbf{k} に対して

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{J}) = 0 \quad \text{or} \quad \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\partial H_0}{\partial \mathbf{J}_i} \right) = 0, \quad (2.87)$$

となる。いま、ある整数ベクトル \mathbf{k} で後者が成立していたとすると、

$$\left(\mathbf{k} \cdot \frac{\partial H_0}{\partial \mathbf{J}_i} \right) = 0 \quad \therefore \sum_{j=1}^2 k_j \frac{\partial H_0}{\partial J_j} = 0, \quad (2.88)$$

である。さらに J_i で偏微分して

$$\sum_{j=1}^2 \frac{\partial^2 H_0}{\partial J_i \partial J_j} k_j = 0, \quad (2.89)$$

を得る。これは整数ベクトル \mathbf{k} を未知数とする連立1次方程式である。ここで冒頭に仮定した非退化条件 (2.76) により、係数行列式は non-zero であるから、 $\mathbf{k} = 0$ のみが解となる。したがって、整数ベクトルが零ベクトルでないフーリエ係数は消え、

$$\phi_{\mathbf{k} \neq 0}(J) = 0, \quad \phi_0(J) \neq 0, \quad (2.90)$$

となり、したがって

$$\Phi_0 = \phi_0(\mathbf{J}), \quad (2.91)$$

が導かれる。以上から、 Φ_0 が角度変数 θ によらず、作用変数 \mathbf{J} のみを含むことが証明された。

(ii) $\Phi_0 = \varphi_0(H_0)$ の証明

仮定したハミルトニアンおよび第一積分の ϵ の1乗の係数 H_1, Φ_1 を (i) と同様にフーリエ級数展開すると、

$$H_1 = \sum_{\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{J}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \theta)}, \quad (2.92)$$

$$\Phi_1 = \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{J}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \theta)}, \quad (2.93)$$

となる。この表式のもとで、 Φ が第一積分であるための第二の条件 (2.84) が恒等的に成立することは

$$\left(\mathbf{k} \cdot \frac{\partial H_0}{\partial \mathbf{J}} \right) \phi_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{J}) = \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\partial \Phi_0}{\partial \mathbf{J}} \right) h_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{J}), \quad (2.94)$$

と書くことができる。いま、関数 H_1 に対して散逸性の条件とよばれる条件を課す。

散逸性の条件 [YO94][Pri62]

$(\mathbf{k} \cdot \partial H_0 / \partial \mathbf{J}) = 0$ を満足するような作用変数ベクトル $\mathbf{J} = (J_1, J_2)$ 上で、無限個の異なる整数ベクトル \mathbf{k} を添字としてもつ H_1 のフーリエ展開係数 $h_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{J})$ が、恒等的に $h_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{J}) \neq 0$ である。ただし、互いに平行な整数ベクトルは1つの整数ベクトルとしてみなす。

いま、散逸性の条件を満足するような或る整数ベクトル \mathbf{k} を考える。散逸性の条件より、 $(\mathbf{k} \cdot \partial H_0 / \partial \mathbf{J}) = 0$ となるような作用変数集合上で恒等的にフーリ

展開係数 $h_k^{(1)}$ が non-zero であるから, (2.94) より, 同一の集合上において $(\mathbf{k} \cdot \partial \Phi_0 / \partial \mathbf{J}) = 0$ とならなければならない。すなわち,

$$\left(\mathbf{k} \cdot \frac{\partial \mathbf{H}_0}{\partial \mathbf{J}} \right) = \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\partial \Phi_0}{\partial \mathbf{J}} \right) = 0. \quad (2.95)$$

したがって, 2つのベクトル $(\partial \mathbf{H}_0 / \partial \mathbf{J})$ と $(\partial \Phi_0 / \partial \mathbf{J})$ はそれぞれ整数ベクトル \mathbf{k} に垂直であるから 1次従属なベクトルであることが言える。したがって, $(\mathbf{k} \cdot \partial \mathbf{H}_0 / \partial \mathbf{J}) = 0$ となるような作用変数集合上でヤコビアンがゼロ:

$$\frac{\partial (\Phi_0, H_0)}{\partial (J_1, J_2)} = 0, \quad (2.96)$$

となる。このような状況を実現するような整数ベクトル \mathbf{k} は無数に存在するので, 上式は恒等式として 0 となる。したがって, Φ_0 は可積分系ハミルトニアン H_0 のみの関数として表現できる:

$$\Phi_0 = \varphi(H_0). \quad (2.97)$$

(iii) $\Phi = \Phi(H)$ の証明

関数: $f = \Phi - \varphi(H)$ を考える。いま仮定より, Φ と H はともに摂動ハミルトン系の第一積分であるから, 関数 f もまた第一積分である。非摂動系 $\epsilon = 0$ を考えると, (2.97) より $f = \Phi_0 - \varphi(H_0) = 0$ となることから, f は ϵ を因数として含んでおり,

$$f = \Phi - \varphi(H) = \epsilon \Phi', \quad (2.98)$$

と表現することができる。ここで導入した Φ' もまた摂動ハミルトン系の第一積分である。ハミルトニアン H も, 仮定した第一積分 Φ も摂動強度パラメタによる展開が可能であると仮定しているから, Φ' も同様に

$$\Phi = \Phi'_0 + \epsilon \Phi'_1 + \epsilon^2 \Phi'_2 + \dots, \quad (2.99)$$

という展開形式をもつ。ここで証明 (i), (ii) と同様の議論をおこなえば, 最終的に (2.97) と同様に

$$\Phi'_0 = \varphi'(H_0), \quad (2.100)$$

という帰結に到達できる。さらに先に冒頭で導入した関数 f と同様に

$$f' = \Phi' - \varphi'(H) = \epsilon \Phi''. \quad (2.101)$$

$$f'' = \Phi'' - \varphi''(H) = \epsilon \Phi''', \quad (2.102)$$

.....

と次々に定義してゆくことができる。これらを用いて最初に存在を仮定した第一積分 Φ を表現すると, (2.98) から順に

$$\begin{aligned} \Phi &= \varphi(H) + \epsilon \Phi' \\ &= \varphi(H) + \epsilon \{ \varphi'(H) + \epsilon \Phi'' \} \\ &= \varphi(H) + \epsilon \varphi'(H) + \epsilon^2 \{ \varphi''(H) + \epsilon \Phi''' \} \\ &= \varphi(H) + \epsilon \varphi'(H) + \epsilon^2 \varphi''(H) + \epsilon^3 \dots, \end{aligned} \quad (2.103)$$

となり、 ϕ はハミルトニアン H のみの関数として表現されてしまう。すなわち、この摂動系では、ハミルトニアンと包含系をなす独立な第一積分は存在しないと言える。(証明終) ■

2.5.1 Poincaré の定理は、統計力学を後押しするか？

Poincaré の定理の帰結は、一見すると、可積分系に非線形性（摂動）を加えた場合に系からエネルギー以外の保存量が消失し、結果としてミクロカノニカル分布に従う運動が起きることを意味するように見える。しかし、この定理は、「摂動強度パラメタ ϵ に関して解析的な第一積分は、エネルギー以外には存在しないこと」を証明したものであり、第一積分の表式が「非常にもっともらしい」場合に限りて成立する定理といえる。

たとえば、まったく別のクラスの保存量、すなわち摂動パラメタに対して解析的でない保存量や、ある特定の摂動強度のもとで突如現れる保存量などによってエルゴード性や混合性が妨げられる可能性等については言及していない。その意味で、この Poincaré の定理は、相空間の混合性を背景とした統計力学の理論的妥当性を後押しするものではない。この定理の主張を超えて、エルゴード性や混合性を検証・考察することが Fermi, Pasta, Ulam (FPU) らの数値実験のモチベーションであったと言え、これは今日の Hamilton 力学系の研究にも受け継がれている。

FPU らの数値実験をはじめとして、非線形系においてなおも可積分系的な振る舞いが残る例が次々と発見され、今日では Poincaré の定理の特殊性が広く知られている。

2.6 相空間構造を覗く

2.6.1 Poincaré 断面の方法

V. I. Arnold がその著書 [Arn81] の中で指摘している通り、Hamilton 系の力学は相空間の幾何学である。その意味で相空間構造を直接観察することは重要であり、その可視化手段として Poincaré 断面の方法が挙げられる。 N 自由度力学系の場合、軌道は $2N$ 次元の相空間上を運動する。Hamilton 系の場合にはエネルギー保存の拘束条件から軌道は $2N - 1$ 次元の領域に制限される。ここにさらに次元を 1 次元減少させるための“スクリーン”を導入し、軌道とスクリーン交点を点列として写像化する。ただし点列を記録する際には、通過の向きは、「裏から表」、「表から裏」のどちらか一方に固定するものとする。この「軌道の断面」を Poincaré surface of section Σ 、記録される点列を Poincaré 写像 \mathcal{F}_P と呼ぶ。例えば 2 自由度 Hamilton 系の場合、4 次元の相空間、3 次元のエネルギー曲面、2 次元の Poincaré surface of section (図 2.5) となる。

ある 2 次元トーラス上に初期点を取った場合を考える。トーラスが無理数比の周波数を持つのであれば、軌道は閉じることなく稠密にトーラス表面を埋め尽くす

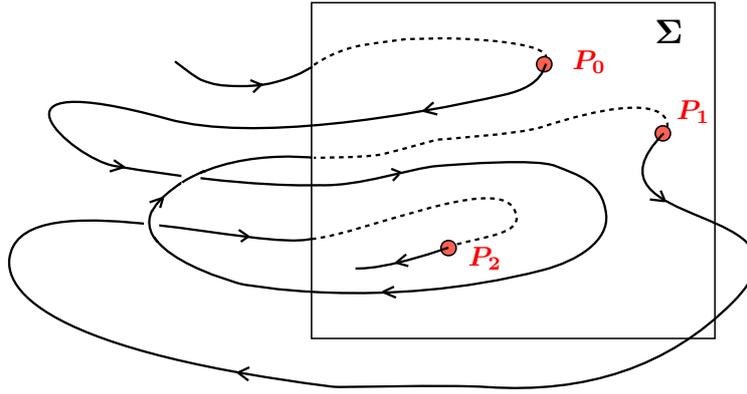


図 2.5: Poincaré surface of section Σ に Poincaré 写像による点列 P_0, P_1, P_2, \dots が記録される。図の場合、軌道が断面を「裏から表に向けて」通過するときだけ点列を取ることにしている。

め、Poincaré 断面上には欠損のない閉曲線が描かれる。これは丁度、トーラスの断面に相当している。一方でトーラスの周波数が有理数である場合（これを共鳴トーラスという）は、軌道が有限回の回転ののちに閉じるため、トーラスは埋め尽くされることなく、それゆえ Poincaré 写像は有限個の点列となる。これらのトーラスが破壊されてカオスが発達する場合は、点列はほとんどランダムな様相を呈する。

特筆すべき点として、Hamilton 相流から生成される Poincaré 写像 \mathcal{F}_P は元の力学系同様にシンプレクティック性を持つ：

$$\mathcal{F}_P : [\mathbf{p}(\tau^j), \mathbf{q}(\tau^j)] \mapsto [\mathbf{p}(\tau^{j+1}), \mathbf{q}(\tau^{j+1})]. \quad (2.104)$$

$$\sum_{i=1}^N dq_i(\tau) \wedge dp_i(\tau) = \sum_{i=1}^N dq_i(0) \wedge dp_i(0). \quad (2.105)$$

Poincaré 写像はそのシンプレクティック性から、面積保存写像 (area-preserving map) である。ただし断面 Σ から再び Σ まで到達するまでの時間間隔 $\tau^{j+1} - \tau^j$ は必ずしも一定である必要はない。

2.6.2 面積保存写像, ツイスト写像

$(2N - 2)$ 次元の面積保存写像は、ある N 自由度 Hamilton 系の Poincaré 写像であると解釈できる。写像化されたシステムは微分方程式系に比べて非常に解析しやすく、非可積分な Hamilton 系の性質を抽出するために有用な解析対象となる。

いま簡単のため 2 自由度系を考える。これまで見てきたように、可積分系の軌道は相空間内でトーラス上に乗る。2 つの角変数は次のように時間に比例して発展する。

$$\theta_1(t) = \omega_1 t + \theta_1(0), \quad \theta_2(t) = \omega_2 t + \theta_2(0). \quad (2.106)$$

いま T_2 を θ_2 の 1 周期 $T_2 = 2\pi/\omega_2$ とする。 θ_2 が 1 回転するとき、 θ_1 は

$$\theta_1(t + T_2) = \theta_1(t) + \omega_1 T_2 = \theta_1(t) + 2\pi \left(\frac{\omega_1}{\omega_2} \right) = \theta_1(t) + 2\pi\gamma(J_1), \quad (2.107)$$

となる。 $\gamma = \omega_1/\omega_2$ は回転数 (rotation number) と呼ばれる。 $H = H(J_1, J_2) = E$, $J_2 = J_2(J_1, E)$ より γ は J_1 のみの関数である。いまトーラスに対して、図 2.6 のように J_1, θ_1 平面で Poincaré 断面を取ると、

$$X_i = (J_1, \theta_1(t + iT_2)), \quad (2.108)$$

と表される軌道が断面の点列となる。Poincaré 断面を張る座標として新たに極座標

$$r_i = J_1, \quad \theta_i = \theta(t + iT_2), \quad (2.109)$$

を導入する。断面上の点列 $X_i = X_i(r, \theta)$ はツイスト写像

$$\mathcal{T}: \begin{cases} r_{i+1} = r_i \\ \theta_{i+1} = \theta_i + 2\pi\gamma(r_i) \end{cases}, \quad (2.110)$$

となる。回転数 γ が無理数比の場合、軌道はトーラス上を覆いつくし、Poincaré 断面上には連続的な閉曲線が描かれる。一方、 γ が有理数比となる共鳴トーラスでは有限個の離散的な点列が生成される。可積分系のトーラスの断面は、 (r, θ) 空間においていくつか同心円を形成し、点列はそのひとつの円上を回転移動する。

ここで回転数 $\gamma(r)$ は r に対してなめらかな関数であり、ツイスト条件：

$$\frac{d\gamma(r)}{dr} \neq 0, \quad (2.111)$$

を満足するものとする。この条件から、半径 r , すなわち作用変数 J_1 によって写像の回転速度は異なってくる。このため剛体回転的な運動ではなく、内側の円周と外側の円周でねじれ (twist) が生じる (図 2.7) こととなり、この特徴から (2.110) はツイスト写像と呼ばれる。またツイスト写像は、保測条件

$$\frac{\partial(r_{i+1}, \theta_{i+1})}{\partial(r_i, \theta_i)} = 1, \quad (2.112)$$

を満たす。

2.6.3 不動点とその安定性

ある写像 \mathcal{S} に対する不動点 X^* とは写像に対して不変となる点

$$\mathcal{S}X^* = X^*, \quad (2.113)$$

をいう。いま写像 \mathcal{S} を：

$$\mathbf{X}_{i+1} = \mathcal{S}(\mathbf{X}_i), \quad (2.114)$$

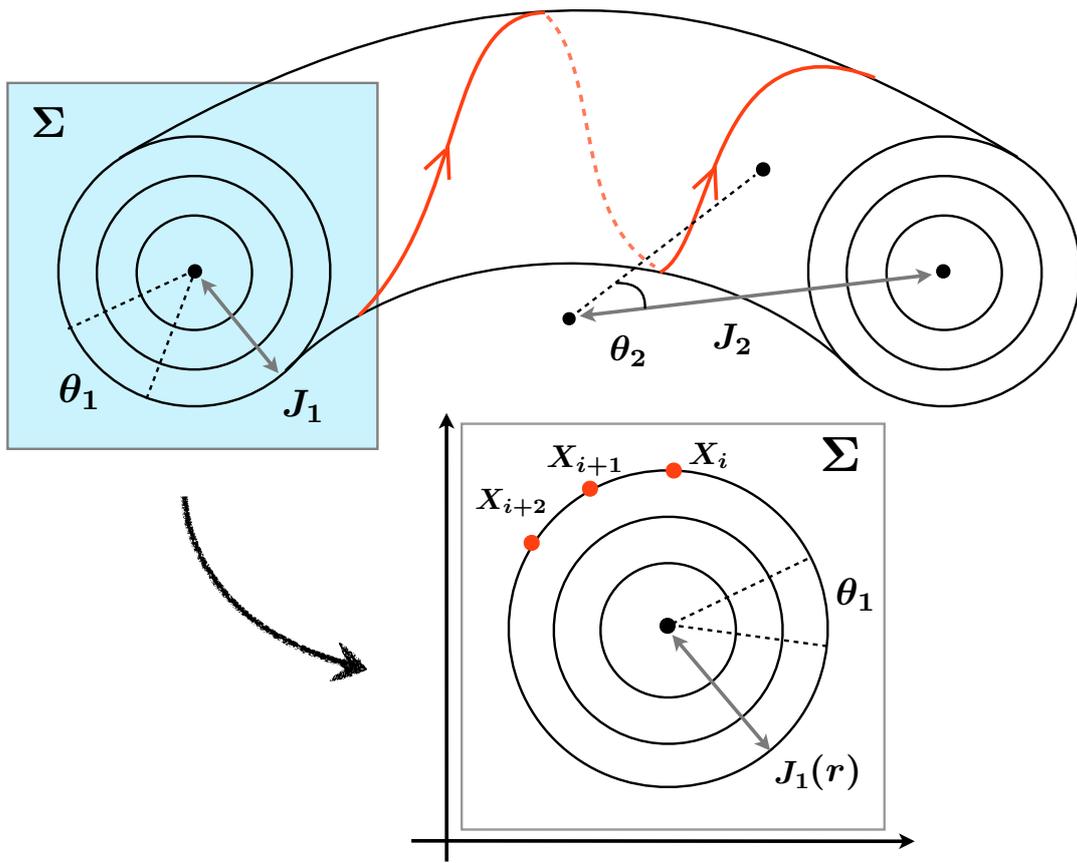


図 2.6: 2次元トーラスにおいて取られた Poincaré surface of section Σ 。

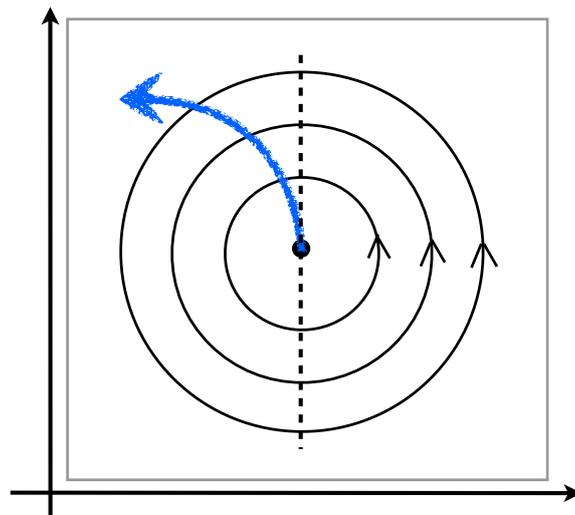


図 2.7: ツイスト写像はその名の通り，“ねじれ”ている。

とする。ここで簡単のため $\mathbf{X}_{i+1} = (x_{i+1}, y_{i+1})$, $\mathcal{S}(\mathbf{X}_i) = (f(x_i, y_i), g(x_i, y_i))$ とする。また、ここで写像 \mathcal{S} に関する不動点を $(x^*, y^*) = (0, 0)$ としても議論の一般性を失わない。不動点 (x^*, y^*) まわりで線形化された変分方程式を取ると、

$$\begin{bmatrix} \delta x_{i+1} \\ \delta y_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \partial f/\partial x & \partial f/\partial y \\ \partial g/\partial x & \partial g/\partial y \end{bmatrix} \Big|_{(x^*, y^*)} \begin{bmatrix} \delta x_{i+1} \\ \delta y_{i+1} \end{bmatrix} \quad (2.115)$$

$$= \mathbf{DS}(x^*, y^*) \begin{bmatrix} \delta x_{i+1} \\ \delta y_{i+1} \end{bmatrix}, \quad (2.116)$$

となる。この接空間写像に対して線形安定性解析を行うと、変分方程式は対角化され

$$\begin{bmatrix} \xi_{i+1} \\ \eta_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_i \\ \eta_i \end{bmatrix}. \quad (2.117)$$

この結果、ヤコビ行列 \mathbf{DS} の固有値 λ_1, λ_2 から原点付近の相流は3つのパターンに分類される。

(複素共役) $\lambda_1 = \exp(ia), \lambda_2 = \exp(-ia)$: 不動点は楕円型不動点となる。(図 2.8 左)

(共に実数) $\lambda_2 = 1/\lambda_1$: 不動点は双曲型不動点となる。(図 2.8 右)

(重解) $\lambda_1 = \lambda_2 = \pm 1$: 不動点は放物型不動点となる。

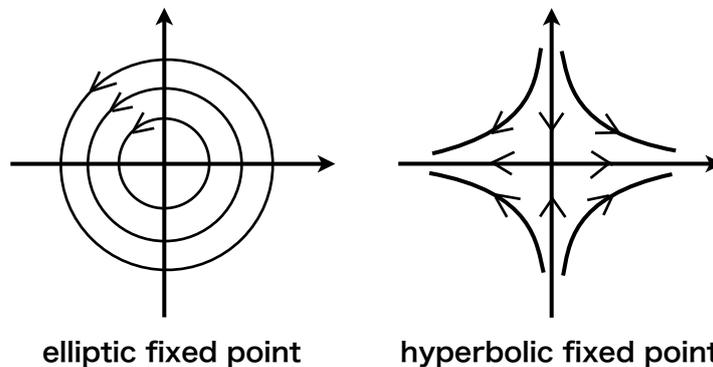


図 2.8: 楕円型不動点と双曲的不動点

2.7 相空間の階層構造

2.7.1 摂動されたツイスト写像, Poincaré-Birkhoff の不動点定理

いま, 2.6.2 で導入したツイスト写像をわずかに摂動する場合, すなわち 2 自由度摂動ツイスト写像:

$$\mathcal{T}_\epsilon: \begin{cases} r_{i+1} = r_i + \epsilon f(r_i, \theta_i) \\ \theta_{i+1} = \theta_i + 2\pi\gamma(r_i) + \epsilon g(r_i, \theta_i) \end{cases}, \quad (2.118)$$

を考える。ツイスト写像 (2.110) は 2 自由度の Hamilton 力学系

$$J' = J, \quad (2.119)$$

$$\theta' = \theta + \frac{\partial}{\partial J'} S_0(J'), \quad (2.120)$$

と関連づけられ,

$$\frac{\partial S_0}{\partial J} = 2\pi \frac{\omega_1}{\omega_2} = 2\pi\gamma, \quad (2.121)$$

と対応する。さらに摂動ツイスト写像 2.118 は

$$J' = J + \epsilon \frac{\partial}{\partial \theta} S_1(J, \theta). \quad (2.122)$$

$$\theta' = \theta + \frac{\partial}{\partial J'} S_0(J') + \epsilon \frac{\partial}{\partial J'} S_1(J', \theta), \quad (2.123)$$

と同類と見なすことができる。ここで非摂動ツイスト写像と同様にツイスト条件 (2.111) および面積保存 (2.112) が満たされているとする。2.4.4 で前述した Kolmogorov-Arnold-Moser の理論によれば, 非摂動系において無理数比の振動数をもつトーラスは, 加えられた摂動によってわずかに変形されるにとどまり, その準周期性軌道は不変に保たれる。では, 有理数比の振動数をもつ共鳴トーラスは摂動によってどのような変更を受けるだろうか。

いま, 有理数比の回転数

$$\gamma(\mathbf{J}) = \frac{\omega_1}{\omega_2} = \frac{m}{n} \quad (n, m \text{ は互いに素な整数}), \quad (2.124)$$

をもつ共鳴トーラスが Poincaré 断面上に映し出す曲線を \mathcal{C} とする。ツイスト条件 (2.111) から, $\gamma = \gamma(\mathbf{J})$ は \mathbf{J} の増加に対してなめらかにその値を増加させるとする。この共鳴トーラス \mathcal{C} を挟む 2 つの閉曲線 \mathcal{C}_+ , \mathcal{C}_- を考える (図 2.9 左)。ただし, \mathcal{C}_+ は \mathcal{C} よりも大きな回転数をもつトーラスで, \mathcal{C}_- は \mathcal{C} よりも小さな回転数をもつトーラスであるとする:

$$\mathcal{C}^+ : \gamma > \frac{m}{n}, \quad \mathcal{C}^- : \gamma < \frac{m}{n}. \quad (2.125)$$

共鳴トーラス \mathcal{C} は回転数 (2.124) を持つため, そのツイスト写像は n 周期の離散的

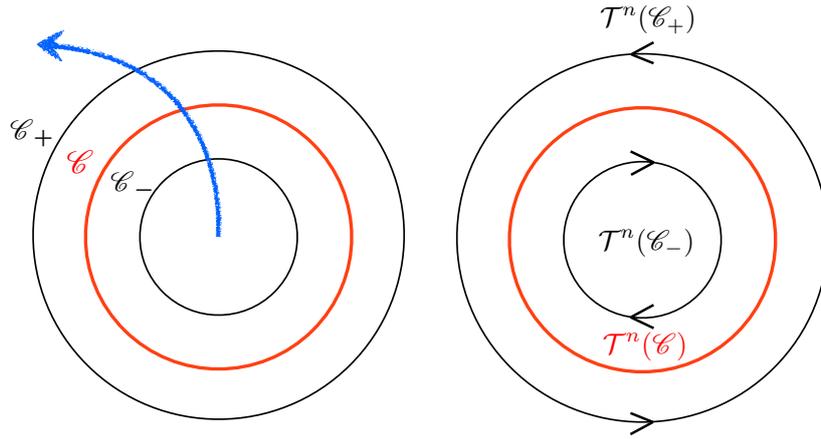


図 2.9: 回転数 m/n を持つ共鳴トーラス \mathcal{C} とそれを挟む \mathcal{C}_+ , \mathcal{C}_- 。 n 回のツイスト写像に対して \mathcal{C} は不動点集合となり, \mathcal{C}_+ は左に回転, \mathcal{C}_- は右に回転する。

な点列を生成する。ここで \mathcal{C} に対するツイスト n 回写像 \mathcal{T}^n を考えると,

$$\begin{bmatrix} J \\ \theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} J \\ \theta + n \left(\frac{\partial S_0}{\partial J} \right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} J \\ \theta + n \cdot (2\pi \frac{m}{n}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} J \\ \theta + 2\pi m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} J \\ \theta \end{bmatrix}, \quad (2.126)$$

となり, \mathcal{C} は \mathcal{T}^n の不動点となることが分かる。また, $\mathcal{T}^n(\mathcal{C}^+)$ は反時計回りに, 一方 $\mathcal{T}^n(\mathcal{C}^-)$ は時計回りに回転する (図 2.9 右)。ここで, 摂動ツイスト写像 \mathcal{T}_ϵ^n の下でも, \mathcal{C}^+ と \mathcal{C}^- の相対的なねじれの関係が保持されるとし, 摂動パラメータ ϵ はこれを実現する程度に十分小さいとする。また, 回転数の半径依存性に関して連続性を考慮すると, 2つの閉曲線 $\mathcal{T}_\epsilon^n(\mathcal{C}^+)$ と $\mathcal{T}_\epsilon^n(\mathcal{C}^-)$ の間に回転運動をしない

$$\mathcal{T}_\epsilon^n : (r(\theta), \theta) \rightarrow (r'(\theta), \theta), \quad (2.127)$$

なる点を想定することができる。このように写像 \mathcal{T}_ϵ^n によって角度成分が一定に保たれるような点の集合を \mathcal{R} とする (図 2.10)。

写像 \mathcal{T}_ϵ^n の保測性から, \mathcal{R} と $\mathcal{T}_\epsilon^n \mathcal{R}$ は原点を囲んで同じ面積を持ち, かつ, \mathcal{R} 上の点は半径方向にのみ写され, 角度方向には写されない。この不動点集合 \mathcal{R} の写像のされ方は, 幾何学的制約からあるクラスのみに限られる。すなわち, \mathcal{R} とその像 \mathcal{T}_ϵ^n は偶数個の交点しか持ち得ず, さらにこの偶数個の交点はすべて \mathcal{T}_ϵ^n の不動点である。写像 \mathcal{T}_ϵ^n が不動点をもつならばそれらは必ず \mathcal{R} 上になければならず, したがって写像 \mathcal{T}_ϵ^n は偶数個の不動点を持つ (図 2.11 左)。

さらに, 不動点の個数の n 依存性を考える。 \mathcal{R} とその像 $\mathcal{T}_\epsilon^n \mathcal{R}$ のとある交点を (r_0, θ_0) とする。これは \mathcal{T}_ϵ^n の不動点であるから

$$\mathcal{T}_\epsilon^n(r_0, \theta_0) = (r_0, \theta_0), \quad (2.128)$$

である, したがって

$$\mathcal{T}_\epsilon^{n+l}(r_0, \theta_0) = \mathcal{T}_\epsilon^l(r_0, \theta_0) \quad (l = 0, 1, \dots), \quad (2.129)$$

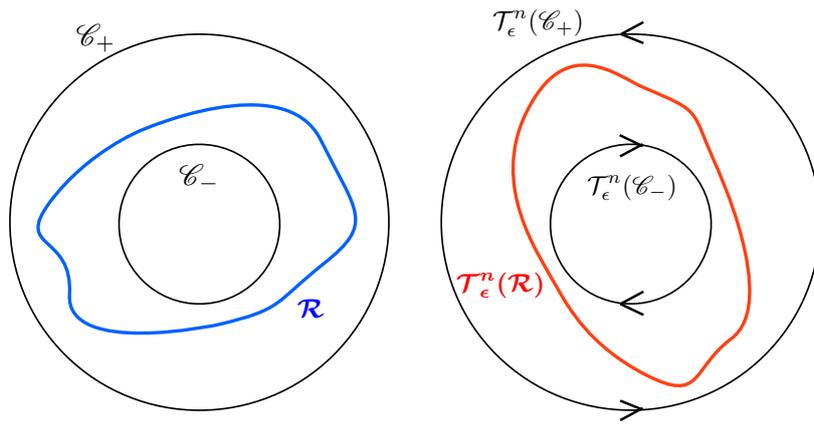


図 2.10: 摂動ツイスト写像に対して, 角度成分が不変となるような集合 \mathcal{R} が \mathcal{C}_+ と \mathcal{C}_- の間に見つかる。

であることから, n 回写像に満たない点

$$\mathcal{T}_\epsilon^1(r_0, \theta_0), \mathcal{T}_\epsilon^2(r_0, \theta_0), \dots, \mathcal{T}_\epsilon^{n-1}(r_0, \theta_0), \quad (2.130)$$

もまた \mathcal{T}_ϵ^n の相異なる不動点である。ゆえに, \mathcal{R} 上には \mathcal{T}_ϵ^n の不動点が n 個存在する。不動点が偶数個存在しているという先の主張から, \mathcal{T}_ϵ^n の不動点は $2nk$ ($k = 1, 2, \dots$) 個存在することが分かる (Poincaré-Birkhoff の定理)。さらに相流の様子から, この $2nk$ 個の不動点は nk 個の楕円型不動点と nk 個の双曲型不動点からなり, それらは交互に配置されることが分かる (図 2.11 右)。

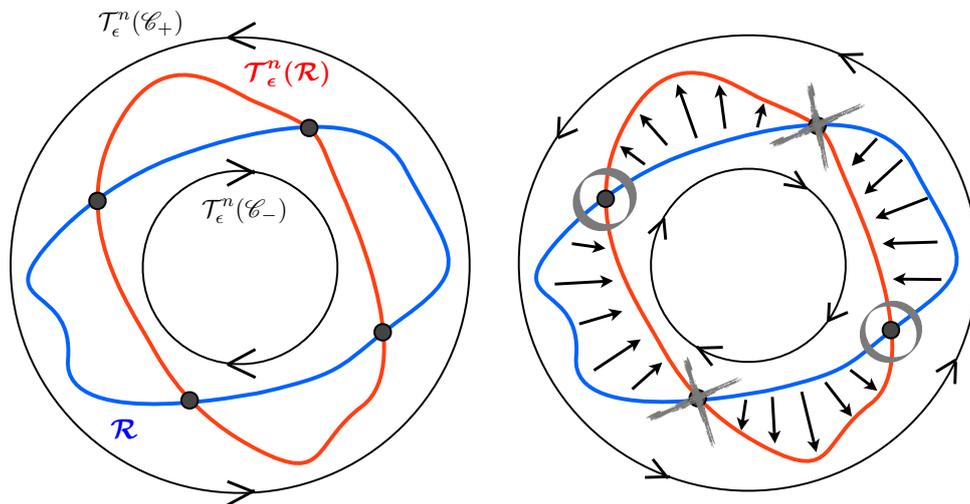


図 2.11: 写像 \mathcal{T}_ϵ^n はその幾何学的制約から偶数個の不動点を持ち, さらにそれらは楕円型と双曲型が交互に並ぶパターンを形成する。図中の \circ 印は楕円型不動点, \times 印は双曲型不動点を表している。

2.7.2 相空間のフラクタル性

非摂動ツイスト写像 \mathcal{T} (2.110) (すなわち可積分系) の下では、断面上に同心円を形成するトーラスは、その振動数が有理数比であるか無理数であるかに関わらず不変曲線であった。そこに摂動が加わった場合 \mathcal{T}_ϵ (2.118) には、KAM 理論 2.4.4 により、非摂動状態において無理数比の回転数 γ を持つトーラスは、摂動の印加にも関わらず依然として保持される。一方、有理数比を持つ共鳴トーラスは摂動によって破壊され、そこには楕円型不動点と双曲型不動点が交互に並ぶ構造が残されることが Poincaré-Birkhoff の定理によって明らかにされた。

いま、共鳴トーラスの残骸である楕円型不動点および双曲型不動点近傍での力学的特性に着目する。双曲型不動点近傍においてはホモクリニック (もしくはヘテロクリニック) 錯綜とよばれる複雑な軌道のもつれが発生することが知られている (詳細は 2.7.3 参照) これはカオスの発生機構となる。ここでは楕円型不動点近傍での挙動を詳細に議論し、相空間が自己相似的な階層構造をもつことを示す。

摂動パラメータ ϵ が十分に小さい状況下で共鳴トーラス崩壊の後に残された 2 次的な楕円型不動点のうちひとつに着目すると、その近傍には KAM 定理によって存在が保証されている不変曲線 (KAM トーラス) がいくつも見つかる。また共鳴トーラスも同様にいくつも見つかり、これらは Poincaré-Birkhoff の定理により破壊されてさらに楕円型-双曲型不動点が交互に列んだ構造を生み出す。このプロセスは高次にわたって微細なスケールにまで展開し、相空間は全体が部分に埋め込まれた階層構造を形作ることが分かる (図 2.12)。このフラクタルな相空間構造によって、Hamilton 系はきわめて多彩な挙動を示し、それらはシンプルな統計性の仮定からは乖離した非自明なものとなる。

2.7.3 カオスの発生機構 - ホモ (ヘテロ) クリニック錯綜

次に双曲型不動点近傍の挙動を議論する。双曲型不動点 x_h^* は、そこから出て行く不安定多様体 \mathcal{W}^u と、入り込んでくる安定多様体 \mathcal{W}^s を持つ。安定多様体 \mathcal{W}^s は双曲型不動点 x_h^* に向かって指数関数的にゆっくり接近し、一方、不安定多様体 \mathcal{W}^u は x_h^* から指数関数的にゆっくり遠ざかる (図 2.13) :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{T}^n x \rightarrow x_h^* \quad (x \in \mathcal{W}^s). \quad (2.131)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{T}^{-n} x \rightarrow x_h^* \quad (x \in \mathcal{W}^u). \quad (2.132)$$

安定・不安定多様体はそれぞれ固有値 $|\lambda| < 1$, $|\lambda| > 1$ をもつような固有ベクトルに接していて、正もしくは負方向の写像の繰り返しによって無限の時間をかけて不動点に流れ込んでゆく多様体である。Hamilton 力学系において安定・不安定多様体が議論される際、その様相については次の 2 種類の場合がしばしば取り上げられる。

ホモクリニック軌道 : 1 個の双曲型不動点 a が安定多様体 \mathcal{W}_a^s と不安定多様体 \mathcal{W}_a^u を共有する。すなわち $\mathcal{W}_a^u = \mathcal{W}_a^s$ となる (図 2.14 左)。

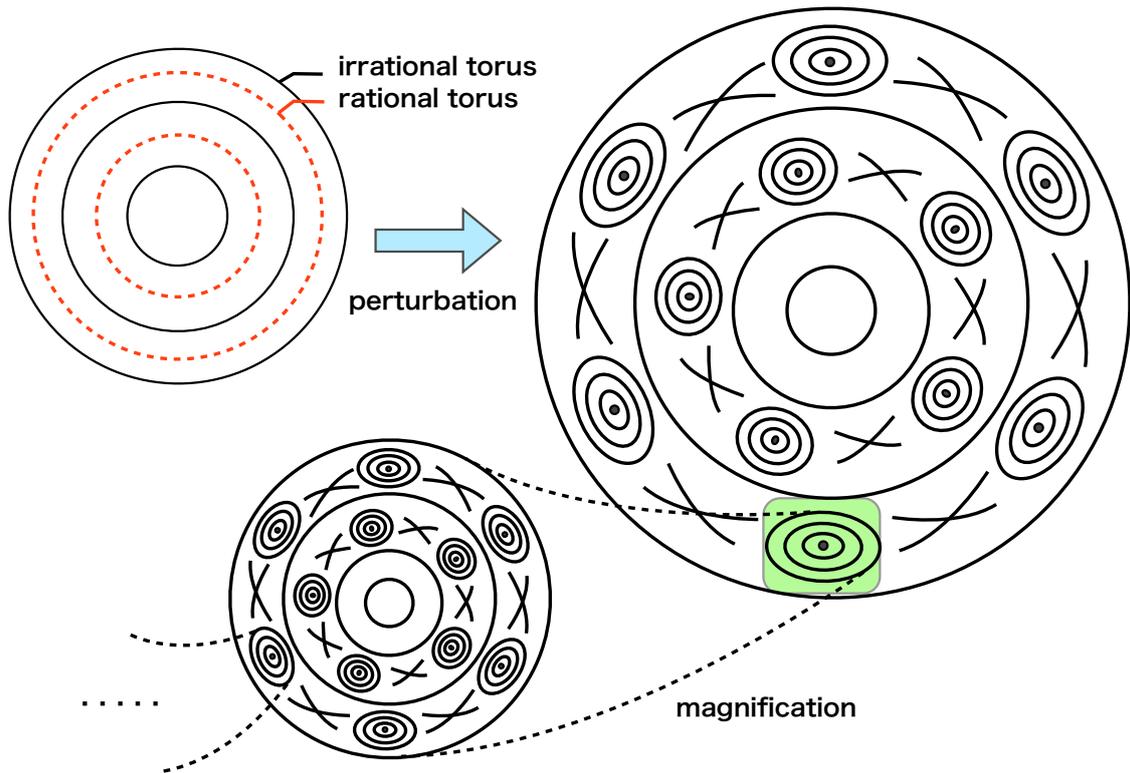


図 2.12: 左上は非摂動系における共鳴トーラス (赤) と非共鳴トーラス (黒) を表している。KAM 理論の主張から、非共鳴トーラスは摂動を受けても保持される。一方、Poincaré-Birkhoff の定理から、共鳴トーラスは摂動に依って破壊され、その跡には楕円型不動点と双曲型不動点が交互に配置される構造が残骸として残される。さらに、この構造は微細なスケールに入り込んでコピーされており、相空間がフラクタル的構造を示す。

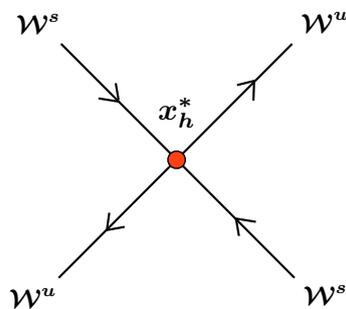


図 2.13: 双曲型不動点には安定多様体と不安定多様体が付随する。

ヘテロクリニック軌道：2個の双曲型不動点 a, b が安定多様体 W_b^s と不安定多様体 W_a^u , および W_a^s と W_b^u を共有する。すなわち $W_a^u = W_b^s$, $W_a^s = W_b^u$ となる (図2.14右)。

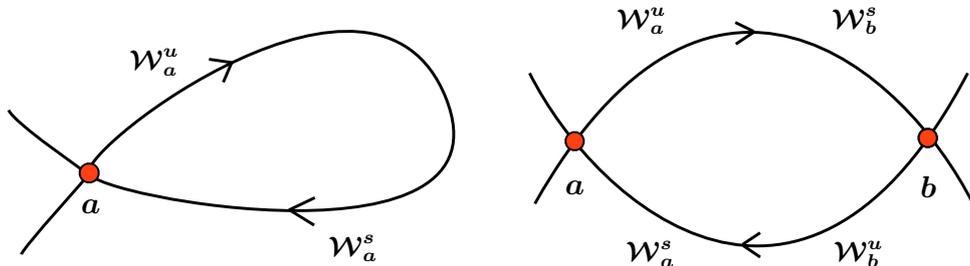


図 2.14: 左：ホモクリニック軌道，右：ヘテロクリニック軌道。図のように安定多様体と不安定多様体が滑らかに接続し2重縮退している状況は，摂動が無い場合の特殊な事情であって，摂動が加わるや否やこの縮退は解けて交差を起しはじめる。

以下，安定多様体と不安定多様体の「交差」に関するいくつかの重要な性質を与える。

2.7.3.1 多様体は自分自身と交差しない

多様体が自分自身と交差している状況を考える。図2.15に記された4つの点 A, B, C, D は写像 \mathcal{T} によってそれぞれ $\mathcal{T}A, \mathcal{T}B, \mathcal{T}C, \mathcal{T}D$ に移される。このとき写像の連続性

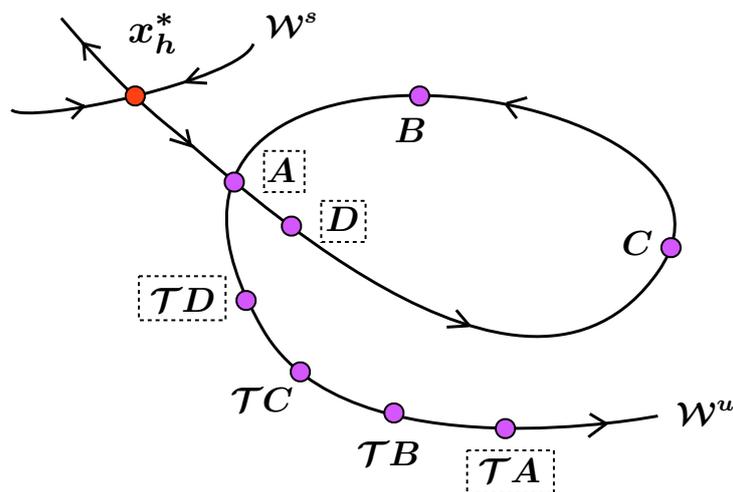


図 2.15: 多様体が自分自身と交わっている状況を図示している。このような状況は写像の連続性の観点から許されない。

を要請すると，点 A, B, C, D の相対的位置関係は写像された点 $\mathcal{T}A, \mathcal{T}B, \mathcal{T}C, \mathcal{T}D$ に

においても保持されていなくてはならず、したがってそれらは図2.15に示した通りの順序となる。さらに同じく連続性により、隣接する点 A, D の写像 TA, TD もまた隣接していなくてはならない。しかしながら、図のように点 A における交差が認められる場合には、これらは両立しない。したがって安定・不安定多様体は自分自身とは交わらないことが導かれる。

2.7.3.2 安定多様体と不安定多様体の交差 - ホモクリニック錯綜 (ヘテロクリニック錯綜)

安定・不安定多様体は自分自身とは交わらないが、これらが互いに交わる状況は許される。実は、図2.14に示したように安定多様体と不安定多様体がなめらかに接続している状況 (2重縮退) というのは非常に特別な場合 (非摂動系) に限られ、一般には (摂動によって) その縮退は解けて、両多様体は交差するようになる。同一の双曲型不動点 a に付随する W^s と W^u が交差する場合、この交差点をホモクリニック点と呼び、異なる2つの不動点 a, b に付随する W^s と W^u が交差するとき、この点をヘテロクリニック点と呼ぶ。以下、ホモクリニック軌道に関して考察するが、そこで結論づけられることは、ヘテロクリニック軌道に対しても同様に成り立つ。

いま、図2.16に示したように、ある双曲型不動点 a があり、これに安定多様体 W_a^s と不安定多様体 W_a^u が付随しており、これらはある点 x で交差しているとする (ホモクリニック点)。この点 x の周囲に2点 x' と x'' を取り、それぞれ W_a^s 上と W_a^u 上

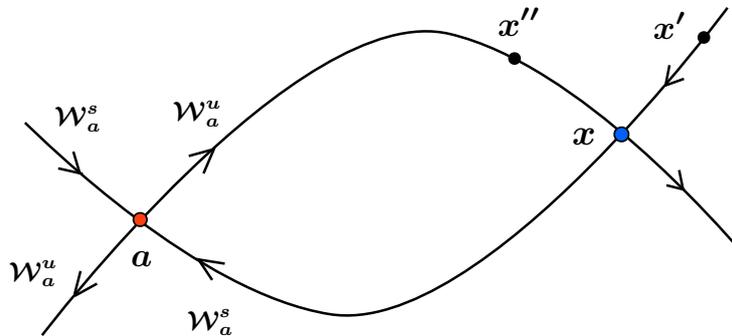


図 2.16: ホモクリニック軌道に対してあるホモクリニック点 (交差点) x があるとする。いま、図のように x 周辺に x' および x'' を取ることにする。

に配置されているものとする。ただしこの2点は相流に乗ってホモクリニック点 x に入る前のものであるとする。 W_a^u 上の点は写像 T によってすべて W_a^u に写され、同様に W_a^s 上の点はすべて W_a^s に写されることに注意すると、点 Tx' および点 Tx'' をそれぞれ W_a^s 上と W_a^u 上に見つけることができる (図2.17)。

ここでホモクリニック点 x の写像 Tx の位置を考える。写像の連続性から、3点 x, x', x'' の相対的な位置関係はこの写像によって保持されなくてはならない。すなわち、 Tx は常に Tx', Tx'' よりも相流前方にいないなくてはならない。この制約を満たす

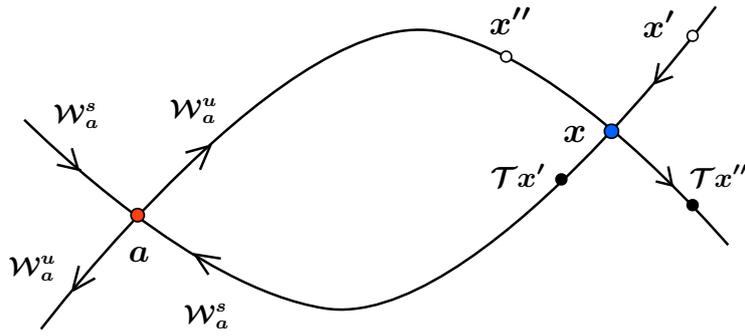


図 2.17: 写像 \mathcal{T} による x' および x'' の像はやはりそれぞれ W_a^u , W_a^s に乗る。

ため、素朴には図 2.18 のように蛇行・交差が発生することが予想される。しかし、ここで Poincaré 写像が「向きづけられている」こと (2.105) に注意する必要がある。すなわち、ホモクリニック点 x の像 $\mathcal{T}x$ は図 2.19 に示したように向きを含めた面積保存を満たさなくてはならず、図 2.18 のような $\mathcal{T}x$ は認められない。この制約から、図 2.20 のようにもう一度交差した点が正しい $\mathcal{T}x$ となる。この蛇行と交差は次々と発生し、ホモクリニック点の生成には終わりは無い (図 2.20)。仮に、終わりがあ

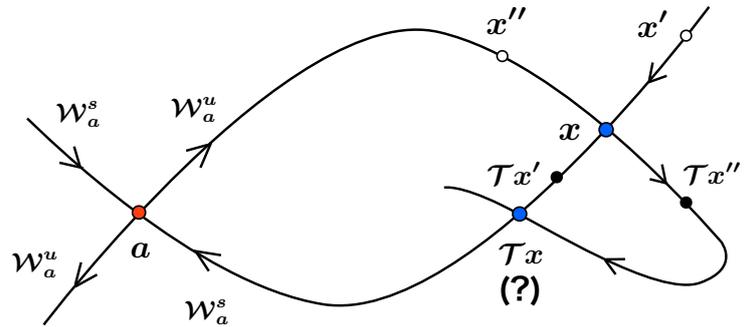


図 2.18: 写像の連続性から想定される多様体の蛇行と交差。図に示した“素朴な” $\mathcal{T}x$ は、Poincaré 写像が向きづけられた写像であることを考慮すると実は誤りである。

るとすれば、点列はある不動点に落ち込むこととなる。しかし、この逆像を取ると不動点から離れることができなくなり、これは「ホモクリニック点の逆像が 1 対 1 対応でホモクリニック点である」ことに矛盾している。したがって以上から、ホモクリニック点が 1 個あれば、同様の点が無限に存在することが結論づけられる。

写像 \mathcal{T} の保測性は図 2.20 の斜線部分の面積を一定に保ち、また、不動点 a への漸近は指数関数的に遅いことが分かる。これより、不動点 a に接近するにつれて蛇行の振幅が指数増大することとなる。さらに、この微細に折り畳まれ、引き延ばされた構造 (図 2.21) と同じものが、 a に後ろ向きに漸近する系列においても見いだされる (図 2.22)。これにより双曲型不動点の近傍には、折り畳みと引き延ばしを受

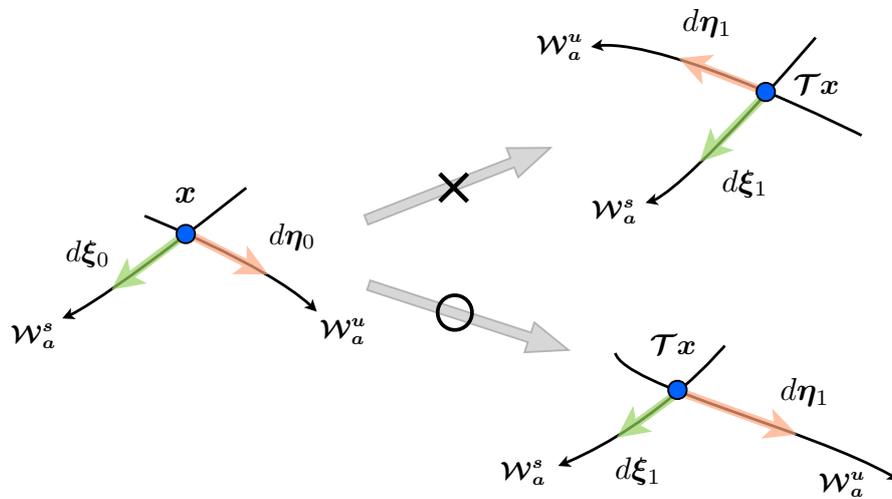


図 2.19: Poincaré 写像は向きづけられた写像であることに注意すると, $d\xi_0 \wedge d\eta_0 = -d\xi_1 \wedge d\eta_1$ は可能性から排除され, $d\xi_0 \wedge d\eta_0 = d\xi_1 \wedge d\eta_1$ が採用される。

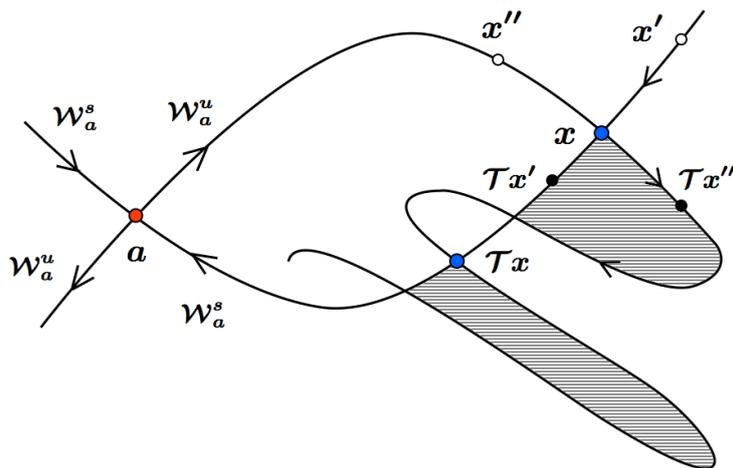


図 2.20: ホモクリニック点が1つ存在すると, 同様の点は無限個存在する。

けた W_a^s と W_a^u が交差を起こして二次的なホモクリニック点を生成し、これらが稠密に分布していると言える (図 2.23)。このような安定多様体と不安定多様体の複雑な絡み合いを「ホモクリニック錯綜 (あるいはヘテロクリニック錯綜)」という。双曲型不動点近傍に初期点を取った場合、この複雑な折りたたみと引き延ばしの構造によって軌道は相空間上の広い領域にランダムに輸送されてゆくことが期待される。この性質が、系にカオスをみちびき、混合性をもたらす。

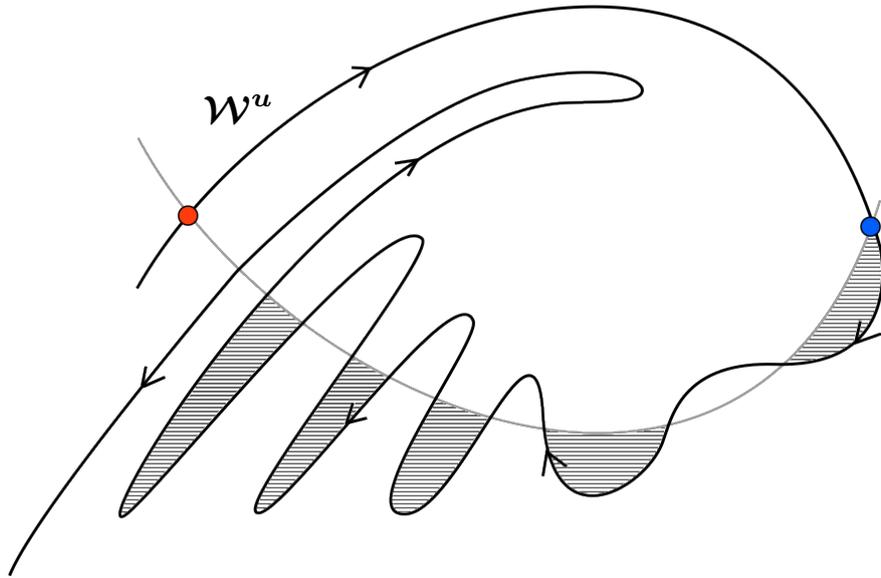


図 2.21: ホモクリニック点は無限に生成される。

2.7.3.3 ホモ (ヘテロ) クリニック錯綜と 1 個の解析的第一積分の不在

双曲型不動点近傍にホモクリニック錯綜が発生した場合、そこには 1 個の解析的な第一積分が存在しないことが証明される。これにより、ホモクリニック錯綜によって相空間上にカオスを発生することとなる。以下、簡単のため 2 自由度 Hamilton 系を考える。いま、系の Hamiltonian とは別に 1 個の解析的な第一積分

$$\Phi(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \alpha \quad (\mathbf{p} = (p_1, p_2), \mathbf{q} = (q_1, q_2)), \quad (2.133)$$

が存在していると仮定する。この保存量の存在は (p_1, q_1) で張られる Poincaré 断面上に、ある不変曲線族

$$J(p_1, q_1) = \text{const.}, \quad (2.134)$$

を定める。ここで J は Poincaré 写像における不変量であるため、不変多様体である安定多様体 W^s と不安定多様体 W^u もまた、 $J(p_1, q_1) = \text{const.}$ のひとつの等高線となる。したがって W^s および W^u の上では相流方向の $J(p_1, q_1)$ の微分はゼロとなる。

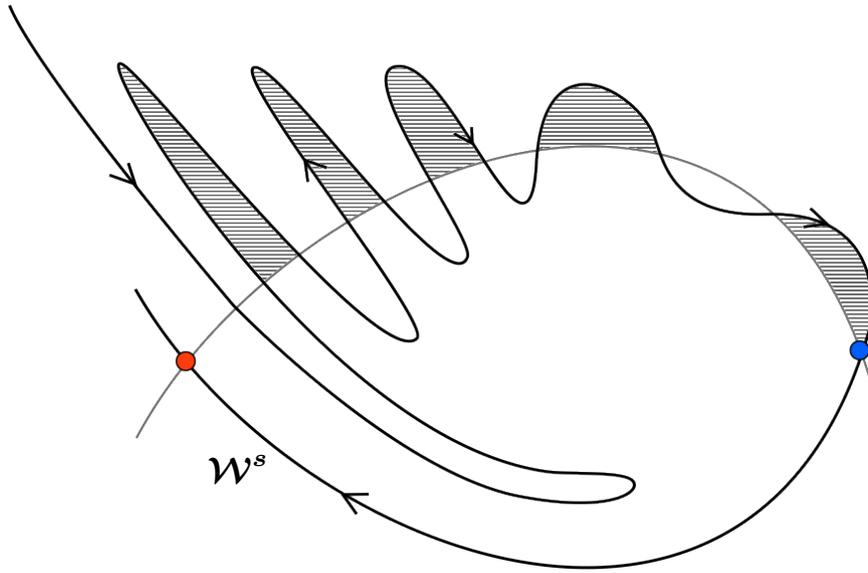


図 2.22: ホモクリニック点は無限に生成される。

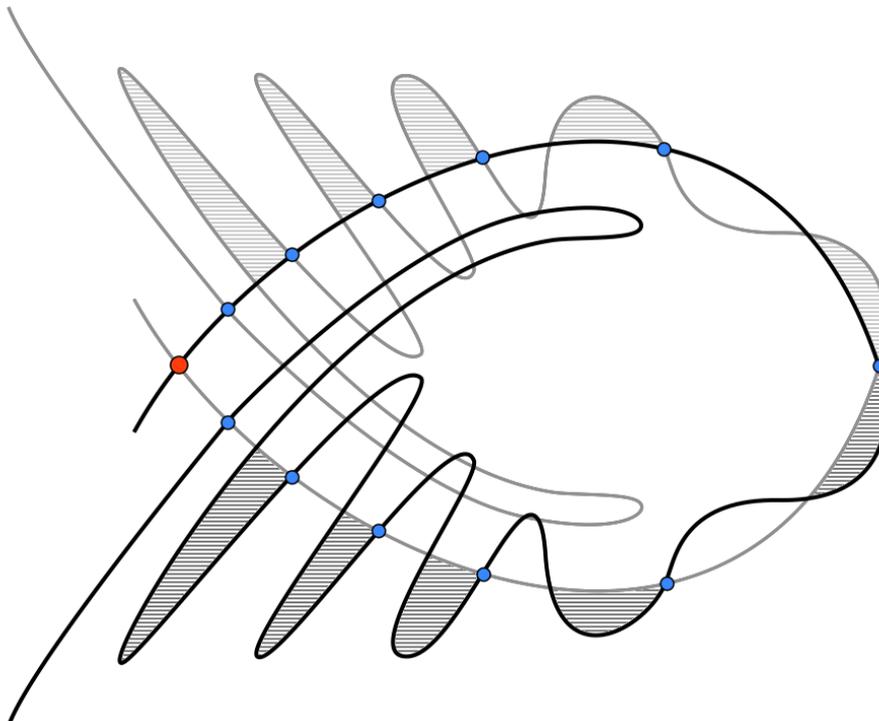


図 2.23: ホモクリニック錯綜

ホモクリニック錯綜が発生している場合、 W^s と W^u はある角度を持って横断的に交差しホモクリニック点を作ることから、そこでは2つのことなる相流方向に関して $J(p_1, q_1)$ の微分がゼロとなる。したがってホモクリニック点では

$$\nabla J(q_1, p_1) = \mathbf{0}, \quad (2.135)$$

となることが分かる。前節の議論より、ホモクリニック点は双曲型不動点近傍に稠密に分布しており (2.135) はそれらの点すべてに対して成立する。すなわちホモクリニック点の稠密分布した領域では恒等的に (2.135) が成立する：

$$J(p_1, q_1) = J = \text{const.} \quad (2.136)$$

これはすなわち、 J が微視状態 p_1, q_1 に依存しない定数となることを意味する。これは冒頭で仮定した第一積分の1価性に矛盾する。よってホモクリニック錯綜のもとで1価の解析的第一積分が存在しないことが分かる。なお、この証明のロジックは [DF76][YO94] による。以上から、ホモクリニック錯綜が存在するとき、系には第一積分が不在となり、広範囲への軌道の輸送が実現されると考えられる。

2.8 Hamilton系でみられる遅い運動の数々

通常、ミクロカノニカル統計力学は Hamilton 力学系のカオスによって基礎付けられる。そこでは系の非線形性によって強いカオスが発生することが仮定され、力学が確率過程を模倣する状況³が想定されている。しかしながら、実際に Hamilton 系で生起する運動は、その複雑な相空間構造に由来する非自明な遅さを持ち、シンプルな統計性の仮定⁴から乖離した挙動が見られることがしばしばある。すなわち、系に非可積分性を付与するだけでは、通常期待されるような（指数関数的に速い）緩和過程を簡単に説明することができない。非可積分ハミルトン系が示す非自明な挙動を考究することは、力学的決定性と熱力学的統計性の中間にあるシステム、すなわち“未発達な統計性を持つシステム”を理解する新しい様式を提案することへとつながる。

2.8.1 淀み運動、KAM トーラスへの軌道の巻き付き

KAM 理論によれば、可積分系に微弱な摂動が加えられた系においても、可積分系の準周期軌道に乗せたトーラスがわずかに変形されつつも残り続ける。Hamilton 系では、この KAM トーラス付近に軌道が巻き付くことでおきる一見規則的な運動（淀み運動, stagnant motion）が見られることがある。この場合、カオスが発生せ

³ これは、決定論的力学法則の解から計算される何らかの物理量の時系列が、あたかもマルコフ過程から生起したものであるように見える状況を指す。

⁴ ここでいうシンプルな統計性の過程とは、相空間のエネルギー曲面全域にカオスが発達し、エネルギー曲面上のいかなる点を初期点としても軌道がランダムに振る舞うような状況を指している。この状況下では軌道によが複雑にさまざまな場所を訪問するために、指数関数的な相関の減衰が見られると考えられる。

ず、運動は過去の履歴を長時間引きずり、その時間相関は $t^{-\alpha}$ で表されることになる。このような遅い緩和は指数関数的緩和 $\exp(-\gamma t)$ のような特徴的な時間スケールを持たず、パワースペクトルには $1/f$ ゆらぎ ($1/f^\beta$) が現れることが報告されている [AKH+89][CS84][Kar83]。Poincaré-Birkhoff の定理から伺えるように、相空間はフラクタルな構造をもち、トーラスの残骸がいたるところに自己相似的に内包されている。これによって淀み領域に滞在する時間分布がベキ則に従うと考えられる。さらに、自由度の大きなシステムにおいてもこのような異常緩和が起きる可能性が指摘されている [YK98]。

2.8.2 Arnold 拡散, 多自由度系における普遍的な不安定化機構

2 自由度力学系においては、KAM 理論が存在を保証する 2 次元 KAM トーラス (わずかに変形された周期解) は 4 次元相空間内の 3 次元エネルギー曲面上に存在する。2 次元 KAM トーラスは 3 次元エネルギー曲面に対して余次元 1 であることから、エネルギー曲面を「内」と「外」に分割する。解の一意性から軌道は交差せず、したがってトーラス内部の運動はトーラス外部に接続されることはない (図 2.24 左)。これにより、いわゆる統計力学が仮定するエネルギー曲面上でのエルゴード化は明らかに達成されない。2 自由度 Hamilton 系におけるこの非エルゴード性は、その自由度の小ささから統計力学にとってさほど致命的ではない⁵。

次に N 自由度 Hamilton 系 ($N \geq 3$) を考える。KAM 理論によって摂動系においても N 次元 KAM トーラスが残存しており、これは $2N - 1$ 次元エネルギー曲面上に存在する。しかしながら、余次元が 2 以上となるために 2 自由度力学系とは事情が一変し、KAM トーラスはエネルギー曲面を幾何学的に分割することが出来なくなる。結果として、軌道は KAM トーラスに束縛されることなく、KAM トーラスを“迂回”して抜け出し、相空間のあらゆる場所を訪問できる可能性が出てくる (図 2.24 右)。

Arnold はこのような軌道が実際に存在することを、具体的な 2.5 自由度⁶ のハミルトン系 (Arnold 模型) :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \epsilon H_1, \quad (2.137)$$

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2}(J_1^2 + J_2^2), \quad (2.138)$$

$$\mathcal{H}_1 = \cos(\theta_1 - 1) [1 + \mu (\sin \theta_2 + \cos t)], \quad (2.139)$$

のもとで示した [Arn64]。無摂動系 ($\mu = 0$) は振り子 (J_1, θ_1) と回転子 (J_2, θ_2) からなり、 $\mu \neq 0$ の摂動系では振り子と回転子が μ で相互作用する模型となる (図 2.25)。可積分系の場合に作用変数 J_2 は保存量であるが、摂動および相互作用の結果 J_2 は

⁵なぜならば、高自由度での大域的な不安定化が提唱できれば統計力学としては問題ないから。

⁶ここで 0.5 自由度は時間 t を表す。 t に正準共役な変数を導入すれば 2.5 自由度ハミルトン系は 3 自由度のハミルトン系となる。このように時間を運動量や座標と同様に力学変数として含めた相空間を拡大相空間と呼ぶ。

変動し、その変化が

$$|\Delta J_2| \sim 4\pi\mu \exp\left(-\frac{\pi J_2}{2\sqrt{\epsilon}}\right), \quad (2.140)$$

と評価される。これは、小さい ϵ のもとで、Arnold Hamiltonianにおける作用変数の変動がきわめて小さいことを意味する。この相空間の輸送現象は「Arnold 拡散⁷」と呼ばれ、多自由度 Hamilton 系における普遍的な不安定化の機構と考えられている。

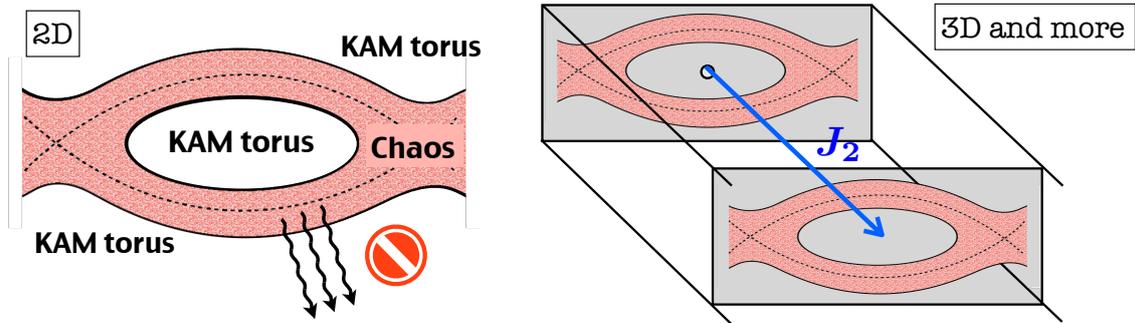


図 2.24: アーノルド拡散の概念図。2 自由度ハミルトン系の場合、KAM トーラス (2次元トーラス) の間にカオスが発生したとしても、そのカオス軌道は KAM トーラスを越えて外に出る事はできない (左図)。一方、力学系の自由度が2を超えると余次元を使ってカオスの軌道が大域的に拡散することが期待される (右図は J_2 方向への拡散を示している)。Arnold はこういった大域的運動がおこる軌道が存在することをあるハミルトン系に対して示した。この機構はアーノルド拡散と呼ばれ、大自由度系特有の普遍的な不安定化の機構であり、緩和の素過程と目されている。

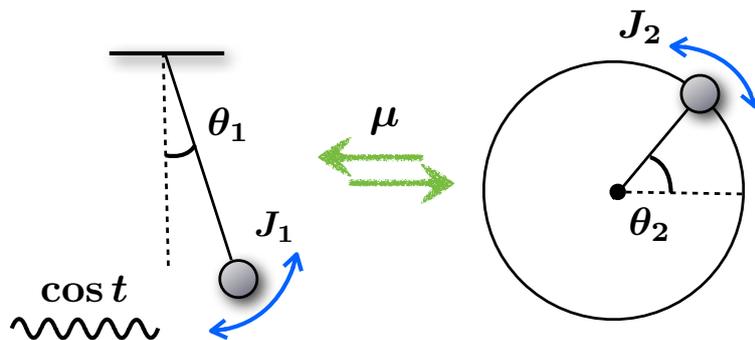


図 2.25: Arnold の模型。回転子と振り子が相互作用し、時間依存する外場が加えられている。Arnold は回転子の作用変数の変動の仕方に関して評価を与え、その変動がきわめて遅いことを示した。

⁷ ここでの「拡散」は通常の意味での $\langle (x - x_0)^2 \rangle \propto t$ を意味しない。実際、[Kon05] では、高精度数値計算によりこの Arnold 拡散と呼ばれる現象がいわゆる「拡散的」ではないことが示唆されている。

2.8.3 Nekhoroshev 安定性

Nekhoroshev は、一般的な近可積分系

$$\mathcal{H} = H_0(\mathbf{J}) + \epsilon H_1(\mathbf{J}, \boldsymbol{\theta}), \quad (2.141)$$

に対して、

$$\|\mathbf{J}(t) - \mathbf{J}(0)\| < A\epsilon^\gamma, \quad 0 < t < \exp\left(\frac{1}{B\epsilon}\right)^\delta, \quad (2.142)$$

を示した [Nek71]。すなわちこの Nekhoroshev の理論は、小さな ϵ に対して、stretched exponential 的に長い時間 $\exp(1/B\epsilon)^\delta$ のあいだ、作用変数の変動がある小さな範囲 $A\epsilon^\gamma$ 内に抑えられると読める。これは前節の Arnold 拡散において、作用変数が顕著に変動 ($\mathcal{O}(1)$ 程度変化) するまでには長い時間を要することと整合している。

多自由度系において Arnold 拡散のような普遍的な不安定化機構がありながら、その輸送に顕著な「遅さ」が伴うことは、統計力学にとって無視できない事実である。また、 δ, γ は自由度 N に依存し、 $\delta = \gamma = 1/2N$ と評価されている [LN92]。

2.8.4 Boltzmann-Jeans 則, 異なる自由度間の遅いエネルギー輸送 -量子論誕生前の遺産

Boltzmann[Bol95] と Jeans は、黒体輻射において見られる高周波数モードの自由度凍結を力学的に説明することを試みた。この問題は Landau と Teller によっても考察された。いま、古典的な多原子気体系を考える。彼らは、原子同士の衝突によってもたらされる並進自由度と振動自由度間のエネルギー交換は、振動自由度の周波数が十分に高い場合にはきわめて遅くなることを予想した [BGG87, BGG89, BB91, BCS93, Ben94, Bol95]。そのエネルギー交換 ΔE は次に示すように指数的に小さい：

$$\Delta E \sim \mathcal{E}_0 \exp(-\tau_0 \omega) \quad (\mathcal{E}_0 > 0, \tau_0 > 0). \quad (2.143)$$

また、別表現を借りれば、速い運動と遅い運動の間のエネルギー移動はきわめて長い時間を必要とする：

$$T \propto \exp\left(\frac{\tau_{\text{slow}}}{\tau_{\text{fast}}}\right)^a. \quad (2.144)$$

ここで τ_{fast} と τ_{slow} はそれぞれ速い/遅いタイムスケールを持つ運動の特徴的時間を表している。

このシナリオは Boltzmann-Jeans conjecture と呼ばれ、黒体輻射におけるエネルギー等分配則の破れを説明するものと考えられた。今日では、量子論による強力な説明に取って代わられているが、Hamilton 力学系における非自明な遅い緩和や非統計性に関する知見として未だに重要性を持っている。例えば近年、液相の水 [SIS06] や鎖状多体系 [KY10] における遅い緩和の特性が Boltzmann-Jeans の描像と一致することが報告されている。Boltzmann-Jeans 則は可積分系から遠く離れた系に対しても妥当性をもっており、近可積分系を議論の対象とする伝統的な Hamilton 力学系の方法と一線を画しているという点で特筆すべきである。

第3章 格子振動系における遅い緩和

Fermi-Pasta-Ulam 模型が示す非熱的挙動に関しては1950年代に初めてその問題が知られてから今日に至るまで非常に多くの研究がなされてきた。しかしながら、指標や条件の違いに阻まれて、その全体像を俯瞰して統一的な見解を抽出することは大変に難しい。本章では、「Fermi-Pasta-Ulam 模型の緩和過程はどのように遅く、そしてなぜ遅いのか？」という問題意識¹を基軸に先行研究を整理することとする。

3.1 黎明期：FPU paradox - Fermi-Pasta-Ulam 模型におけるエネルギー等分配則の破れ [FPU55]

1950年代、Fermi, Pasta, Ulam は1次元固体結晶の模型として非線形相互作用をもつ格子振動系のエルゴード性を考察した。分子動力学シミュレーションの草分け的存在といえる彼らの研究は、力学と統計力学の関係にきわめてパラドキシカルな示唆を与えた。Fermi-Pasta-Ulam 模型（以下FPU模型と呼ぶ）のHamiltonianは

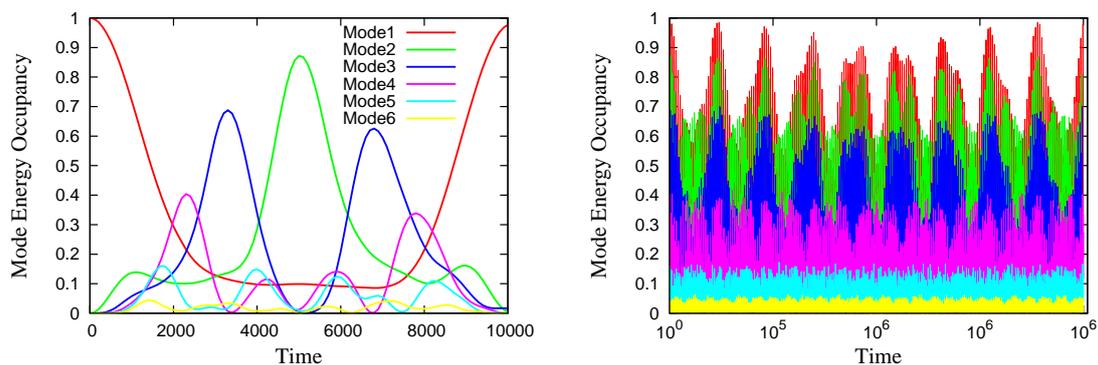
$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=0}^N \left[\frac{\kappa}{2} (q_{i+1} - q_i)^2 + \frac{\alpha}{3} (q_{i+1} - q_i)^3 + \frac{\beta}{4} (q_{i+1} - q_i)^4 \right], \quad (3.1)$$

で表され、 κ は調和係数、 α および β はそれぞれ3次、4次ポテンシャル係数である。 $\alpha \neq 0, \beta = 0$ の場合をFPU- α モデル、 $\alpha = 0, \beta \neq 0$ の場合をFPU- β モデル、 $\alpha \neq 0, \beta \neq 0$ の場合をFPU- $\alpha\beta$ モデルと呼ぶ。

対応する調和振動系 ($\alpha = \beta = 0$) は可積分系であるため N 個の各モードエネルギーが系の第一積分となりモード間のエネルギー輸送は禁制されている。そこに微弱な非線形性を与えた場合、Poincaré の定理 (2.5 節) の指摘どおり、可積分系から滑らかに変形されて残るような第一積分は Hamiltonian 以外存在しなくなる。ミクロカノニカル分布が実現するために不要な第一積分が非線形性によって消滅して系がエルゴード性を獲得した結果、モード間エネルギー等分配の実現が素朴には期待される。彼らは、最低周波数モードを単一に励起するという平衡状態から遠く離れた初期条件を設定し、高周波数モードへのエネルギー分配がどのように実現されるかを観察した。その結果、エネルギーは全モードに共有されず初期励起モード近辺にのみ集中し、さらに初期状態の再帰という非エルゴード的な挙動 (図 3.1) が確認された。エネルギーの局在性と再帰性は非常に強固に長時間持続しており、系が「可積分的」であることを示している。

¹FPU 模型が導いた大きな潮流のひとつに非線形波動理論と新たな可積分系であるソリトン系の発見が挙げられるが、本論文では熱化過程に主題を置くため詳細には触れない

FPU 系には Poincaré の定理が保証するような「摂動パラメタに関して解析的な第一積分」は存在しないものの、エネルギー曲面上に実効的に軌道の運動領域を狭める構造が存在することを示唆している。このエネルギー等分配則の破れは“FPU paradox”として知られる。この衝撃的な結果は、“非線形性が統計性 (stochasticity) をもたらす”という素朴な仮定に疑いの目が向けられる²最初の例となった³。このように、未発達な統計性をもつ力学系が示す非熱的な挙動を説明することは、現代においても重要な課題として残されている⁴。また、FPU paradox は後にソリトン系と呼ばれる可積分系の発見 [ZK65] へとつながる。この意味で、FPU 問題は非線形物理の原初だと言える。



(a) $N = 32, \text{FPU}_\alpha, t = 0 \sim 10^4$ におけるモードエネルギー占有率の時間発展。エネルギーの大部分は 32 個のうち限られた 6 つ程度のモードだけで共有され、初期条件への再帰性が見られる。

(b) 図 3.1(a) よりも 10^2 倍長い観測時間での挙動。依然として局所的なエネルギー分配が見られ、幾重にもわたるメタ的な再帰現象が確認できる。この場合、系は非常に可積分系的に振る舞う。

図 3.1: FPU paradox - FPU 系におけるエネルギー等分配則の破れと再帰現象

3.2 勃興期：stochasticity limit の存在，熱力学極限での stochasticity limit の消失と残存

FPU paradox が報告されると、系を stochastic にする条件や、可積分的運動とカオス的運動が分かれる臨界点がどこにあるかという観点から研究する立場が勃興した。さらにそれらの研究の中で、熱力学極限において FPU paradox が生き残るのか、それとも消失するのか、という重要な問題提起がなされることとなる。

Izrailev, Chirikov [IC66, IKC70] は、stochasticity が現れる (すなわち FPU paradox が消失する) ような臨界摂動強度 (stochasticity limit) の存在を示した。

²この安直な仮定に対する疑いは、Kolmogorov-Arnold-Moser 定理の証明によって決定的となる。

³FPU だけでなく、Saito, Hirooka によって導入された別の非線形格子振動系 [SH67b, SH67a] においても、粒子の速度相関が残り続け、エルゴード性が破れる事例が報告されている。

⁴しかしながら、ランダウのように敢えてこの問題に取り合わず、統計力学が導きだす結果が物性を非常によく説明するという成功体験を以て間接的にその理論的仮定 (エルゴード性、等重率の原理) の妥当性を納得する立場を取るのも、統計力学のユーザとして当然ありうる立場である。

4次非線形パラメタを β , 平行位置座標を z , x を平衡位置からの変位, k を初期励起モード番号, N をシステムサイズとする。彼らは連続化された FPU β 模型

$$\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 x}{\partial z^2} \left[1 + 3\beta \left(\frac{\partial x}{\partial z} \right)^2 \right], \quad (3.2)$$

において小さな摂動 $\beta/8N \ll 1$ を仮定すると stochasticity limit が

$$3\beta \left(\frac{\partial x}{\partial z} \right)_{\max}^2 \sim \frac{3}{k} \quad (k \ll N), \quad (3.3)$$

$$3\beta \left(\frac{\partial x}{\partial z} \right)_{\max}^2 \sim \frac{3\pi^2 k^2}{N^4} \quad (N - k \ll N). \quad (3.4)$$

と見積られることを示した。ここで $\beta [(x_{l+1} - x_l)^2 + (x_l - x_{l-1})^2 + (x_{l+1} - x_{l-1})^2] \approx 3\beta (\partial x / \partial z)^2$ であり, stochasticity limit は摂動部分の強度に関するものであることが分かる。彼らは FPU 論文で確認された非統計的な運動の初期条件がこの stochasticity limit の内側にあったことを示している (図 3.2(a))。また, 図 3.2(b) には, 我々の数値計算によって描かれた stochasticity limit を示した。両者の結果の整合については議論が必要であるが, やはり stochasticity limit と思しき境界を確認することができる。

彼らの主張は, 「統計的振る舞いと非統計的振る舞いを分ける臨界エネルギー E_c が存在する」ことを示唆している。またそれだけでなく, 彼らの結果を熱力学極限 ($\epsilon_0 = E_0/N$ を有限に保ちつつ $N \rightarrow \infty$ とする) に適応すると, 熱力学極限においては FPU paradox が消失することを間接的に示している。

一方, これとは逆の主張が Bocchieri らによってなされている [BSBL70]。彼らは近接相互作用 Lennard-Jones ポテンシャル

$$V = 4\epsilon [(\sigma/R)^{12} - (\sigma/R)^6], \quad (3.5)$$

で連結された1次元格子におけるエネルギー等分配状態の達成を議論した。彼らの数値計算は異なるいくつかの異なるシステムサイズ $N = 2 \sim 100$ で行われ, その結果振動エネルギー密度 $\epsilon_0 = E_0/N$ がポテンシャルの深さの2-3%よりも大きい場合にエネルギー等分配則が成立することを示した。彼らの結果は, 熱力学得極限においても stochasticity limit が残り続けることを示唆している。また, 彼らは, stochasticity limit 以下の運動が示す再帰現象を説明するものとして, 相空間構造に対する2つの conjecture を提案している:

- (1) 系は ergodic であって, その軌道はある周期運動から他の軌道へわずかにしか変化しない。この場合, 系がエネルギー曲面上を巡るのに要する時間はきわめて長くなる。
- (2) 系は non-ergodic であって, 初期条件に依存してエネルギー曲面上の一部しか運動できない。(系には Hamiltonian 以外に何らかの保存量を持つ。)

彼らは、系が示す再帰的な運動において、エネルギー等分配が部分的に成立しているようないくつかのモード群が形成されていることを根拠に、(2)がもっともらしいシナリオであると主張した。

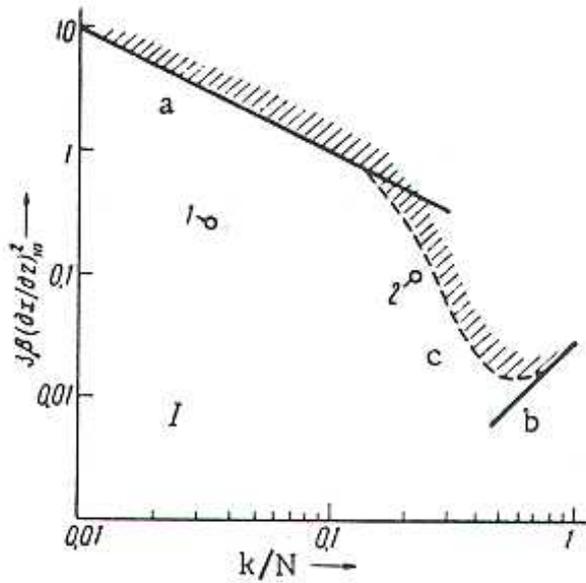
Buteraらもまた、古典および相対論的量子場の理論と関連する格子系において stochasticity threshold の数値的評価を与えた [BGG⁺80]。

stochasticity limit (stochasticity threshold) が熱力学極限に向けても有効である場合、非線形な系において見られる非統計性が熱力学極限においても生き残る事が示唆される。この文脈では [GS72b] [CGS72] [GS72a] らが、stochasticity limit と零点エネルギーの対応や、Planck 分布との関連性を議論し、古典非線形力学系におけるエルゴード性の破れが量子効果と結びつくという観点からその物理的意味を論じている。

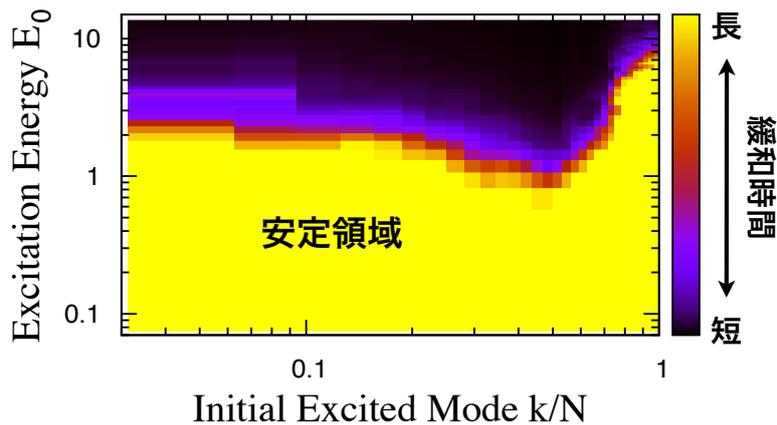
stochasticity limit に関するこれらの先行研究には特筆すべき暗黙の背景がある。すなわち、stochasticity limit の存在を論じるとき、「カオスの運動と秩序的運動の分離」が前提とされている。この分離の前提は、たとえば相空間における第一積分の存在・非存在の問題に代表されるように、ダイナミクスの詳細を捨象して系全体の性質を捉えること、すなわち時間無限大の性質に力点を置く立場によるものである。当時の FPU 問題は可積分なソリトン系との結びつきの中で語られる事が多く、このため緩和の停滞は保存量の存在として解釈される傾向にあった。[BSBL70] において conjecture(2) がもっともらしいとされているのもまたそういった背景によるものと考えられる。

しかしながら、ダイナミクスの詳細（すなわち相空間内の軌道の巡回過程）に着目することの重要性をここで強調しておきたい。系のそのような動的性質に立ち入ることは、化学反応や生体高分子のダイナミクス、ガラス転移などの興味深い現象を理解する際に有用な知見を与えることとなる。したがって我々は、「カオスと秩序の分離」という視点を離れ、緩和ダイナミクスに立脚した視点を取ることとする。具体的には、系の緩和時間を導入してそのエネルギー依存性を明らかにすることで系の熱的・非熱的性質を取り出すことを試みる。また仮に、stochasticity threshold を導入するのであれば、動的性質に異常（緩和時間の発散など）が伴う箇所でそれを定義することが適切であろう。さらに付け加えると、[BSBL70] において棄却された conjecture(1) は、多自由度系における普遍的な不安定化機構であり、緩和の素過程と目される Arnold 拡散を指している。これは、厳然とした第一積分が見つからない限り棄却されない conjecture である。

⁶Reproduced with permission from F. M. Izrailev and B. V. Chirikov, Statistical Properties of a Nonlinear String, *Soviet Physics Doklady*, 11(1):3032, 1966. Copyright 1966, American Institute of Physics. (PDF here)



(a) Izrairev, Chirikov による stochasticity limit (文献 [IC66] より転載⁶⁾)



(b) 我々の数値計算による stochasticity limit

図 3.2: (a) : Izrairev, Chirikov による stochasticity limit を初期条件空間に示したものの (文献 [IC66] より転載)。 x 軸は rescale された初期励起モード番号 k/N , y 軸は摂動部分のエネルギー $3\beta(\partial x/\partial z)^2$ を表している。実線は彼らが主張する stochasticity limit(3.3),(3.4) で, 破線は中間領域の補間曲線である。この stochasticity limit の下側は安定領域で, 上側が不安定領域を示す。図中 1 の \circ : $\beta = 8$ という強い非線形性にも関わらず安定領域にあり, 実際の運動においても準周期性が見られる。図中 2 の \circ : $\beta = 1/16$ という弱い非線形性にも関わらず threshold の近傍にあり, 実際の運動にはあまり準周期性が見られない。(b) : 我々の数値計算による stochasticity limit。 x 軸を rescale された初期励起モード番号 k/N , y 軸を全系のエネルギー E_0 とする初期条件空間に, ある指標 ξ の緩和時間をプロットした phase diagram。ただし計算条件は $N = 32, FPU\beta$ とした。指標 ξ は, 単一のモードが全エネルギーを独占する非等分配状態では $\xi(t) = 1$ となり, 等分配状態においては $\xi(t) = 0$ となる量である。この場合 $\xi = 0.2$ となる時刻を緩和時間と定義した。ここでも同じように緩和がおきる領域とそうでない領域の間に stochasticity limit らしき境界が見られる。

3.3 転換期：動的性質への興味, 異なる緩和過程の存在

3.3.1 スペクトルの時間発展における2つの異なる動的領域

ダイナミクスの詳細に立ち入り, その過渡的緩和現象を捉えた研究の先駆けとして Fucito らの研究 [FMM⁺82] が挙げられる。彼らは, 1次元の非線形 Klein-Gordon 方程式

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - m^2 \phi - g\phi^3, \quad (3.6)$$

のダイナミクスを考察した。なお, これに対応する Hamilton 系は以下のように表される:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}P^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2 + \frac{1}{2}m^2\phi^2 + \frac{1}{4}g\phi^4. \quad (3.7)$$

彼らは解を複素空間上に解析接続することにより, 複素平面上の特異点の挙動を緩和と結びつけ, エネルギースペクトル W が波数 k に対して exponential tail を持つ状態が比較的短い時間で形成されることを見出し, さらにその状態には2つの動的領域 (two different time regions) があることを示した:

$$W(k, t) \propto \exp(-2|ky_s(t)|). \quad (3.8)$$

$$y_s(t) \propto \begin{cases} \log(tAg^{1/2})/k_0 & (\text{small } t). \\ m(A^2gk_0^2 \log t)^{-1/2} & (\text{intermediate } t). \end{cases} \quad (3.9)$$

ここで A は初期励起振幅, m^2 は Hamiltonian における場 ϕ の 2 乗係数, g は ϕ の 4 乗係数である。彼らの結果によれば, 系の緩和は短い時間スケールでは指数スペクトルの傾きが $\log t$ に比例して発展し, 中間時間スケールでは $(\log t)^{-1/2}$ なる時間依存性をもつ。系は非常に長い時間をかければ平衡状態に到達するが, その過渡現象として異なるダイナミクス領域が存在し, FPU paradox と呼ばれていたものが, こうした準安定的状態の形成と持続であると解釈されるという新たな知見を示した。我々の研究もまた, Fucito らの理解様式の延長上にある。

3.3.2 スペクトルの時間発展における2つの異なる定常状態

[FMM⁺82] と同様の着眼点から Livi らは FPU β 模型

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2}P_i^2 + \frac{1}{2}v^2 \left\{ \frac{\phi_i - \phi_{i+1}}{a} \right\}^2 + \frac{1}{4}\beta \left\{ \frac{\phi_i - \phi_{i+1}}{a} \right\}^4 \right], \quad (3.10)$$

におけるスペクトルの時間発展に関して2つの異なる安定状態 (two different stationary states) の存在に言及した [LPR⁺83][LPR⁺85]。彼らによれば, (i) k^{-2} スペクトル, (ii) 指数的スペクトルという2つの状態が存在し, その形成と維持過程は βA^2 の値によって質的に異なることを主張した:

$(\beta A^2 \leq 10)$: (i) 指数関数的スペクトルが長時間持続する。(ii) スペクトルの指数の傾きが特殊な挙動, すなわちある値への漸近を示す。

$(\beta A^2 > 10)$: (i) ある時刻 T^* までスペクトルは指数関数的な形状をもつ。このとき T^* は βA^2 に大きく依存する。(ii) 等分配状態, すなわち k^{-2} スペクトルが (i) ののちに達成される。このとき βA^2 の増加にともない, k^{-2} スペクトルの形成に要する時間は短くなる。

ここで A は励起振幅をあらわす。また k^{-2} スペクトルとは, 系が Markov 過程である場合に見られる Lorentzian 型スペクトルにおける高周波領域の周波数依存性を意味している。彼らは, 非線形部分と調和部分の比として Reynolds number $R \sim \beta A^2 / \nu^2 L^2$ を導入して stochasticity threshold (equipartition threshold) R_c が存在することを示した。この threshold は励起モードの選択やシステムサイズに依存しないことが主張された。

3.3.3 Strong Stochasticity Threshold (SST)

Pettini, Landilfi は, FPU β 模型および ϕ^4 模型において stretched exponential 的に遅い緩和, および緩和傾向が分離するような energy density threshold の存在を示した。さらに, 相空間の著しい構造変化が起こる事を Lyapunov 解析により見出し, strong stochasticity threshold (SST) を導入した [PL90]。

まず彼らは, ある時刻 τ_R が存在し, その前後で動的な性質が変化することを指摘した (図 3.3(a)) :

$$(t < \tau_R) \quad \text{stretched exponential law} \quad \eta(t) \sim \exp[-(t/\tau_0)^\xi], \quad 0 < \xi < 1. \quad (3.11)$$

$$(t \geq \tau_R) \quad \eta_\infty = \exp[-(\tau_R/\tau_0)^\xi] = \text{const.} \quad (3.12)$$

ただし, 緩和の指標 η はスペクトラル・エントロピー

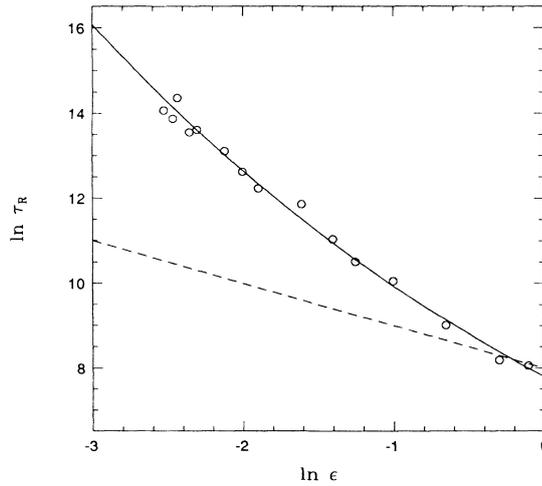
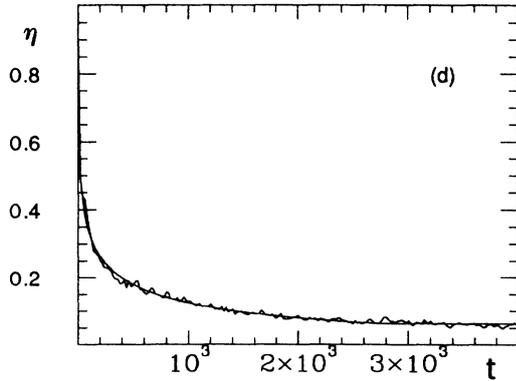
$$\eta(t) = \frac{S_{\max} - S(t)}{S_{\max} - S(0)}, \quad (3.13)$$

$$S(t) = - \sum_{k=1}^N w_k \log w_k \quad (k = 1, \dots, N), \quad (3.14)$$

$$w_k(t) = E_k(t) / \sum_{l=1}^N E_l(t), \quad \sum_{k=1}^N w_k = 1 \quad (E_k : \text{第 } k \text{ 番目の基準振動エネルギー}), \quad (3.15)$$

である。また, 運動の相が分離する時刻 (緩和時間) τ_R のエネルギー密度依存性に関して臨界エネルギー密度 ϵ_c が存在することを示した :

$(\epsilon_0 < \epsilon_c)$: τ_R が Nekhoroshev-like なスケーリング則 : $\tau_R = \tau_0 \exp(a/\epsilon_0)^\gamma$ に従う (図 3.3(b))。ただし Nekhoroshev の定理における指数 γ はシステムサイズに依存 (当時の評価で $(\gamma \sim 1/N^2)$) があるが, 彼らの結果は大きな N に対しても任意の寿命を持つ非平衡状態が存在することを示唆した。



(a) $t = \tau_R = 2.74 \times 10^3$ 前後での運動相の分離 ($N=512$)。 $t < \tau_R$ では stretched exponential で減衰する緩和 $\eta(t) \sim \exp[-(t/\tau_0)^\xi]$ が見られ、 $t = \tau_R$ 以降は緩和指標は一定値 $\exp[-(\tau_R/\tau_0)^\xi]$ を取る。

(b) 緩和時間 τ_R のエネルギー密度 ϵ_0 依存性 ($N=512$)。横軸は $\log \epsilon_0$ 、縦軸は $\log \tau_R$ を示す。実線は $\tau_R = \tau_0 \exp(a/\epsilon_0)^\gamma$ 、破線は $\tau_R \propto 1/\epsilon_0$ を表す。 τ_R はべき的依存性ではなく Nekhoroshev-like な振る舞いを見せる。

図 3.3: $t = \tau_R$ における運動の分離 (a) と、 τ_R の Nekhoroshev-like な ϵ_0 依存性 (b)。(文献 [PL90] より転載)

($\epsilon_0 > \epsilon_c$): τ_R は ϵ_0 にほとんど依存しない。

さらに彼らは、最大 Lyapunov 指数 λ_1 を用いて相空間の構造変化を理解することを試みた。彼らは λ_1 の ϵ_0 依存性を議論し、ある ϵ_c を境にそのスケーリングが変化する挙動を発見した：

($\epsilon < \epsilon_c$): ϕ^4 模型と FPU β 模型の違いに依存するスケーリングが見られる。FPU β 模型においては $\lambda_1 \sim \epsilon_0^2$ の依存性をもつ。

($\epsilon > \epsilon_c$): $\lambda_1 \sim \epsilon_0^{2/3}$ の関係が成立する。またこの結果はランダム行列近似と整合しており、ダイナミクスがランダム過程を模倣しているものと考えられる。

さらにこの λ_1 に関する ϵ_c が $\tau_R(\epsilon_0)$ における threshold ϵ_c と一致することを示した (図 3.4)。 ϵ_0 が高い領域においては τ_R は ϵ_0 に依存しない。一方、低い ϵ_0 では τ_R は ϵ_0^{-1} の関数で急激に増加する。この2つの領域の間に ϵ_c が存在しその点 (strong stochasticity threshold, SST) で著しい相空間の構造変化が起きている。彼らの主張の中で特筆すべきは、SST が等分配の臨界ではなく、速い拡散から遅い拡散へ遷移する臨界だと解釈した点である。

3.3.4 秩序・カオス遷移領域の特性 - N に関するスケーリング

Kantz ら [KLR94] は FPU β 模型に対して、stochasticity threshold (秩序・カオス遷移領域) の力学的性質がシステムサイズ N に関してどのようなスケーリングを持

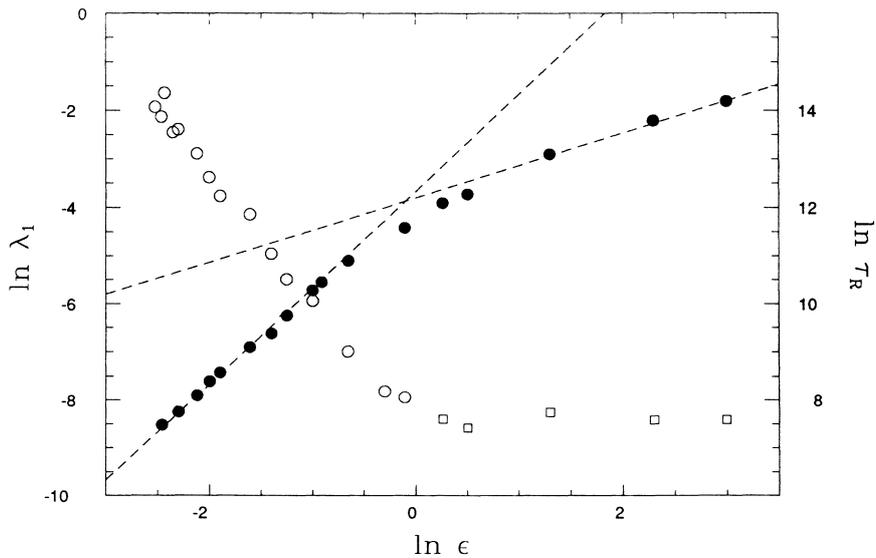


図 3.4: 緩和時間 τ_R と最大 Lyapunov 指数 λ_1 の励起エネルギー密度 ϵ_0 依存性。横軸は $\log \epsilon_0$, 縦軸は最大 Lyapunov 指数の対数 $\log \lambda_1$ および緩和時間の対数 $\log \tau_R$, 図中のシンボル●は最大 Lyapunov 指数, ○は緩和時間を表す。2本の破線は λ_1 のフィッティングを示しており, それぞれ $\lambda_1 \propto \epsilon_0^2$, $\tau_R \propto \epsilon_0^{2/3}$ となる。最大 Lyapunov 指数のエネルギー密度依存性が, あるエネルギー密度の臨界点 ϵ_c を境に切り替わることからこの点で相空間構造変化が起きていると推測される。彼らが提唱したこの臨界点 ϵ_c は strong stochasticity threshold (SST) と呼ばれた。彼らの結果で強調すべきことは, この SST が等分配の臨界点ではなく, 遅い緩和から速い拡散に遷移する点として提唱されていることである。(文献 [PL90] より転載)

つかという問題に焦点を当てた。また、初期条件のクラスの違いが与える影響についても考察している。彼らの論文は一貫して熱力学的極限に対する興味をその基軸としている。

まず彼らは、等分配状態に到達する特徴的時間スケールが、 N の変化に対してどのような依存性を持つかについて調べた。エネルギー E の値を固定して N を変化させた場合、異なる N をもつシステムの時間発展は $\tau = t/N$ のスケーリングによって同等になることが見出された (図 3.5)。すなわち、特徴的な時間スケールはシステムサイズに比例することを意味する。

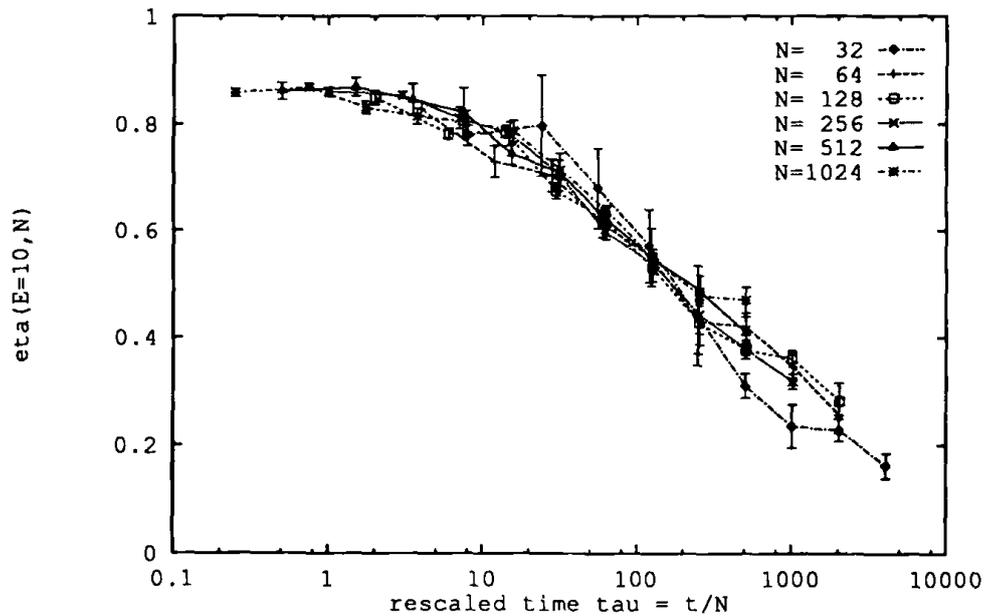


図 3.5: x 軸はスケールされた時間 $\tau = t/N$, 緩和の指標として y 軸に規格化されたスペクトル・エントロピー $\eta(E, N)$ (前節の文献 [PL90] と同じもの) を表す。モデルは FPU_β で系のエネルギーは $E = 10$ (stochasticity threshold 近傍) に固定し、初期条件は $l_0 \in [N/32, 3N/32]$ となるようなモードパケットを等分配励起している。プロットシンボルの違いはシステムサイズの違いを示しており、異なるシステムサイズをもつ系の時間発展が時間のスケーリングによって重なることが示されている。すなわち、時間スケールが N に対して線形に増加することを示唆されている。(文献 [KLR94] より転載)

また、秩序・カオスの遷移領域 (stochasticity threshold) におけるダイナミクスの詳細に着目し、2つの異なる不安定化のメカニズム、およびそれらを示す2つの threshold の存在を示唆した：

- (i) 初期に励起したモードパケットよりも少数のモードにエネルギーが集中し、わずかに変化された新たなパケットが形成される。
- (ii) モードパケットが不安定化してエネルギー等分配状態へ遷移する。

彼らは系の適切なコントロールパラメタが何であるかについても考察している。特に、初期条件のクラスによってコントロールパラメタがエネルギー E となる場合と、エネルギー密度 $\epsilon = E/N$ となる場合があることが示されている。彼らの結果によれば、初期に励起するモード l_0 を N に比例するように選んだ（例えば $l_0 \in [N/32, 5N/32]$ ）場合にはコントロールパラメタは E となるが、一方で $l_0 = 1 \sim 4, l_0 = 1$ などのように N と無関係に選択した場合には $\epsilon = E/N$ が適切なパラメタとなる（図 3.6）。

また彼らの研究対象は FPU β 模型だけでなく、より広いクラス of 非線形 Hamilton 系（対称/非対称 FPU α 系, 対称/非対称 Toda 格子, Gaussian ポテンシャル系）:

$$U(\Delta x_i) = \frac{1}{2}(\Delta x_i)^2 + \frac{1}{3}\alpha(\Delta x_i)^3 \quad (\text{FPU } \alpha), \quad (3.16)$$

$$U(\Delta x_i) = \frac{1}{2}(\Delta x_i)^2 + \frac{1}{3}\alpha|\Delta x_i|^3 \quad (\text{対称化 FPU } \alpha), \quad (3.17)$$

$$U(\Delta x_i) = \frac{1}{a^2} \left(e^{a\Delta x_i} - \frac{1}{a}\Delta x_i - 1 \right) \quad (\text{戸田格子}), \quad (3.18)$$

$$U(\Delta x_i) = \frac{1}{2b^2} (e^{b\Delta x_i} + e^{-b\Delta x_i} - 2) \quad (\text{対称化戸田格子}), \quad (3.19)$$

$$U(\Delta x_i) = \frac{1}{2\beta} \left(1 - e^{-\beta\Delta x_i^2} \right) \quad (\text{Gaussian ポテンシャル}), \quad (3.20)$$

に対しても解析を拡張し、対称ポテンシャル系における遷移領域の挙動が FPU β 模型とよく同様の性質をもつことが示された（図 3.7）。ただしこれらの系を扱うに際して、彼らはポテンシャルの調和部分と非調和部分の比率

$$\mathcal{G} = \frac{\sum_{i=1}^N U(\Delta x_i) - \frac{1}{2}\Delta x_i^2}{\sum_{i=1}^N \frac{1}{2}\Delta x_i^2}, \quad (3.21)$$

を新たなパラメタとして導入した。

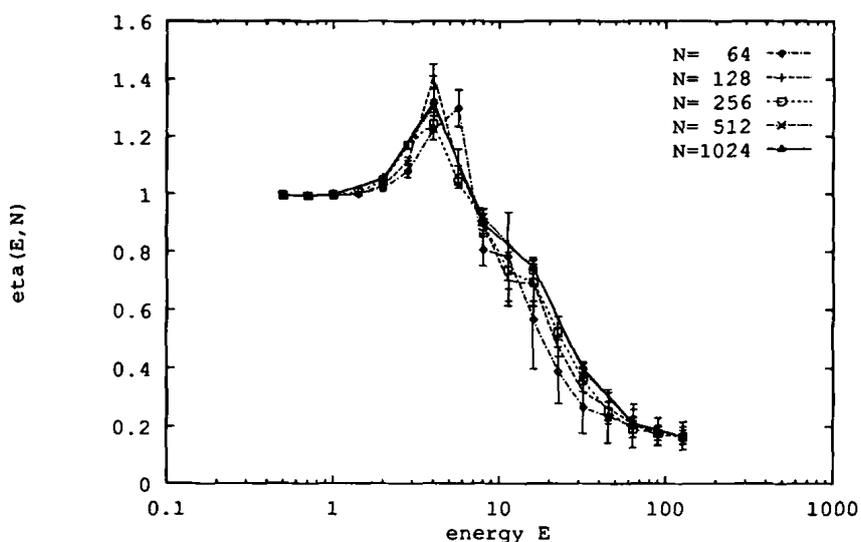
3.3.5 Toda 格子 vs. FPU α から特徴づけられる stochasticity threshold

Casetti らは、非線形可積分系として知られる Toda 格子と FPU α 模型を比較することでその緩和特性を捉えた [CCSPC97]。ここで Toda 格子は

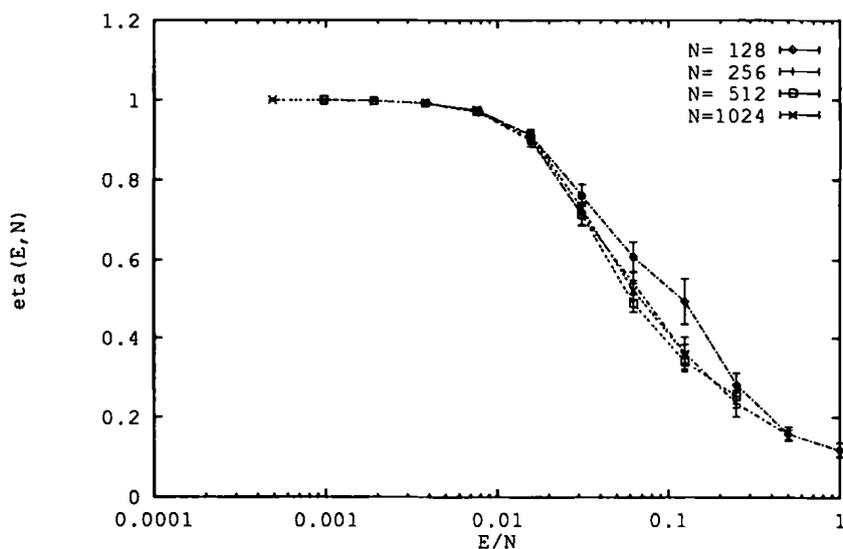
$$\mathcal{H}^{\text{Toda}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2}k_i q_i^2 + \frac{1}{4\alpha^2} \{ \exp[-2\alpha(q_{i+1} - q_i)] + 2\alpha(q_{i+1} - q_i) - 1 \} \right], \quad (3.22)$$

なる Hamiltonian で表される。この Hamilton 系は非線形相互作用を伴うにも関わらず、包含系をなす N 個の保存量をもつ可積分系である [H74][Fla74]。Toda 格子のポテンシャルを 3 次まで展開したものは FPU α 模型と一致する。

彼らは FPU α 模型と Toda 格子における最大 Lyapunov 指数 λ_1 の時間的収束を観察し、ある時刻までは FPU α 模型は可積分系である Toda 格子と区別されないことを示した。しかしながらある時刻を通過すると、2つの模型が突如として分離する



(a) FPU β 模型, 初期にパケット $l_0 \in [N/32, 5N/32]$ を等分配励起, $\tau = 16$. プロットシンボルの違いはシステムサイズの違いを表す。データは4つの random phase で平均したもの。横軸はエネルギー。



(b) FPU β 模型, 初期にパケット $l_0 = 1, 2, 3$ を等分配励起, $\tau = 16$. プロットシンボルの違いはシステムサイズの違いを示し, 横軸はエネルギー密度を表している。(なおこの結果は $l_0 = 1$ の場合にも同様に見られる。)

図 3.6: 異なる初期条件のクラスでの異なるコントロールパラメタ。時刻 $\tau = t/N = 16$ における緩和指標 η の値をさまざまなエネルギーもしくはエネルギー密度に対してプロットしている。初期励起モードパケットを N に比例して選択した場合 ($l_0 \in [N/32, 5N/32]$) エネルギー E をパラメタとすれば異なる N をもつ系の緩和特性はユニバーサルカーブ上にある。一方, N に関係なく $l_0 = 1, 2, 3$ を励起する場合, ユニバーサルカーブを生成するようなコントロールパラメタはエネルギー密度 $\epsilon = E/N$ となる。(文献 [KLR94] より転載)

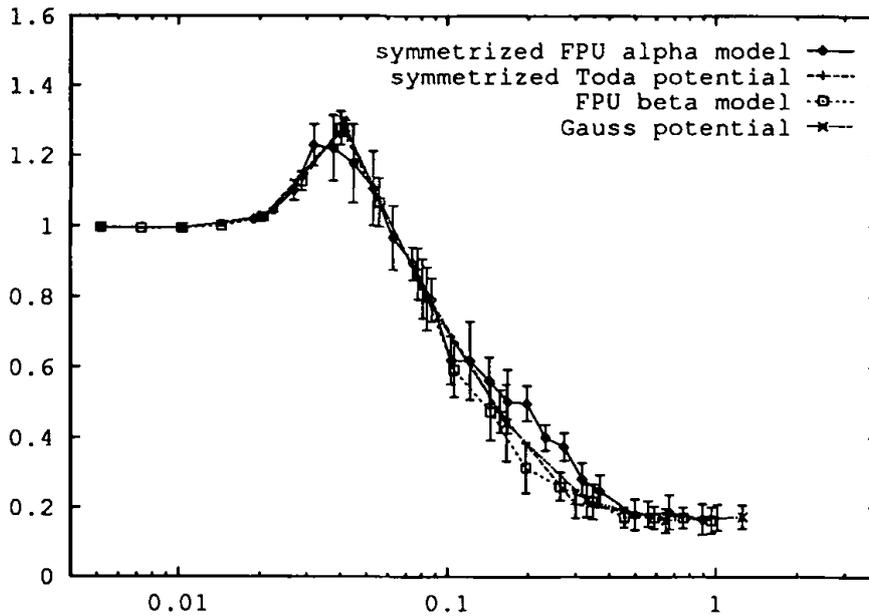


図 3.7: FPU β 模型といくつかの対称ポテンシャル系の比較。 $N = 128, \tau = 40$, 初期に 4-19 モードを等分配で励起。対称化 FPU α , 対称化 Toda 格子, Gaussian ポテンシャル系の挙動は FPU β のものときわめてよく一致する。図は $\tau = t/N = 40$ におけるスペクトラル・エントロピー η (縦軸) を, パラメタ \mathcal{G} (横軸) に関してプロットしたものを表している。ここで \mathcal{G} はポテンシャルの調和部分と非調和部分の比であり, $\mathcal{G} = \{\sum_{i=1}^N U(\Delta x_i) - \frac{1}{2}\Delta x_i^2\} / \{\sum_{i=1}^N \frac{1}{2}\Delta x_i^2\}$ で与えられる。論文の著者らは特に遷移領域 (図中 $\mathcal{G} = 0.01$ から 0.1 に見られる過渡的な領域) での挙動の一致に着目している。(文献 [KLR94] より転載)

現象が見られた (図 3.8(a))。この分岐は秩序的運動から非可積分的挙動への遷移を意味し、とくに分岐点ではソリトンの構造の崩壊が起きていると彼らは推測している。また、この分岐点の時刻を trapping time τ_T とし、 η が 0.1 に到達した時刻を equipartition time τ_E としたとき、それらのエネルギー密度 ϵ_0 依存性は図 3.8(b) に示したようになる。彼らは、FPU のオリジナル論文で報告された再帰現象が見られる状況においても十分長い時間で緩和が起きることを想定すると、 $\tau_E \sim \epsilon^{-3}$ から、その緩和時間は $\tau_E \sim 4 \times 10^{10}$ と見積もられることを示した (図 3.8(b) のアスタリスクを参照)。

また、Toda 格子からの trapping time τ_T は図 3.9 のようなエネルギー密度 ϵ 依存性をもつ。 ϵ の低下に伴い単調に trapping time が伸びてゆく領域に続き、突然発散傾向が現れる領域が確認できる。さらにきわめて低い ϵ に対して、システムサイズ N に依存した stochasticity threshold が存在することが示唆されている。trapping time τ_T の発散的傾向は相空間に非常に狭いボトルネックが存在していることによるもので、彼らはこれが「乗り越えることのできないバリア」であると仮定している。

stochasticity threshold に関するこれらの現象は、エネルギー曲面上でグローバルであるのか、それとも初期条件に依存する局所的なイベントであるのかという問題意識のもと、彼らは初期条件のクラスの違いがもたらす影響についても調べている。そこでは 2 種類の初期条件クラス：

(i) $q_i(0) = A \sin(2\pi ni/N)$, $A \neq 0$, $p_i(0) \neq 0$ (Gaussian random)

(ii) $A = 0$, $q_i(0) = 0$, $p_i(0) \neq 0$ (Gaussian random)

が扱われている。結果として、 $\epsilon > 10^{-2}$ の領域では初期条件のクラスに依らず最大 Lyapunov 指数 λ_1 はユニバーサルカーブ上に乗るが、 $\epsilon < 10^{-2}$ の低エネルギー密度領域では初期条件のクラスの違いが顕在化し、カオスと秩序が共存する相空間構造が存在すると推測されている (図 3.10)。

システムサイズ N 依存性に関しては stochasticity threshold が

$$\epsilon_c \sim 1/N^2, \quad (3.23)$$

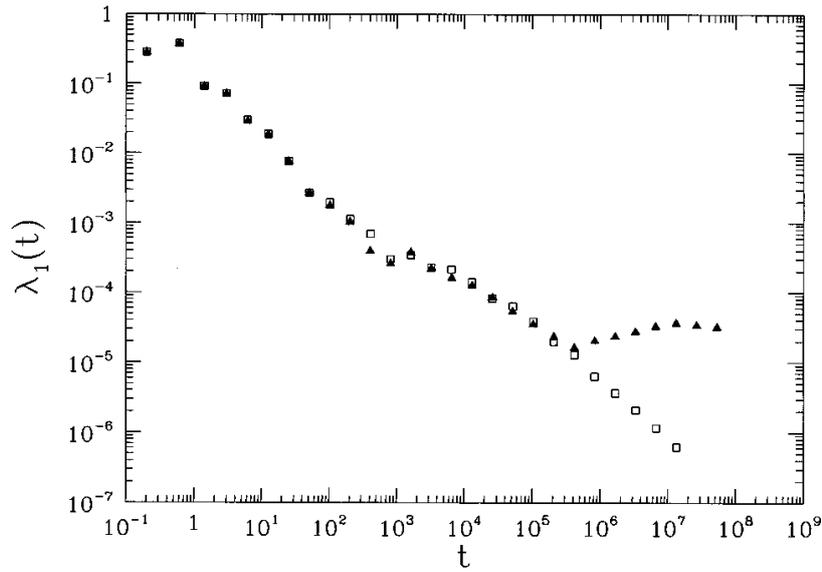
で評価されることが見出された (図 3.11)。

3.3.6 熱力学極限における緩和のスケーリング

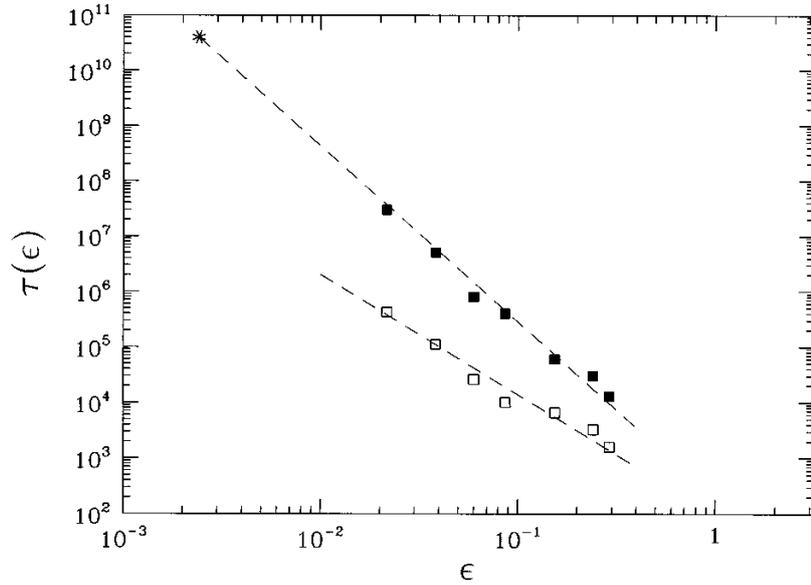
Luca らは FPU β に関して熱力学極限における緩和のスケーリングを導いている [DLLR99]。緩和の指標はスペクトラル・エントロピーから計算される有効励起自由度

$$n_{\text{eff}} = \exp \left[- \sum_{k=1}^N w_k \log w_k \right], \quad (3.24)$$

が用いられている (この指標は [DLLL95][DLR95][DLLR96] でも導入されている)。彼らは以下のような “physical initial condintion”, “mechanical initial condition” と呼ばれる 2 種のクラスの初期条件に対して、熱力学極限における緩和のスケーリングに違いが出ることを示した (図 3.12)。

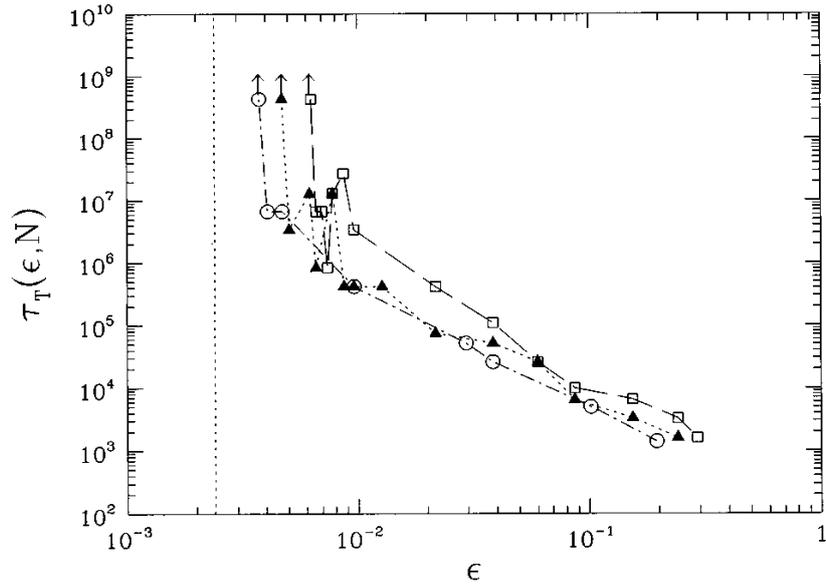


(a) Toda 格子と FPU_α 模型における最大 Lyapunov 指数の収束。横軸は時間 t ，縦軸は最大 Lyapunov 指数 λ_1 であり， \blacktriangle が FPU_α ， \square が Toda 格子の挙動を表す。2系はある時刻 τ_T で分岐する。論文の著者らはこの τ_T を trapping time と呼んでいる。（ $N = 32, \epsilon = E/N = 0.0217$ 。）

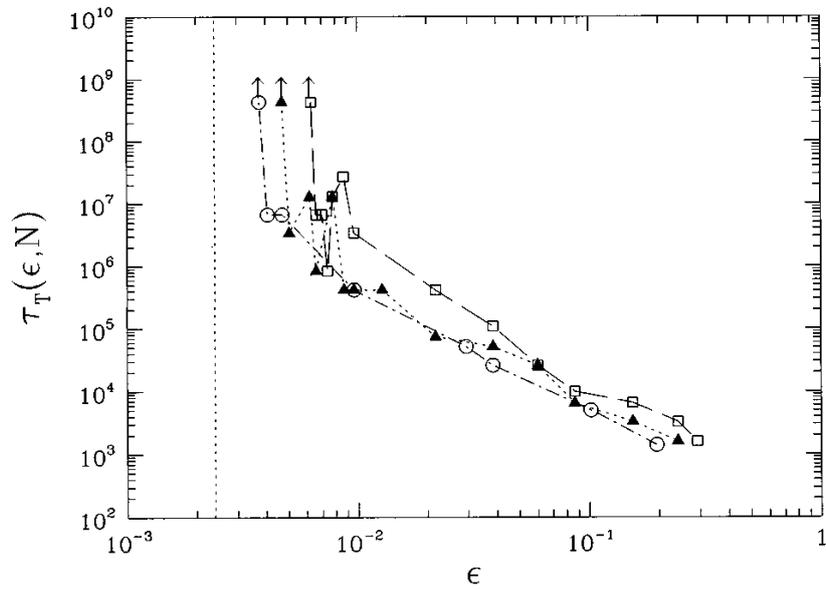


(b) FPU_α 模型における equipartition time τ_E と trapping time τ_T のエネルギー密度 ϵ 依存性。横軸は ϵ ，縦軸は trapping time τ_T (\square) および equipartition time τ_E (\blacksquare) を表す。equipartition time については $\tau_E \sim \epsilon^{-3}$ なる関係が成立する。 τ_E (\blacksquare) の系列の左端に示された $*$ は FPU paradox が観測される地点に対応している。FPU paradox (再帰現象) は緩和が起きない例と考えられていたが、彼らの結果は、実は膨大な時間経過の後に緩和がおきる可能性を示している。

図 3.8: 最大 Lyapunov 指数の時間的収束の様子と，relaxation time および trapping time の励起エネルギー密度依存性。（文献 [CCSPC97] より転載）



(a) trapping time τ_T のエネルギー密度 ϵ 依存性。□, ▲, ○はそれぞれ $N = 32, 64, 128$ を示す。 ϵ の低下に伴い緩和時間が単調に伸びてゆく領域に続いて、わずかな ϵ の現象に対して急激に trapping time τ_T が増加する挙動が見られ、最終的には、低エネルギー密度領域にシステムサイズに依存した stochasticity threshold が存在することを示唆している。



(b) 最大 Lyapunov 指数 λ_1 のエネルギー密度依存性。□, ▲, ○はそれぞれ $N = 32, 64, 128$ を示す。この場合も (a) と同様、低いエネルギー密度領域にシステムサイズに依存した stochasticity threshold が存在することを示唆している。

図 3.9: trapping time τ_T と最大 Lyapunov 指数のエネルギー密度 ϵ 依存性。(文献 [CCSPC97] より転載)

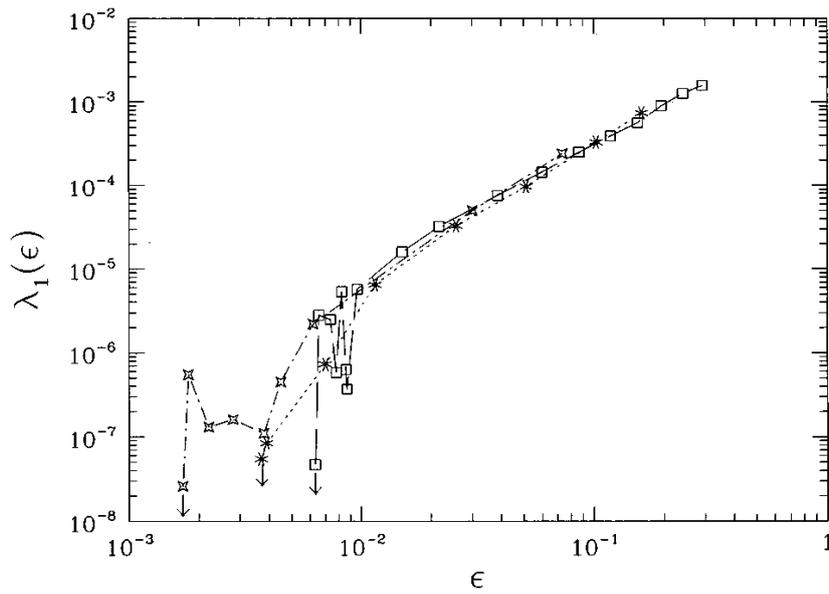
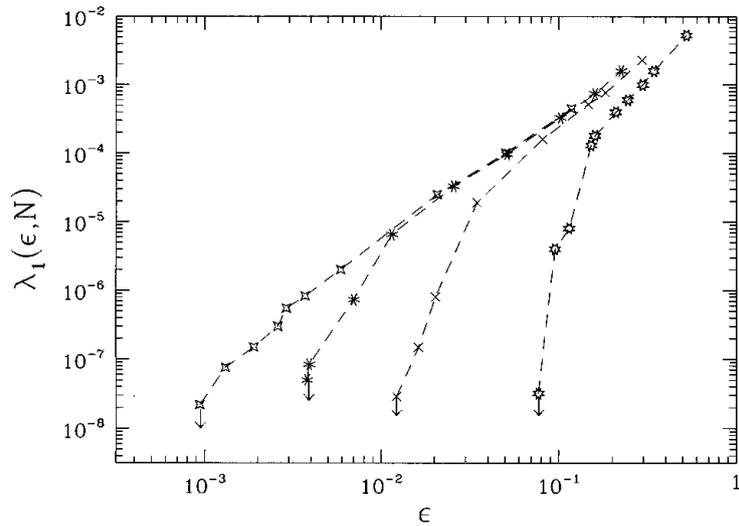
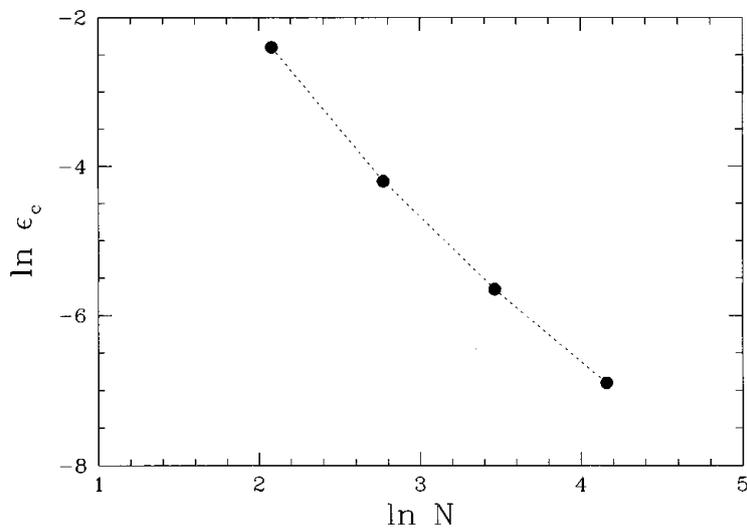


図 3.10: 初期条件のクラスの違いが $\lambda_1(\epsilon)$ に与える影響。□は $A \neq 0$ でランダムでない初期条件を与えたもの、*は $A = 0$ でランダムな初期条件を与えたもの、星形は $A \neq 0$ でランダムな初期条件を与えたものを表す。 $\epsilon > 10^{-2}$ の領域では初期条件クラスに依存しないユニバーサルカーブが確認できるが、低エネルギー密度領域においては初期条件のクラスの違いが顕在化している。初期条件の違いによって stochasticity threshold が異なることから、カオスと秩序が共存するような相空間構造があると推測されている。(文献 [CCSPC97] より転載)



(a) 最大 Lyapunov 指数 λ_1 のエネルギー密度 ϵ 依存性。プロットシンボルの違いはシステムサイズの違いを表し、星状のポリゴンは $N = 8$, \times は $N = 16$, $*$ は $N = 32$, 星形は $N = 64$ の結果を表す。高いエネルギー密度ではシステムサイズ依存性はほとんど見られないが、低いエネルギー密度ではシステムサイズ依存性が顕著となり、矢印に示したような N 依存の stochasticity threshold が存在する。



(b) (a) で得られた stochasticity threshold ϵ_c のシステムサイズ依存性。 $\epsilon_c \sim 1/N^2$ と見積もられ、 N の増大とともに ϵ_c が消失する傾向を持つ事が分かる。

図 3.11: stochasticity threshold のシステムサイズ依存性 (文献 [CCSPC97] より転載)

(**physical init. cond.**) 初期励起モードパケットのサイズが $\delta\gamma = N/16$ となるような低周波数モードパケット $N/64 - 5N/64$ を励起する。この初期条件のもとで、システムサイズが大きな場合 ($N = 256, 521, 1024, 2048, 4096$)、エネルギー密度 $0.03 \leq E/N \leq 0.8$ の範囲において、系の時間発展 $n_{\text{eff}}(t)$ がユニバーサルカーブに乗る。

(**mechanical init. cond.**) 初期励起モードパケットのサイズを $\delta\gamma = 5$ に固定し、モードパケット $N/64 - N/64 + 4$ を励起する。この初期条件のもとでは大きなシステムサイズ ($N = 256, 512, 1024, 2048$) に対してスケーリングの分離が見られる。すなわち、緩和の初期においては普遍的な緩和が見られない過渡的現象が見られるが、後期段階ではユニバーサルカーブが存在する。緩和初期については \sqrt{N} で時間をスケールすると部分的にユニバーサルカーブを構成することができる。

彼らはさらに、このような異なる N の間のスケーリングに加えて、異なるエネルギー密度間のスケーリングについても言及している。図 3.13 に有効自由度 n_{eff} の対数時間発展を示した。初期の過渡的挙動と、後期の収束的挙動の間に、単調で linear な増加が確認できる。linear な増加を示す部分は、 E/N が 2 倍になるとともに図上左側に等間隔で移動しており、背景にベキ則 $(N/E)^\alpha$ があることが示唆されている。事実、時間を

$$T = t \cdot (\beta E/N)^3, \quad (3.25)$$

とスケールすると普遍緩和曲線が構成される。また $n_{\text{eff}} = 0.4$ となる時刻と E/N の関係からもベキ則の指数が $\alpha = 3$ であることが分かる。このスケーリングは彼らの理論的な評価：

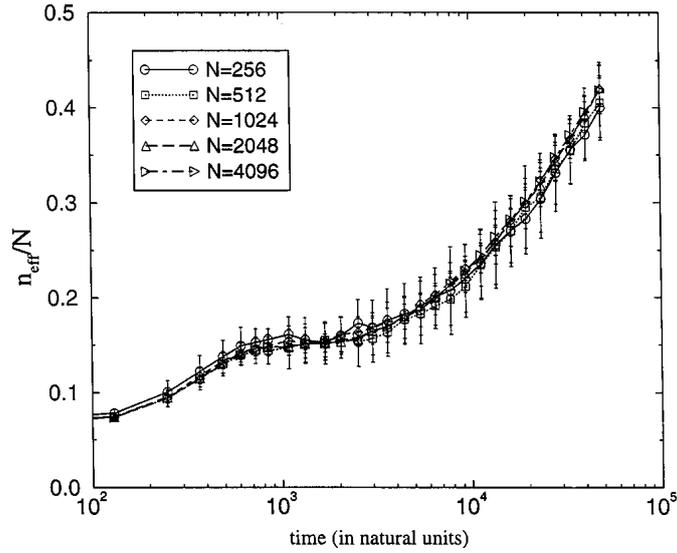
$$T \sim \frac{2\pi}{(\beta E/N)^3} \log \left(\frac{\pi}{2\beta E/N} \right), \quad (3.26)$$

とも整合している。

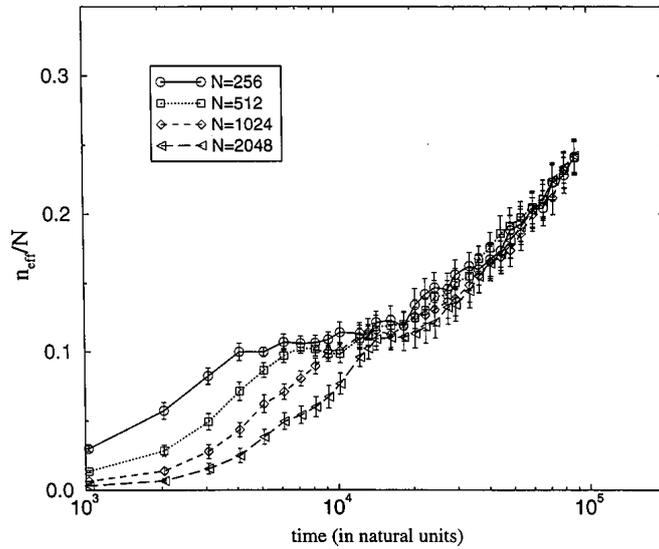
3.3.7 Chaotic Breather の形成と崩壊

非線形格子振動系における緩和過程を理解するひとつの切り口として、Chaotic Breather (カオスのブリーザー) がある。Chaotic Breather は、非線形格子系において見られる特殊な局在モードである。まずは系に多数の非線形局在モードが発生し、これらが衝突を繰り返しながらエネルギーを交換し最終的にエネルギーを占有するような非線形局在モード (Chaotic Breather) が形成される。この Chaotic Breather はしばらくの間運動したのちに崩壊し、そのエネルギーが全系に拡散する現象が見られる [BKR90][CDRT98]。

Ullmann らは、FPU β 模型における Chaotic Breather の形成と緩和に着目し、その時間スケールに関する知見を与えた [ULC00]。彼らは全エネルギーの 90% をある高周波数モード γ に与え、その近隣のモードに残りの 10% を与える初期条件を取っ

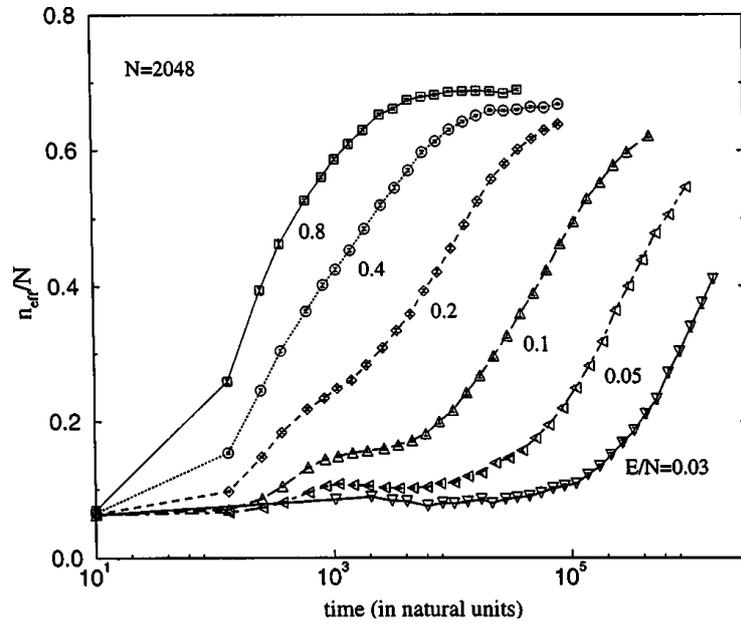


(a) $E/N = 0.1$, physical initial condition の下でのダイナミクス

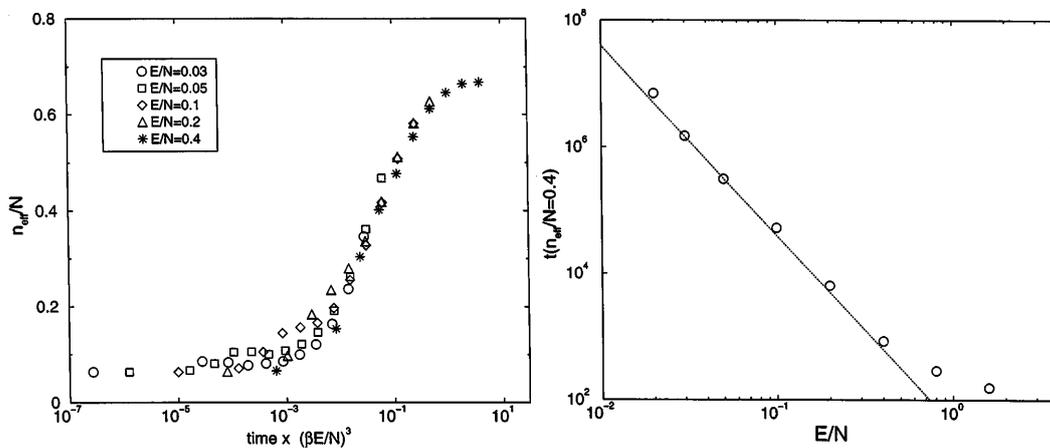


(b) $E/N = 0.1$, mechanical initial condition の下でのダイナミクス

図 3.12: 熱力学極限における緩和のスケールリングに関する初期条件クラスの依存性。横軸は時間 t , 縦軸は規格化された有効励起自由度 n_{eff}/N 。システムサイズに比例したサイズのモードパケットを初期に励起する “physical” な初期条件 (a) と, システムサイズとは無関係に一定のサイズのモードパケットを初期励起する “mechanical” な初期条件 (b) のもとでは緩和過程のスケールリングに違いが現れる。physical initial condition の場合, 緩和のダイナミクス全域がユニバーサルカーブに乗るが, mechanical initial condition の場合にはユニバーサルカーブを持たない過渡的段階とユニバーサルカーブを持つ段階に分かれている。過渡的段階に関しては時間を \sqrt{N} でスケールすることでユニバーサルカーブを構成することができる。(文献 [DLLR99] より転載)



(a) physical initial condition の下でのダイナミクス。プロットシンボルの違いはエネルギー密度の違いを表している。ダイナミクスはエネルギー密度を2倍するごとに1桁（未満）ほど速い緩和へと移行していることが分かる。この観測から、時間に関してべき的なスケーリング則が成立することが推測される。



(b) 時間スケールを $t \cdot (N/E)^3$ とするとユニバーサルカーブが構成される。

図 3.13: physical な初期条件のもとでの時間スケーリング則。(文献 [DLLR99] より転載)

た。緩和の指標として有効振動子自由度：

$$n_{\text{osc}} = \frac{1}{N} \exp \left[- \sum_{i=1}^N e_i \log e_i \right], \quad (3.27)$$

$$e_i = \frac{1}{N} \left\{ \frac{1}{2} p_i^2 + \frac{1}{2} [(q_{i+1} - q_i)^2 + (q_i - q_{i-1})^2] + \frac{\beta}{4} [(q_{i+1} - q_i)^4 + (q_i - q_{i-1})^4] \right\}, \quad (3.28)$$

を導入した。ここで e_i は振動子のエネルギーである（基準振動エネルギーではない）。図 3.14 に Chaotic Breather の形成と崩壊を示した。左図は横軸が時刻、縦軸が振動子の番号、濃淡はそのサイトでのエネルギー量を表している。時間発展とともに、(i) 複数の局在構造の形成、(ii) それらの合体による Chaotic Breather の形成と運動、(iii) Chaotic Breather の崩壊が確認できる。右図は (i)-(iii) の各時間領域における振動子エネルギーと基準振動エネルギーを表す。(i)(ii) においては Chaotic Breather を示す鋭いピークが見られるが、崩壊後にピークは消滅する。また、Chaotic Breather の消滅とともに低周波数モードへのエネルギー輸送が確認できる。彼らは初期励起モード γ 、システムサイズ N 、エネルギー密度 E/N の違いが Chaotic Breather の形成に与える影響を調べた。結果として初期励起モードを $\gamma < 105$ とした場合には breather は形成されないが、 $\gamma > 105$ となると breather が形成されることが示された (図 3.15(a))。また、系の緩和時間 T_{eq} 、Chaotic Breather が形成されるために必要な時間 T_b のエネルギー密度依存性はそれぞれ $T_{\text{eq}} \propto (E/N)^{-2}$ 、 $T_b \propto (E/N)^{-1}$ と評価された (図 3.15(c)(d))。またシステムサイズが $N = 128$ となった点を境界にして T_{eq} の N 依存性が変わることが示された (図 3.15(b))。ただし、緩和時間 T_{eq} は n_{osc} が 0.7 を超えた時刻、Chaotic Breather の形成時間 T_b は n_{osc} が 0.3 未満に抑えられている時間で定義している。なお、 $T_{\text{eq}} \propto (E/N)^2$ は高周波数モードのカオスの振動から低周波数モードにエネルギーが stochastic に拡散することを拡散することを仮定すると理論的に導かれる。さらに、 T_{eq} がエネルギー密度に関するべき則よりも遅くなるような threshold が見積られる。彼らの研究は Chaotic Breather の形成・崩壊過程の観点から 2 つの異なるダイナミクスが存在することを見出したと言える。

3.4 中興期:FPU問題再訪・系統的研究の興隆 - Metastable Perspective への招待

Fucito らの研究 [FMM+82] において初めて指摘された「異なる緩和過程」の存在は 2005 年以降に展開された系統的研究によってその全体像がある程度明らかにされてきた。きわめて系統的行われたこれらの先行研究は Fermi-Pasta-Ulam 系が示す異常な緩和に対して “Metastability perspective” [BCGG08] という理解様式を提案している。すなわち緩和過程に異なる時間スケールが存在し、ある種の平衡状態であると思われていた状態が、実は緩和の発展途上にある準安定な「中間状態」であったとする知見である。本章ではこの metastability perspective なる観点を作り上げたいくつかの研究を詳しく解説する。

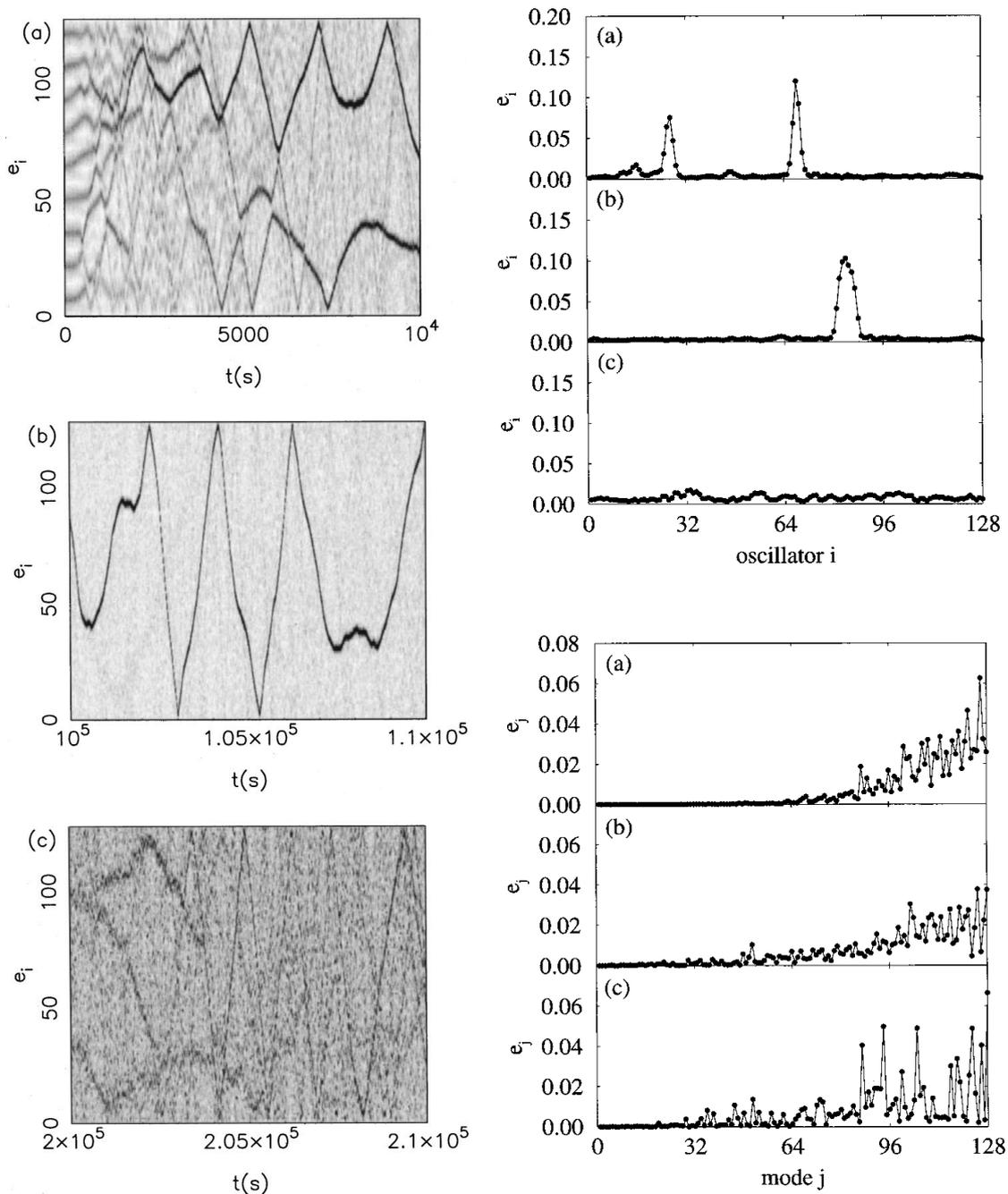
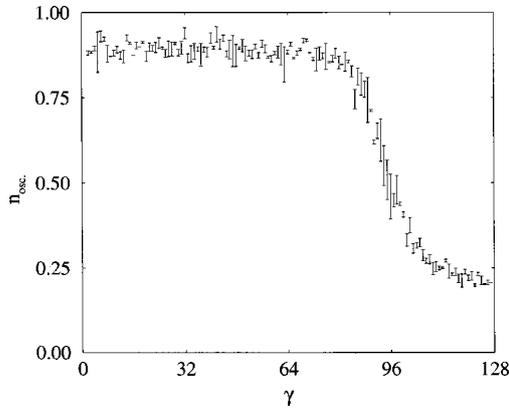
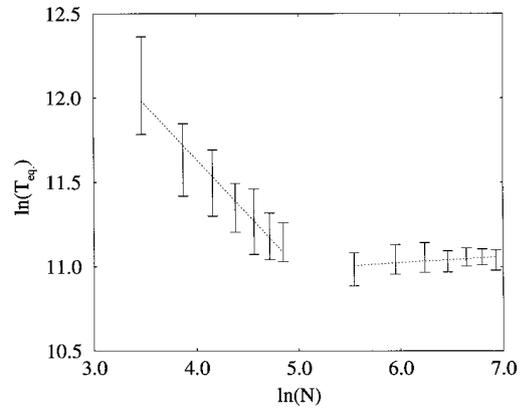


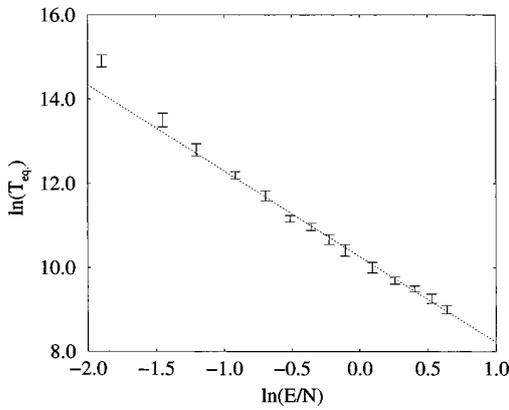
図 3.14: FPU β 模型における Chotic Breather の形成と崩壊。左半分の図は横軸が時刻、縦軸が振動子の番号を表し、濃淡はそのサイトでのエネルギー量を表す。系内のエネルギー伝搬に関して特徴的な3つの時間領域が取り上げられており、まずは初期段階として多くの局在した構造が形成されたのち (a)、それらはある1つの局在構造に合体し Chaotic Breather となる (b)。この Chaotic Breather はしばらく系を動き回った後崩壊し、エネルギーは全系に拡散してゆく (c)。右上図と右下図は、各時間領域 (a)(b)(c) における振動子エネルギー e_i および基準振動エネルギー e_j の分布の様子を示している。(文献 [ULC00] より転載)



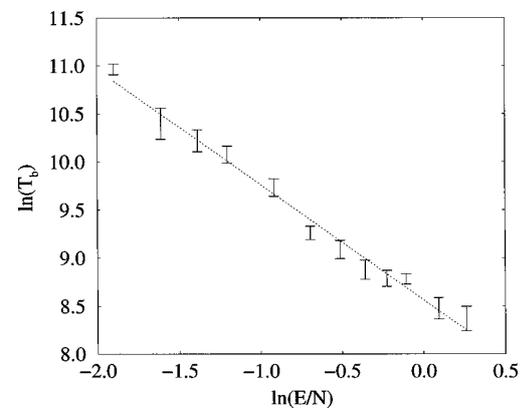
(a) 初期励起モード依存性。 $t = 5 \times 10^4$ における初期励起モード群の支配的なモード γ と有効振動子自由度 n_{osc} の関係。 $\gamma = 105$ を以降の高周波数モードを励起した場合には breather が形成されるが、 $\gamma = 105$ よりも低い周波数モードを励起した場合には breather が形成されない。



(b) 緩和時間 T_{eq} のシステムサイズ依存性 $N = 128$ よりも小さなシステムサイズでは N 依存性があり N 増加とともに緩和時間が減少するが、 $N = 128$ よりも大きなシステムサイズでは N 依存性が消失する。



(c) 緩和時間 T_{eq} のエネルギー密度依存性。 $T_{\text{eq}} \propto (E/N)^{-2}$ なる関係が成立する。



(d) chaotic breather の形成時間 T_b のエネルギー密度依存性。 $T_b \propto (E/N)^{-1}$ なる関係が成立する。

図 3.15: 緩和時間および Chaotic Breather 形成時間の初期条件, システムサイズ, エネルギー密度依存性。(文献 [ULC00] より転載)

3.4.1 L. Berchiolla, L. Galgani, A. Giorgilli (2004) [BGG04]

Berchiolla らは FPU $\alpha\beta$ 模型 ($\alpha = \beta = 1/4$) を対象に、モードパケット (ある個数の基準振動群) の保有エネルギーに着目して緩和時間を導入しその性質を捉えた。彼らの研究は、エネルギーがある特定のモード群に集中的に局在する現象 (natural packet phenomena) に注目してそのタイムスケールを考察するものであった。彼らは最低周波数モード励起, および複数の低周波数モード群を励起する初期条件のもとで、等分配に向けて 2 つの異なる時間スケールが存在することを示した。

short time scale : ω_c を最大周波数とするモード群 (natural packet) にエネルギーが広がる (natural packet phenomena) 現象の時間スケール。

much longer time scale : natural packet から他のモードにエネルギーが流出して等分配状態に到達する時間スケール。

また、さらに natural packet に含まれるモードの最大周波数 ω_c と系のエネルギー密度 $\varepsilon = E/N$ の間に

$$\omega_c(\varepsilon) \sim \varepsilon^{1/4}, \quad \varepsilon_c(\omega) \sim \omega^4, \quad (3.29)$$

なる関係があることを示した。すなわち「あるエネルギー密度 ε のもとで、natural packet が含む最大周波数モードの周波数は ω_c である。」, あるいは「ある周波数 ω のモードが最大周波数モードとして natural packet 内に含まれるための臨界エネルギー密度は ε_c である。」ことを意味する。

彼らはモードパケットがもつエネルギー :

$$\varepsilon_1 = E_1, \varepsilon_2 = E_1 + E_2, \dots, \varepsilon_s = E_1 + E_2 + \dots + E_s, \dots, \quad (3.30)$$

を導入し、第 s パケットの保有エネルギーが全基準振動エネルギーに対して占める割合

$$\theta_s = \frac{\overline{\varepsilon_s}}{\sum_{j=1}^N E_j}, \quad (\theta_1 < \theta_2 < \dots < \theta_N), \quad (3.31)$$

を定義した。たとえば初期に最低周波数モードを励起した条件ならば、 $t = 0$ で $\theta_s^0 = 1$ ($s = 1, 2, \dots, N$), 等分配状態で $\theta_s^{\text{eq}} = s/N$ となる。また、彼らによれば第 s パケットは $\Delta\theta_s = (N - s)/N$ だけ占有率を失うとパケット内部で等分配に達するとされている⁷。いま、 θ_s が $\gamma\Delta\theta_s$ ($\gamma < 1$) だけ占有率を失った時刻を第 s モードパケットの緩和時間 t_s^R と定義する。彼らは $\gamma = 0.2$, すなわちダイナミクスの初期過程に着目している。 θ_s の時間発展の典型的な例と、緩和時間の定義は図 3.16 に示す通りである。緩和の判定基準はパケット毎に異なり、この緩和時間は各モードパケット内で

⁷彼らは指標を導入するにあたって、ダイナミクスに関わる重要な仮定を 2 つ置いている。まず、 $\theta_1 > \theta_2, \dots, \theta_N$ が示すように、彼らはエネルギーが低周波数モードから高周波数モードに順次輸送されることを想定している。しかしながら、この仮定はあまり自明ではない。事実、「誘導現象」と呼ばれる急激な不安定化現象が現れる場合には周波数の大小順とは無関係なエネルギー移動が起きることがある。また、「第 s パケットが $(N - s)/N$ だけ占有率を失ったときにパケット内では等分配が成立している」とも仮定している。これも先の仮定と同じく、ダイナミクスの詳細を観察しなければ正当化されない仮定である。

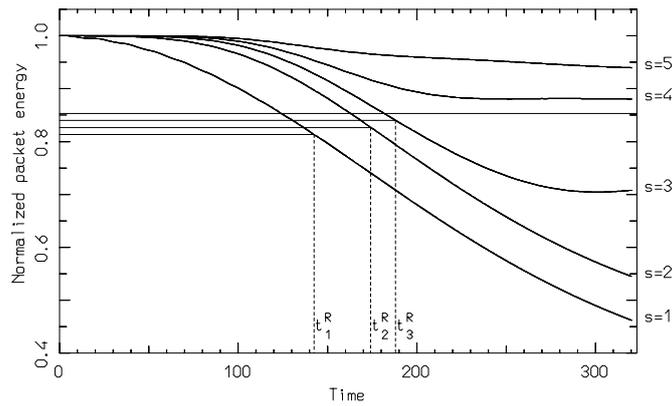


図 3.16: 第 s パケットのエネルギー占有率 θ_s の時間発展と、緩和時間の定義。(緩和判定レベルは s によって異なる。) (文献 [BGG04] より転載)

のエネルギー等分配達成の緩和時間と見なされている⁸。これを様々なエネルギーで計算することで緩和時間のエネルギー依存性図 3.17 が得られる。ここでは 2 つに明確に分離した緩和過程が見られる。エネルギーが高い領域から低い領域に移るにつれて natural packet を構成するモード数は激減する。高エネルギー領域での緩和特性は $t_s^R \sim E^{-1/2}$ で与えられ、低エネルギーではそのベキ則からの急激な分離が見られる。また、ある低いエネルギー一定のラインを観察すると、第 1 パケットから第 3 パケットまでのエネルギー流入はスムーズで行われるが、ある s で輸送が止まる様子を確認できる。また緩和時間のスケールが分離するエネルギーを臨界エネルギー $E^R(s)$ とすると、エネルギーが $E^R(s)$ を下回る場合に natural packet が最大 s 個のモードを含むこととなる。様々なシステムサイズにおける $E^R(s)$ は図 3.18(a), スケール変換による普遍曲線の構成は図 3.18(b) のようになる。結果として臨界エネルギー密度と natural packet の周波数 ω の間には $\varepsilon_c(\omega) = \omega^4$ なる関係が存在し、その逆関数 $\omega_c(\varepsilon) = \varepsilon^{1/4}$ の存在も示唆された。すなわち、natural packet の幅を ε の関数で表現することに成功している。

以上の結果から、彼らは 2 つの異なる緩和過程について下記のように結論づけている：(rather short time scale)：ある臨界周波数 ω_c を上限とする natural packet にエネルギーが広がる。(much longer time scale)：全体がエネルギー等分配状態となる⁹。また、彼らの主張する threshold は Bocchieri らが Lennard-Jones 系において存在を指摘した threshold [BSBL70] と同じものであると解釈している¹⁰。

さらに彼らは、緩和時間 t_s^R の N 依存性が初期条件クラスによって異なることに言及している (図 3.19)。初期に最低周波数モードただひとつにエネルギーを注入する場合 (赤)、あるサイズのモードパケットをその占有率が線形減衰するように

⁸注 6 に同じ

⁹ ただしこの時間スケールの定量化は彼らの論文中ではできていない。

¹⁰[BSBL70] においてはで紹介したように「ある臨界エネルギー密度を下回る領域で部分的に等分配が成立するようないくつかのパケットが存在すること」が指摘されている。

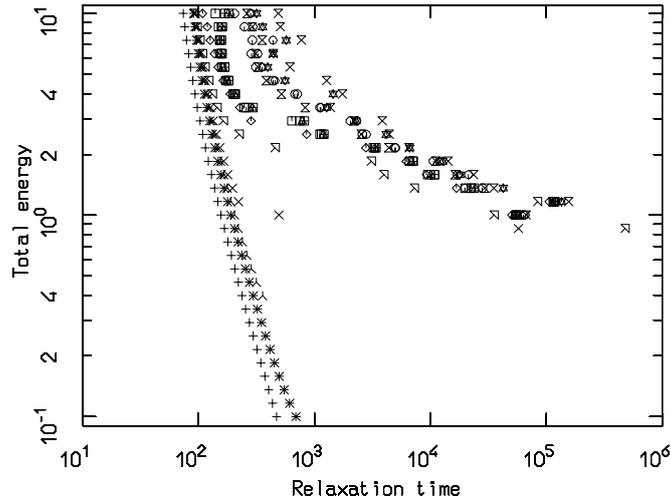
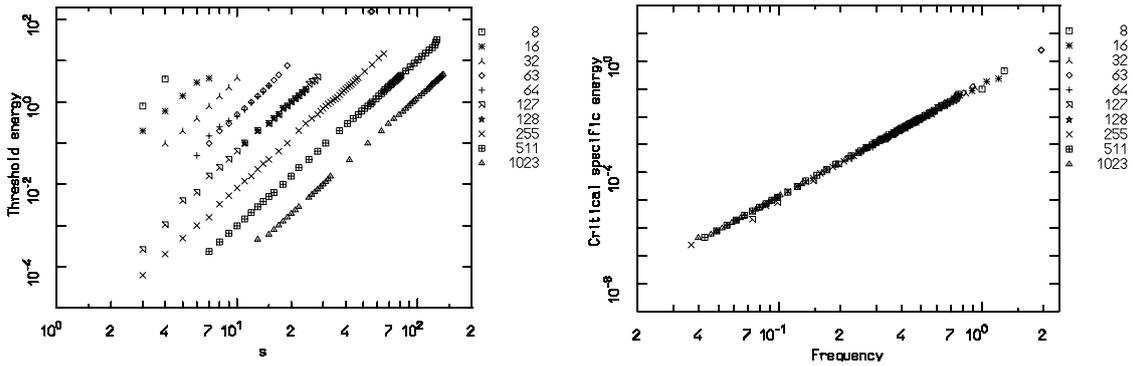


図 3.17: 第 s モードパケットの緩和時間 t_s^R のエネルギー依存性 ($N = 15$)。プロットシンボルの違いはパケット s の違いを表す。図中左から右に向かって s は増大しており、時間発展はあるエネルギーを固定した直線上で左から右へ展開する。エネルギーが低い領域においてはエネルギーの流入はあるパケット s で停止し、長時間を経てから次のパケットへとエネルギーが輸送されている様子が分かる。このように初期過程において独占的に長時間エネルギーを保有しているモード群を著者らは“natural packet”と呼んでいる。高エネルギー領域から低エネルギー領域に移行すると $t_s^R \sim E^{-1/2}$ なる緩和則 (赤) から急激に分離する遅い緩和過程が現れる。(文献 [BGG04] より転載)



(a) 臨界エネルギー E_c^R と s の関係。シンボルの違いは N の違いを示す。べき則が確認でき、さらに N の異なるデータ系列が等間隔に並ぶことから、 N に比例する量の存在が示唆される。

(b) $s \rightarrow s/N$, $E^R \rightarrow E^R/N$ でスケール変換を施し、さらに s とパケット内の特徴的な周波数の 1 対 1 関係を用いれば、普遍曲線 $\epsilon_c = \omega^4$ が得られる。

図 3.18: 臨界エネルギー密度 ϵ_c と臨界周波数 ω_c の間には $\epsilon_c(\omega) = \omega^4$, $\omega_c(\epsilon) = \epsilon^{1/4}$ なる関係が成立する。(文献 [BGG04] より転載)

励起させる場合（青）と等分配で励起させる場合（紫）の3つのクラスが議論され、それぞれ、熱力学極限のいに向けて緩和時間が発散、ある値へ収束、減少することが導かれている。また、単一モード励起以外の初期条件クラス、また大きなシステムサイズ ($N = 63$) においても「2つの異なる緩和時間スケール」が存在することが示されている（図 3.20）。

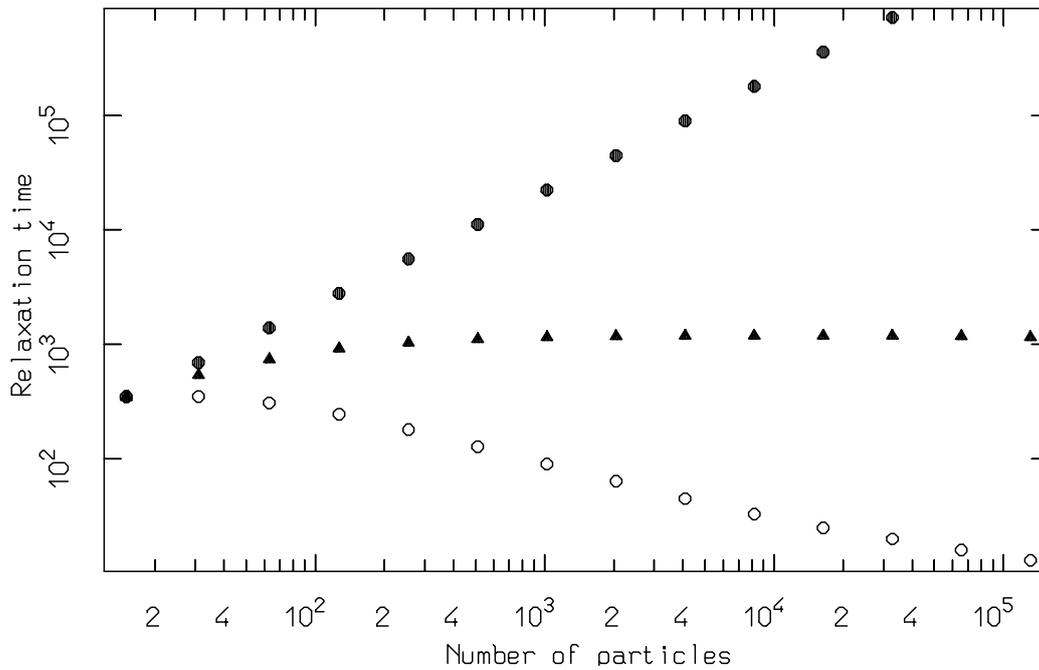


図 3.19: 緩和時間のシステムサイズ依存性（エネルギー密度は $\varepsilon = 0.01$ で固定）に関する初期条件のクラスの影響。最低周波数モードを単一に励起した場合（●）は緩和時間がシステムサイズに比例して増大し ($t_s^R \sim N$), この場合、熱力学極限 ($N \rightarrow \infty$) に向けて緩和時間が発散することを示唆される ($t_s^R \rightarrow \infty$)。いくつかのモード（モードサイズ $(N + 1/16)$) のパッケージを高周波数側に向けて線形減衰で励起した場合には（▲），システムサイズの増大に向けて緩和時間は定数に収束し，一方パッケージを等分配励起した場合には（○），システムサイズの増大とともになめらかに減少してゆく様子が見られる。ただしパッケージ励起をする場合には，そのサイズは natural packet を超えないよう設定されている。また緩和時間は，励起したパッケージがしかるべきエネルギーを失うまでの時間として定義されている。ただし，モードパッケージを励起する際のサイズは natural packet のサイズを超えないよう選ばれている。（文献 [BGG04] より転載）

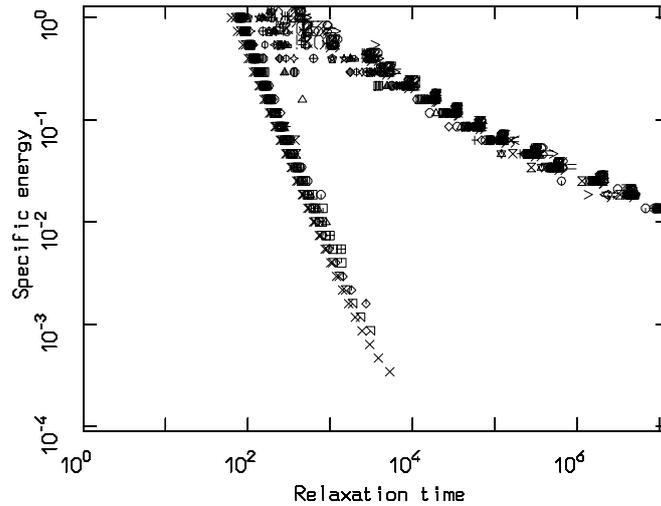


図 3.20: 単一モード励起とは異なるクラスの初期条件（周波数に関して下から 4 つのモードを等分配で励起），および大きなシステムサイズ ($N = 63$) においても「2 つの分離した緩和時間スケール」が確認できる。（文献 [BGG04] より転載）

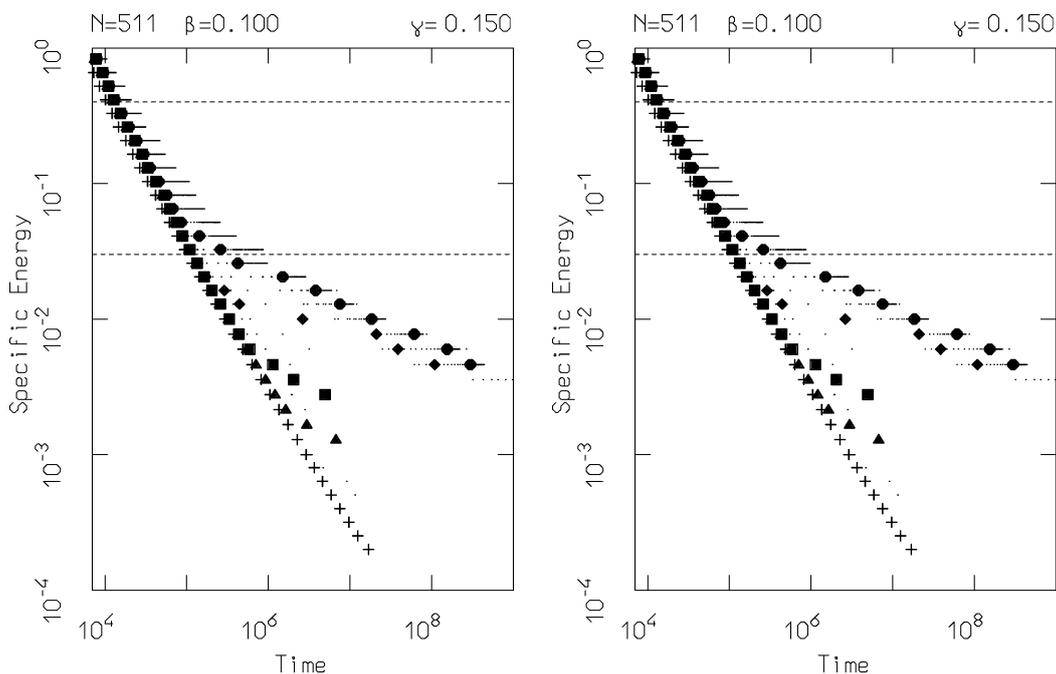
3.4.2 L. Berchiolla, A. Giorgilli, S. Paleari (2004) [BGP04]

前節で紹介した先行研究 [BGG04] では，緩和過程において独占的にエネルギーを保有する局在モード群が形成される現象-natural packet phenomena-を基軸として，2つの異なる緩和時間スケールの存在が明らかとなった。しかしながら，全体がエネルギー等分配状態となる“much longer time scale”の定量的評価はされていなかった。この論文の目的はその遅い緩和の定量的評価をすることにあつた。

彼らは FPU β 模型 ($\beta = 1/10$) において，遅い緩和時間スケールがエネルギー密度の逆数に関して指数関数的に遅くなること，すなわち $T \sim \exp(\epsilon^{-1/4})$ ，さらに熱力学極限においてもこの表式が有効であることを示した。ある非常に制限されたエネルギー領域においてはベキ則 $T \sim \epsilon^{-3}$ が見られるが，より広いエネルギー領域で有効なのは stretched exponential によるフィッティングであることが述べられている。初期条件は最低周波数モードを励起する場合と，[DLLR99] の physical initial condition と同様に $[(N+1)/64, 5(N+1)/64]$ なるパケットを励起する場合を考える。緩和の指標および緩和時間の定義は [BGG04] のものを踏襲している (θ_s, t_s^R)。彼らは緩和時間 T_s^R のエネルギー密度依存性 (図 3.21) において 2 つに分離した緩和時間スケールを確認し，この分離を「音響モードと光学モードの分離」と呼んでいる。この現象はさまざまな $N(31 - 1023)$ ，さまざまな $\gamma(0.05 - 0.95)$ (緩和の判定レベル) でも見られ，熱力学極限に向けて残り続ける性質であることが示唆されている。

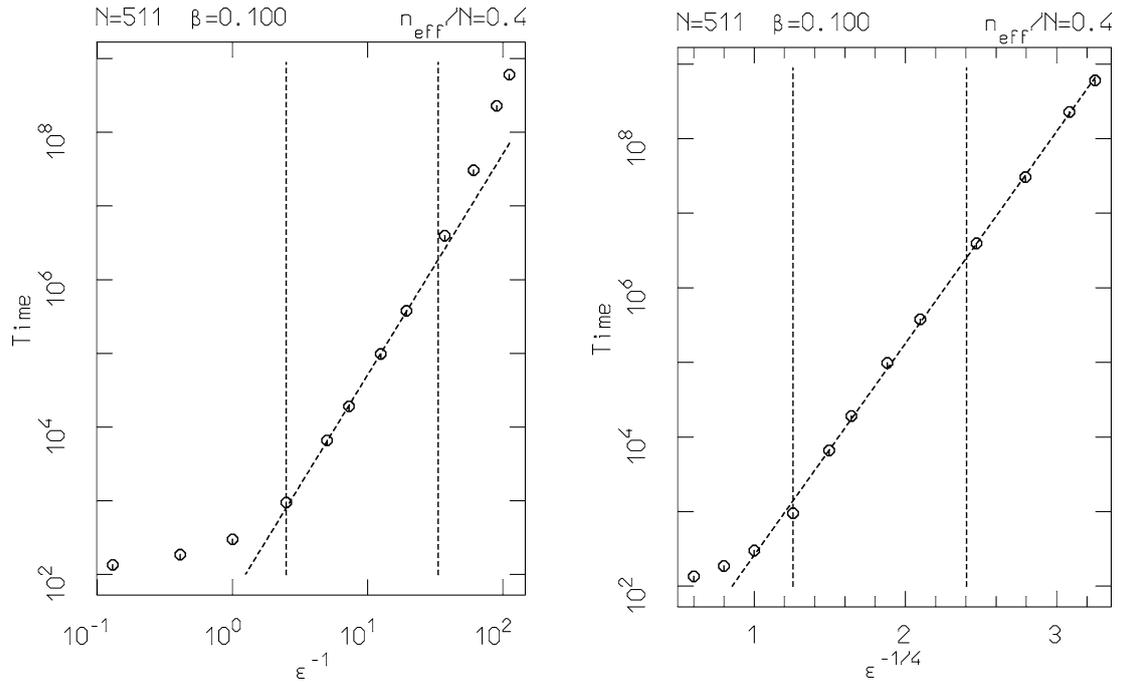
筆者らは，低周波数モードの間に強い resonance が存在し，それが metastable state を形成し限定された部分的なカオスがおきていると推測している。また Boltzmann-Jeans 予想，Nekhoroshev 理論 [BGG89] の文脈において 2 つの subsystem 間のエネルギー輸送率が摂動の強度 μ を用いて $\exp(-\mu^{-a})$ ， ($0 < a < 1$) (典型的に $a = 1/2$ or

1/4) で与えられることに着目し、FPU系の振動の振幅 $\varepsilon^{1/2}$ を摂動パラメタであるとして指数的なスケーリング則 $t_{\text{eff}} \sim \exp(\varepsilon^{-1/4})$ を予想した。このスケーリング則は数値的に確認された (図 3.22)。この stretched exponential によるフィッティングが広い摂動領域をカバーするのに対して、ある限定された摂動領域では $t_{\text{eff}} \sim \varepsilon^{-3}$ が成立している。このべき則は Luca らの結果 [DLLR99] と consistent である (図 3.8(b))。なお、図 3.22 で用いられている指標はスペクトラル・エントロピー S から算出される有効自由度 n_{eff} で、緩和時間は $n_{\text{eff}}/N = 0.4$ となった時刻として定義されている。この t_{eff} は小さな N を除いて N 依存性がなく、こうした stretched exponential 的な緩和特性が熱力学極限においても生き残ることを示唆している (図 3.23)。



(a) 最低周波数モードを初期励起した場合。 (b) N に比例したサイズのモードパケット $[(N+1)/64, 5(N+1)/64]$ を等分配励起した場合。

図 3.21: 緩和時間のエネルギー密度依存性。 x 軸が緩和時間 t_s^R , y 軸がエネルギー密度 ε を表す。計算のパラメタは $N = 511$, $\gamma = 0.150$ (緩和の判定レベル) で、プロットシンボルの違いはモードパケット番号 s の違いを表す。(a) は最低周波数モードを初期励起した場合で (b) は N に比例したサイズをもつモードパケットを初期励起 (Luca らが [DLLR99] において physical initial condition と呼んだ条件に相当) した場合の結果を示した。いずれの場合にも、2つの分離した緩和時間スケールが確認される。(文献 [BGP04] より転載)



(a) $0.03 \leq \epsilon \leq 0.4$ の範囲ではべき則 $t_{\text{eff}} \sim \epsilon^{-3}$ が成り立つ。
 (b) stretched exponential 則 $t_{\text{eff}} \sim \exp(\epsilon^{-1/4})$ はべき則 (a) よりも広い領域をフィッティングすることができる。

図 3.22: Boltzmann-Jeans conjecture, Nekhoroshev 理論を背景としたフィッティング $t_{\text{eff}} \sim \exp(\epsilon^{-1/4})$ は数値的に得られた緩和時間のエネルギー依存性とよく一致する (b)。また、 $N = 63 - 1023$ においても stretched exponential 則が確認されている。一方、ある限定された摂動強度領域 (エネルギー密度領域) においては $t_{\text{eff}} \sim \epsilon^{-3}$ が成立する (a) が、これは Luca らの結果 [DLLR99] と consistent である (図 3.8(b))。 (文献 [BGP04] より転載)

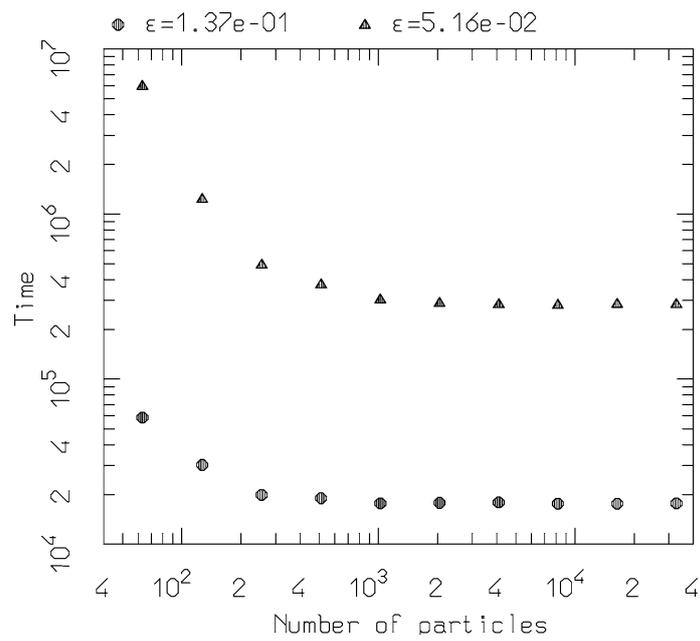


図 3.23: x 軸はシステムサイズ, y 軸は緩和時間を表す。 $N = 1023$ よりも小さなシステムサイズに関しては N の増大とともに緩和時間が現象する様子が見られるが, $N = 1023$ 以降, 熱力学極限に向けてシステムサイズ依存性が消失する傾向を示す。stretched exponential 則は $N = 1023$ においても成立することから, 筆者らは熱力学極限においてこの極めて遅い緩和が残りつづけると主張した。(文献 [BGP04] より転載)

3.4.3 S. Paleari, T. Penati (2005) [PP05]

先に紹介した [BGG04][BGP04] は、低周波数モードを励起する初期条件のもとでの挙動を議論していたが、それに対して Paleari らは高周波数モード励起を初期条件とした場合の緩和過程を考察した。結果として、低周波数励起のときと同様に metastability を示す natural packet の形成および stretched exponential 的に遅い緩和特性を見出した。さらに彼らの結果はそうした異常緩和が熱力学極限においても残り続けることを示唆した。緩和の指標としてスペクトラル・エントロピーを導入し、緩和時間は [BGG04][BGP04] と同じ方針で定義されている。

彼らはまず、低周波数領域のモードを励起した場合に natural packet が形成されること、および stretched exponential 則があらわれ、それが熱力学極限においても有効であることを追試している (図 3.24, 図 3.25)。筆者らによれば、この現象は模型 $(\alpha, \alpha\beta, \beta)$ の違い、緩和判定基準 γ 、システムサイズ N の違いによらず観測される。

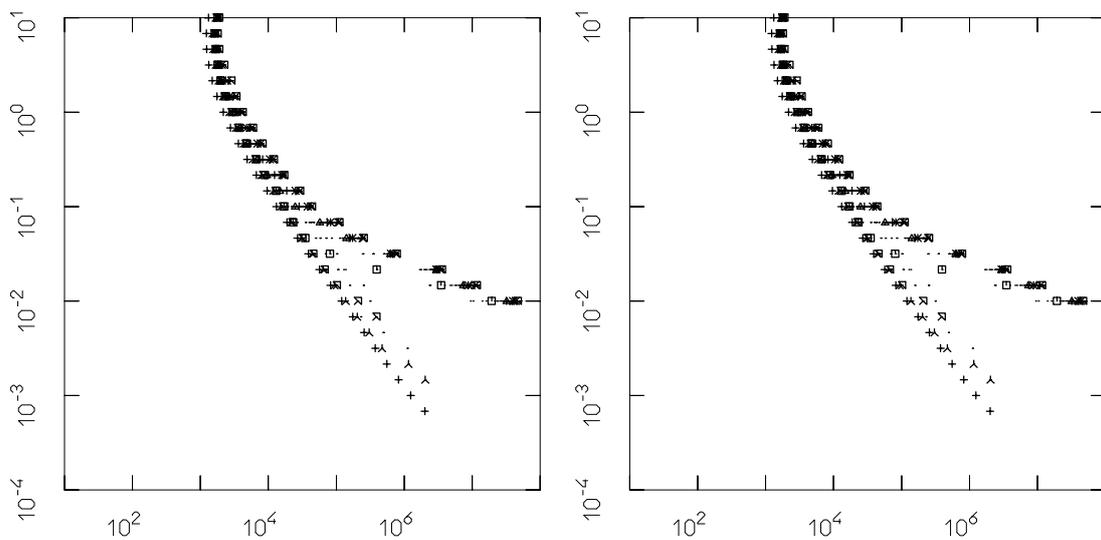
高周波数モード励起を初期条件とした場合に得られた緩和時間とエネルギー密度の関係を図 3.26 に示す。低周波数モード励起の場合と同様に、natural packet の形成と 2 つの緩和時間スケールの分離が存在することが示されている。また、stretched exponential 的な遅い緩和 (図 3.27) も確認できるが、低周波数モード励起の場合に見られた $T \sim \exp(\varepsilon^{-1/4})$ とは異なる指数 $-1/5$ をもつ緩和であることがわかる。この指数の違いについては理論的な正当化はされていないが、おそらく低周波数モードと高周波数モードの resonance の違いによるものであろうと彼らは推測している。

最後に彼らはきわめて重要な議論を展開している。すなわち、しばしば投げかけられる「熱力学極限で非エルゴード性が残存したとしても、それが相空間に占める割合は無視できる程度である」という批判に対して、彼らはエネルギー密度に関して stretched exponential 的に遅い緩和と natural packet の形成や metastability は相空間の特定の領域や狭い領域に限定されるような現象ではないと結論づけている。すなわちこれらの現象が、模型の違い、緩和判定基準の違い、初期励起モードの領域に関わらず広く成り立つ可能性を示している。図 3.28 では中間的な周波数領域を初期励起した場合には、(minor な相違点はあれど) 同様の現象が観測できることが示されている。さらに興味深い点として、ある条件のもとで metastable states が複数存在することも示されている。この複数の metastable states の存在は、我々が示した multistage relaxation と密接に関連する。

3.4.4 A. Giorgilli and S. Paleari, T. Penati (2005) [GPP05]

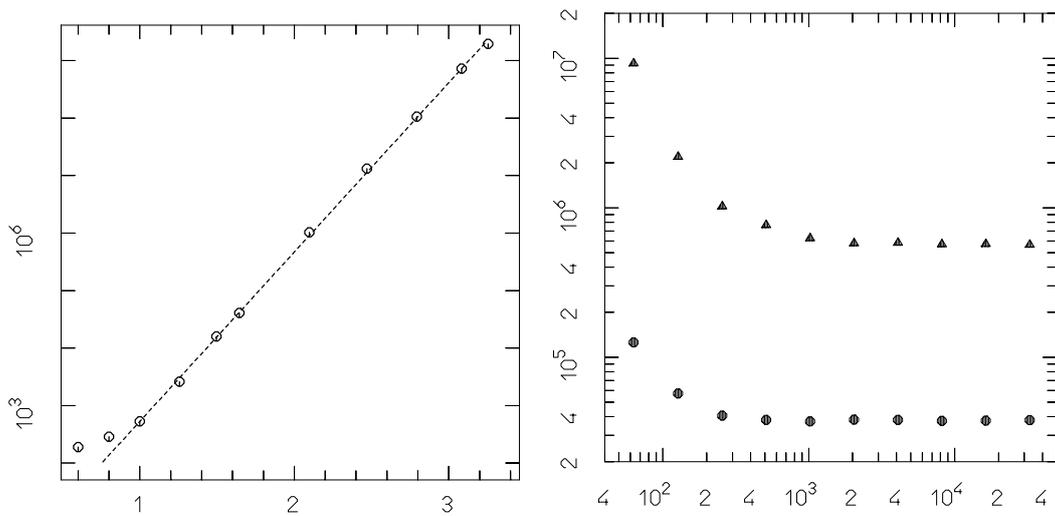
Giorgilli らは、熱力学極限に向けた FPU paradox の残存と消失を明らかにするため、Lyapunov 解析と Poincaré 断面の方法を用いて Toda 格子と FPU α 模型を比較し、FPU の相空間構造と軌道のふるまいについてあるシナリオを提案している。彼らは Lyapunov characteristic number (LCN) χ を stochasticity の指標とした。ある力学系：

$$\dot{x}_j = f_j(x_1, \dots, x_n), \quad j = 1, \dots, n, \quad (3.32)$$



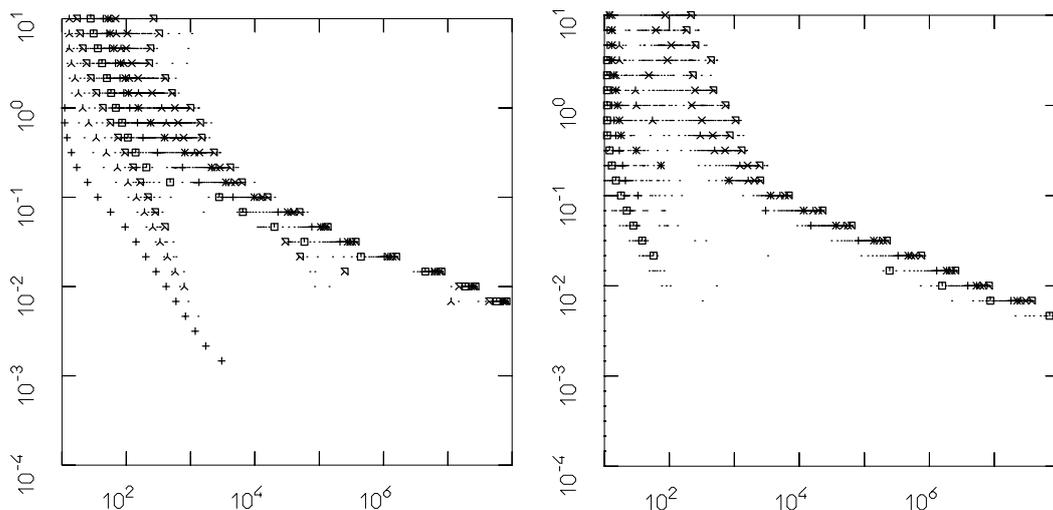
(a) 最低周波数モードを初期励起した場合 (b) 4-30 の複数モードを等分配励起した場合

図 3.24: x 軸は緩和時間, y 軸はエネルギー密度を表す。模型は FPU_β で, $\beta = 1/10, N = 255, \gamma = 0.1$ 。先行研究においても取られていた低周波数モード励起条件の場合を追試している。natural packet の形成, 異なる 2 つの分離した時間スケールが確認される。この特異な現象はシステムサイズ N , 緩和判定レベル γ , 模型の違い ($FPU_\alpha, \alpha\beta, \beta$) によらず確認された。(文献 [PP05] より転載)



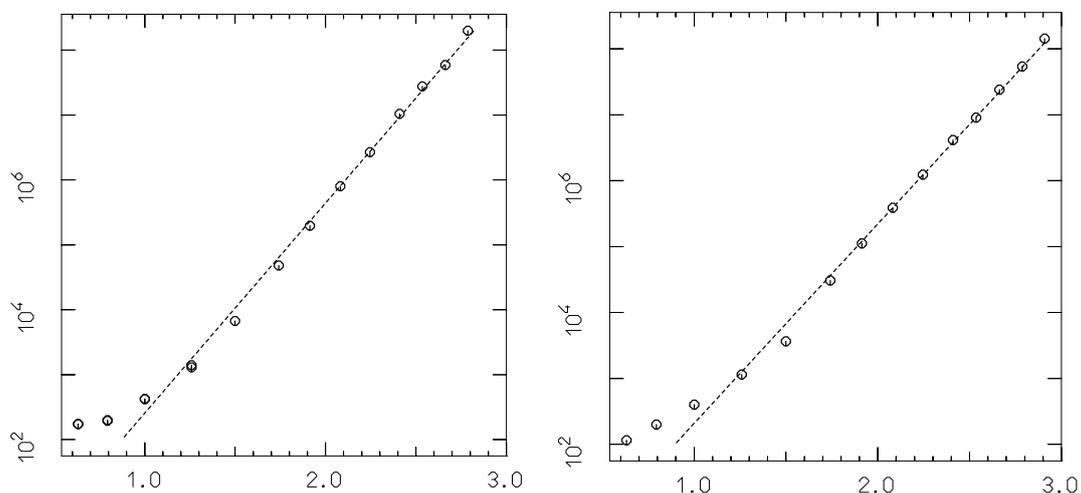
(a) 横軸は $\epsilon^{-1/4}$, 縦軸は t_{eff} を表し, システムサイズは $N = 255$ 。stretched exponential 則 $t_{\text{eff}} \sim A \exp(\epsilon^{-1/4})$ が成立している。
 (b) 横軸は N , 縦軸は t_{eff} 。エネルギー密度は $\epsilon = 0.0516$ および $\epsilon = 0.137$ に固定している。システムサイズは大きい領域においては N 依存性が消失することが分かる。

図 3.25: 先行研究と同じく, 低周波数モード励起の場合に stretched exponential 則が成立することが確認される。また熱力学極限における遅い緩和の残存が示唆されている。なお, ここで n_{eff} が 0.5 を超える時刻を緩和時間と定義している。この判定レベルは等分配から遠くはなく, 実際 0.7 を取るときには等分配が達成されている。(文献 [PP05] より転載)



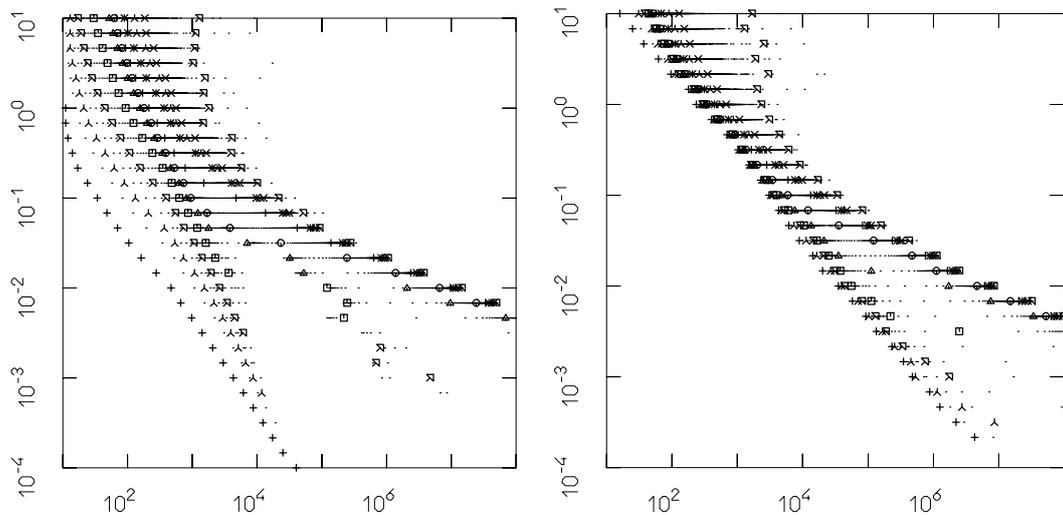
(a) $k = 127$ モードを初期に励起した場合。横軸は緩和時間，縦軸は ϵ 。
 (b) $k = 120 - 127$ のパケットを初期に等分配励起した場合。横軸は緩和時間，縦軸は ϵ 。

図 3.26: 高周波数モード励起の場合にも，natural packet の形成，2つの異なる緩和時間スケールの分離が確認できる。模型は FPU $\alpha\beta$ 模型， $\alpha = \beta = 1/4$ ， $N = 127$ ， $\gamma = 0.1$ 。(文献 [PP05] より転載)



(a) $k = 127$ モードを初期に単一励起した場合。横軸は $\epsilon^{-1/5}$ ，縦軸は t_{eff} 。
 (b) $k = 120 - 127$ のパケットを初期に等分配励起した場合。横軸は $\epsilon^{-1/5}$ ，縦軸は t_{eff} 。

図 3.27: 高周波数モード励起の場合にも stretched exponential 的な遅い緩和を確認できるが，低周波数モード励起の場合に見られた $T \sim \exp(\epsilon^{-1/4})$ とは異なる指数 $-1/5$ をもつ緩和であることが分かる。(文献 [PP05] より転載)



(a) 高周波数モード $k = 511$ を初期励起した場合 (b) 中周波数モード $k = 383$ を初期励起した場合。

図 3.28: 模型は $FPU_{\alpha\beta}$ 模型, $\alpha = \beta = 1/4$, $N = 511$, $\gamma = 0.1$. 高周波数モード励起 (a) および中間的な周波数モードを励起した場合 (b) にも natural packet の形成と 2 つの緩和時間スケールの分離が見られる。彼らはこの事実を以て, この現象は相空間の中で「広く見られる」と結論づけた。また, 興味深い結果としてある条件のもとで metastable state が複数存在するケースが見られた (a)。(文献 [PP05] より転載)

とこれに付随する変分方程式

$$\dot{\xi}_j = \sum_{k=1}^n \frac{\partial f_j}{\partial x_k} \xi_k, \quad (3.33)$$

は初期条件 $x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0, \xi_1^0, \xi_2^0, \dots, \xi_n^0$ のもとで

$$x_j(t; x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0), \quad \xi_j(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0, \xi_1^0, \xi_2^0, \dots, \xi_n^0), \quad (3.34)$$

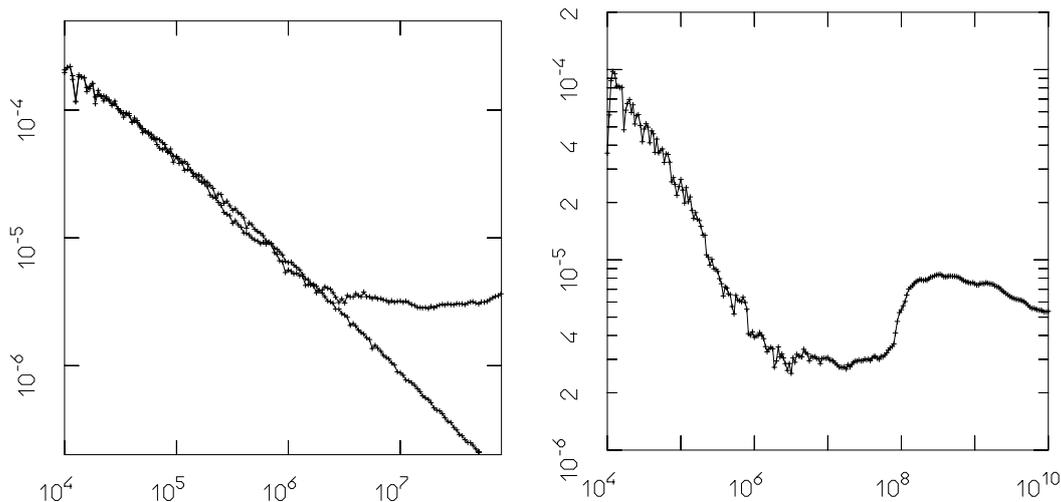
なる解をもち、ここからある収束量

$$\chi(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0, \xi_1^0, \xi_2^0, \dots, \xi_n^0) \triangleq \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \log \|\boldsymbol{\xi}(t)\|, \quad (3.35)$$

が得られる。この χ を Lyapunov characteristic number (LCN) と呼ぶ。図 3.29(a) は Toda 格子と FPU α 模型の maximal LCN の時間収束を示している。Toda 格子の LCN は、その可積分性により $\log t/t$ で下降し続けるが、FPU α 模型はある時刻 (trapping time τ_T) まで Toda 格子と区別されないものの、その後分離してある値に収束する傾向を示している。彼らが抱えた問題はこの LCN の挙動を如何に説明するかであった。Hénon-Heiles 模型や standard map が示すような典型的な描像、すなわち「カオス領域と秩序領域に二分された相空間構造」を想起すると、図 3.29(a) で見られた現象は KAM 理論が存在を指摘しているような秩序運動からカオス的運動への移行であると解釈されうる¹¹。しかしながら、彼らは、LCN はある軌道周辺のローカルなダイナミクスだけを捉えるもので、決して軌道が訪問可能な領域のサイズについては十分な情報を与えないということを強調している。

そこで彼らは、より長時間の挙動 (図 3.29(b)) を観察した。彼らの数値実験によれば、FPU α が Toda 格子に近似できる領域 ($t < \tau_T$) から離脱し、ある一定の LCN を獲得した後、 $t = \tau$ において LCN は急激な増加を示し別の LCN 値に移行して停滞している。さらにはその後 LCN は減少に転じている。このような複雑な構造から、軌道が LCN 値の異なるいくつかのカオス領域を行き来しているとの見方が提案されている。また、小さなシステムサイズの系に対する Poincaré 断面の様子 (図 3.30, 図 3.31) からもその仮説が支持されている。さらに [BGP04] と同様にパケットの保有エネルギーに着目した緩和時間 (図 3.32) を観察している。そこでは metastable state (natural packet) の形成が初期条件に対してさまざまに変化することが確認され、それがエネルギー曲面上にいくつも異なるカオス領域が存在することの傍証であるとした。彼らは LCN 値に関する臨界エネルギー密度が熱力学極限に向けてゼロになる ($\varepsilon^* \sim 1/N^2$) ことを予想する一方、軌道の局所的不安定性が熱力学極限においても増大しない可能性を指摘した (図 3.33) し、FPU の遅い緩和が熱力学極限でも生き残ることを示唆した。

¹¹実際、Toda 格子と FPU α の比較を初めて試みた Casetti ら [CCSPC97] は、ある時刻におけるこれら 2 系の分離を「秩序的運動から非可積分的挙動への遷移」と捉え、分岐点ではソリトンの構造の崩壊が起きていると解釈している。



(a) LCN の短時間挙動を示したもの。横軸は時間、縦軸は最大 LCN を表す。図中には FPU_α と Toda 格子の挙動が比較されている。運動初期において両者は区別ができないが、trapping time $\tau_T \sim 2 \times 10^6$ で両者は分岐する。 FPU_α は単調に現象する Toda 格子から離脱して一定の不安定性を持つようになる。

(b) LCN の長時間挙動を示したもの。横軸は時間、縦軸は最大 LCN を表す。 τ_T で Toda 格子から離脱して一旦取束したのち、 τ において大きな LCN 値へ成長する様子が見られる。

図 3.29: LCN の複雑な挙動は、異なる LCN 値をもついくつかのカオス領域が相空間内に存在することを示唆している。モデルは FPU_α , $\alpha = 1/4$, $N = 31$, $\epsilon = 10^{-2}$, 最低周波数モード励起, 励起の位相は $\varphi = 0.05\pi$ 。(文献 [GPP05] より転載)

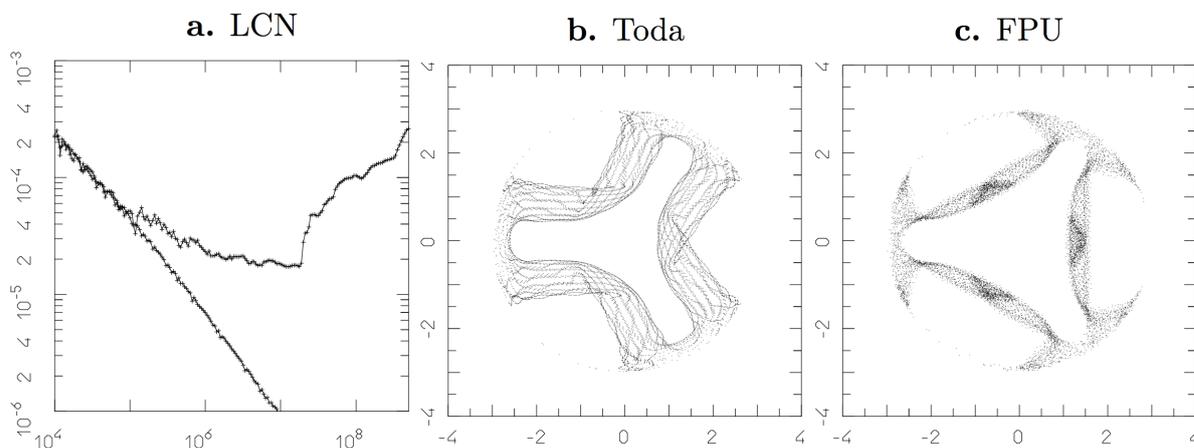


図 3.30: $N = 7, \alpha = 1/4, \epsilon = 0.25$. LCN の挙動 (a) から $\tau_t = 1.5 \times 10^5$, $\bar{\tau} \sim 2 \times 10^7$ である。trapping time τ_T に到達していない時間領域 ($0 < t < 5 \times 10^4 < \tau_T$) で FPU_α (c) と Toda 格子 (b) の両モデルに対して取られた Poincaré surface of section は両モデルの違いを抽出している。すなわち周期的に運動する Toda 格子に対して、 FPU_α モデルは τ_T 以前においてすでに弱いカオス性を持っていることが分かる。(文献 [GPP05] より転載)

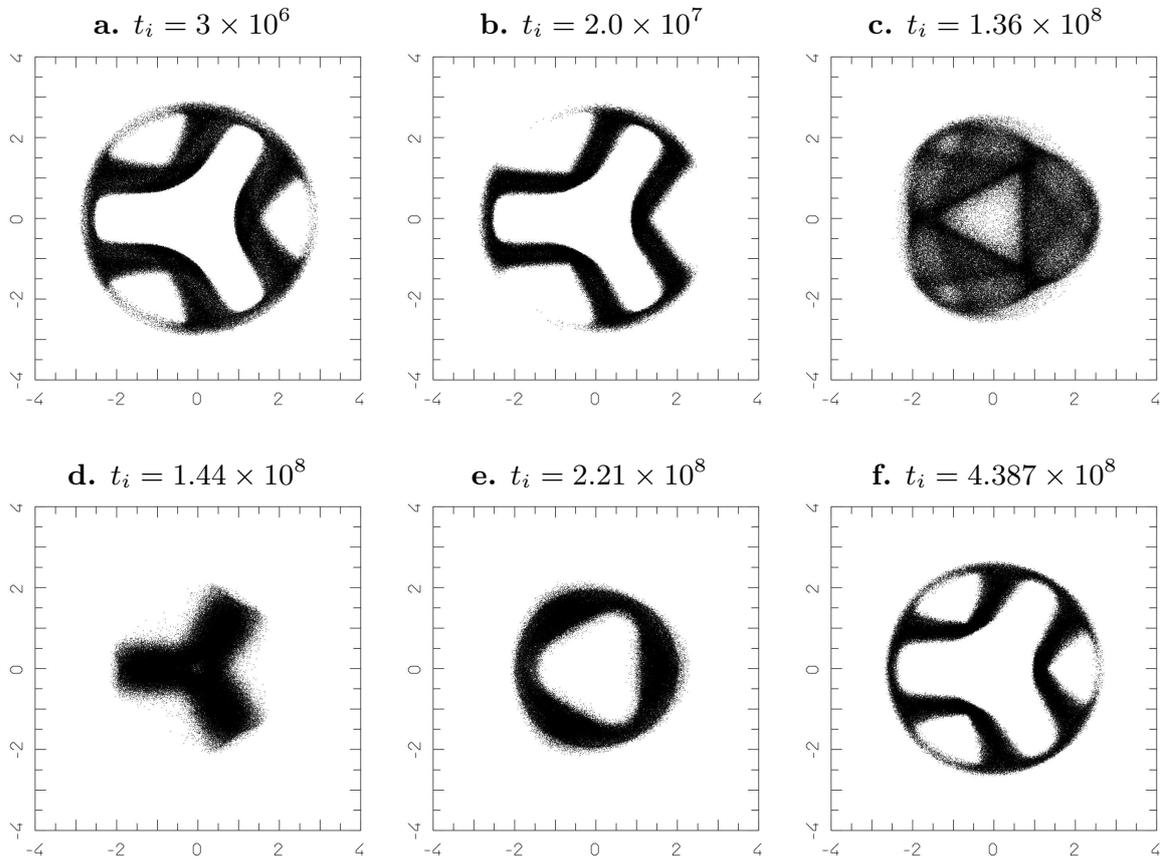


図 3.31: (a) $\tau_T < t < \tau$ における Poincaré 断面。軌道の様子から、系は図 3.30 の場合と同じ chaotic region に滞在しており、trapping time τ_T がダイナミクスにとって重要な量でないことを示唆している。(b) $\tau > \tau$ (ほぼ τ 直上) の断面。この時間領域は LCN が急激な増加を見せるため stochasticity の成長が予想されるが、軌道の訪問領域が顕著に拡大する様子は確認できない。(c)-(f) は $t = 10^8$ 以降の運動、すなわち LCN が大きな値に向けて成長している領域に対応する。これらの Poincaré 断面は、系がいくつかの異なるカオス領域を訪問していることを示している。LCN の複雑な挙動は、異なる LCN 値をもついくつかのカオス領域が相空間内に存在することを示唆している。(文献 [GPP05] より転載)

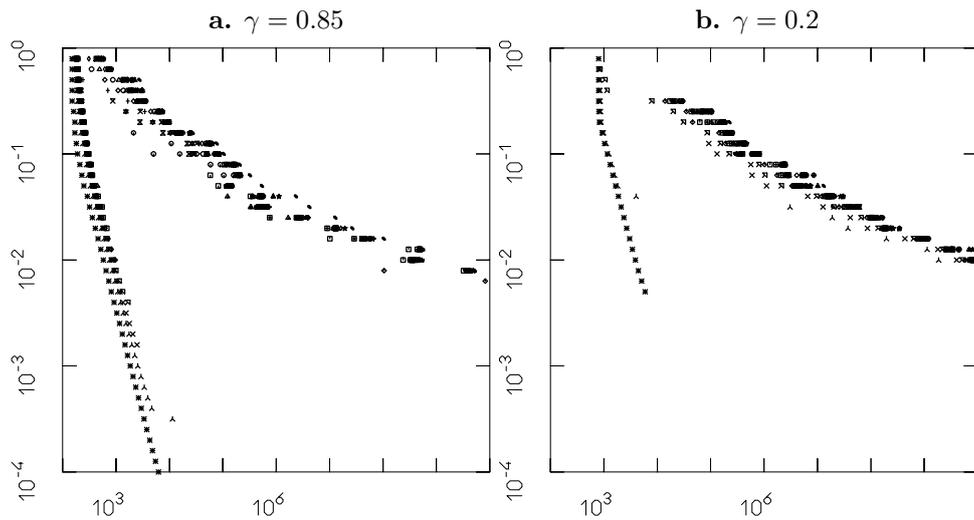


図 3.32: 横軸は緩和時間, 縦軸はエネルギー密度 ϵ 。2つの異なる緩和過程の分離, metastable state (natural packet) の形成が見られる。この結果は初期に最低周波数モードを励起した条件のもとで得られているが, 初期条件のクラスを変更するとこのようなシンプルな metastable state が観測されない。この事実から, 彼らはエネルギー曲面上に異なるカオス領域がいくつも存在していると推測している。(文献 [GPP05] より転載)

3.4.5 A. Carati, L. Galgani, A. Giorgilli, S. Paleari (2007) [CGGP07]

Carati らは基準振動エネルギーの自己相関

$$C_j(t) = \langle E_j(t)E_j(0) \rangle - \langle E_j(t) \rangle \langle E_j(0) \rangle. \quad (3.36)$$

に着目し, 低エネルギーの場合に熱力学極限でも相空間の混合性が欠落していることを示した。なお, 初期条件は Monte Carlo 法を用いてマイクロカノニカルアンサンブルからサンプリングしている。彼らは, 高周波数モードエネルギーの相関の残存 (図 3.34), 異なるエネルギー密度間のスケーリング (図 3.35), および異なるシステムサイズ間のスケーリング (図 3.36) を数値的に導いている。さらに, ミクロカノニカルメジャーから生成された一般的な初期条件のもとで, システムサイズのスケーリングに極限的な普遍曲線の存在が示唆された (図 3.36) ことから, 熱力学極限においても FPU の特殊な緩和が一般的に見られるはずだと主張した。

3.4.6 G. Benettin, A. Ponno (2011) [BP11]

Benettin らは, $FPU_{\alpha\beta}$ 模型, FPU_{β} 模型, さらに一般化された高次 FPU 模型 (modified FPU, modFPU, $FPU_{\alpha\beta\gamma\delta}$ 模型) を可積分系である Toda 格子と比較することでその特徴を抽出している。また, 初期条件の違いが緩和挙動に及ぼす影響を

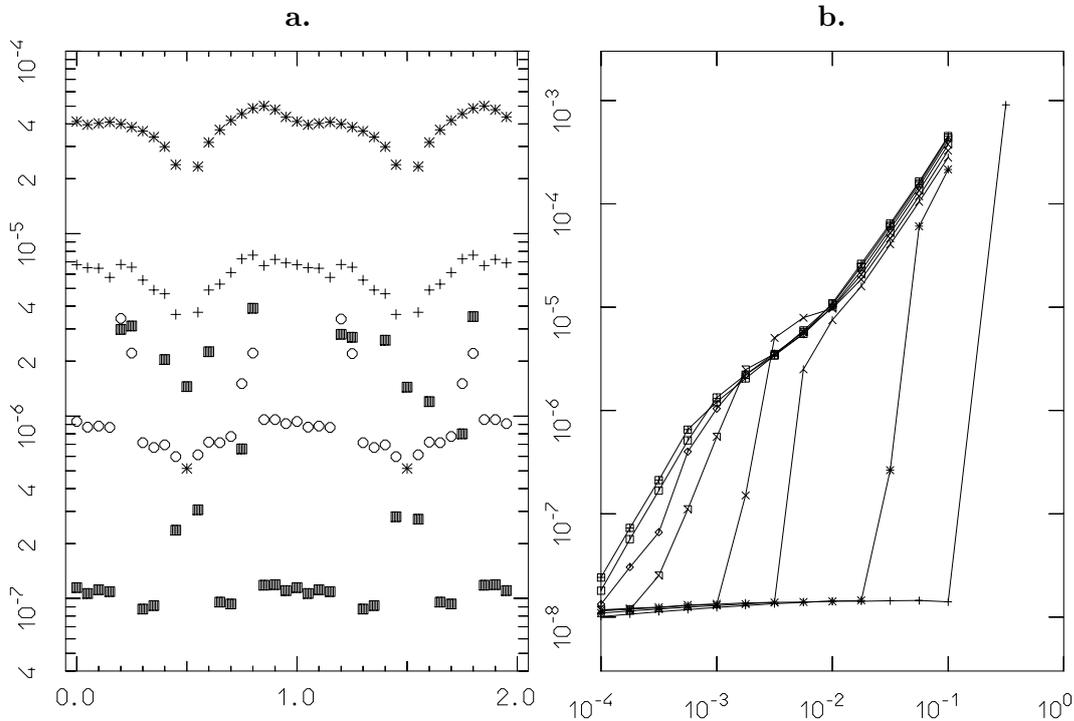


図 3.33: (a) 最大 LCN の初期条件依存性。横軸は最低周波数モードを励起する際の位相，縦軸は最大 LCN を表す。システムサイズは $N = 31$ ，エネルギー密度は $\varepsilon = 5.623 \times 10^{-3}$ 。プロットシンボルの違いは時刻の違いを表し，* は $t = 10^5$ ，+ は $t = 10^6$ ，○ は $t = 10^7$ ，■ は $t = 10^8$ に対応する。図より LCN 値は初期条件に大きく依存することが分かる。この依存性はシステムサイズが大きくな場合には消失する。(b) LCN の N 依存性。横軸はエネルギー密度，縦軸は最大 LCN を表し，プロットシンボルの違いは N の違いを表し，図中右から左に向けて N が增大している ($N = 7, 15, 31, 63, 127, 511, 1023$)。いずれの N においてもあるエネルギー密度 ε^* で LCN の急激な増加が見られる。 ε^* より低い ε では LCN はゼロかもしくは非常に小さい値を取る。この energy density thershold ε^* は N に対して $\varepsilon^* \sim 1/N^2$ なる関係をもち，熱力学極限に向けて threshold が消滅することが示唆されている。一方で， N の増大とともに，LCN の ε 依存性はある上限曲線に収束するよう見え，熱力学極限にむけて軌道の局所不安定性が増大しないことが推測される。(文献 [GPP05] より転載)

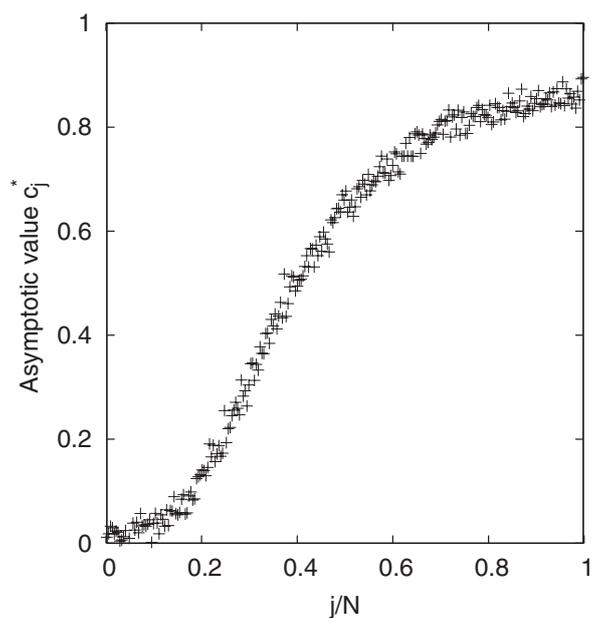


図 3.34: $N=511$, $\epsilon = 3.16 \times 10^{-3}$ 。 x 軸は規格化モード番号 j/N ，縦軸は規格化自己相関 $C_j(t)/C_j(0)$ の収束値を表す。高周波数モードエネルギーの相関が残り続けていおり，高周波数モードは実質的な凍結自由度になっていると考えられる。(文献 [CGGP07] より転載)

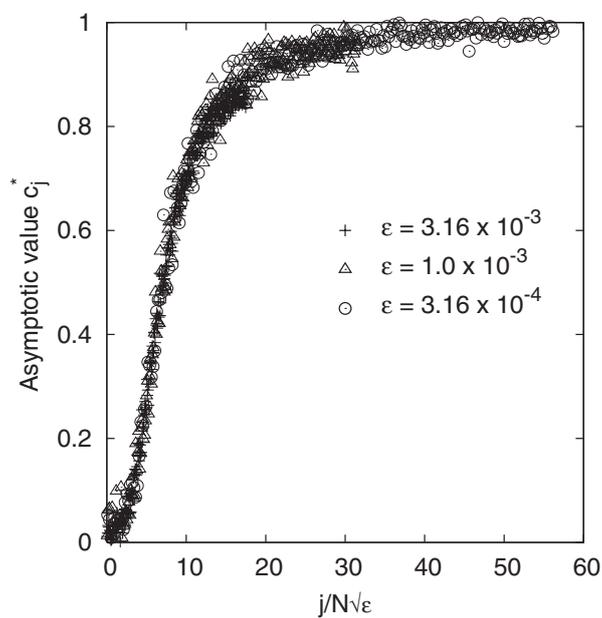


図 3.35: 横軸は $j/N/\sqrt{\epsilon}$ ，縦軸は規格化自己相関関数 $C_j(t)/C_j(0)$ の収束値を表す。異なるエネルギー密度のシステムは $j/N \rightarrow j/N/\sqrt{\epsilon}$ のスケール変換によって普遍曲線に乗る。(文献 [CGGP07] より転載)

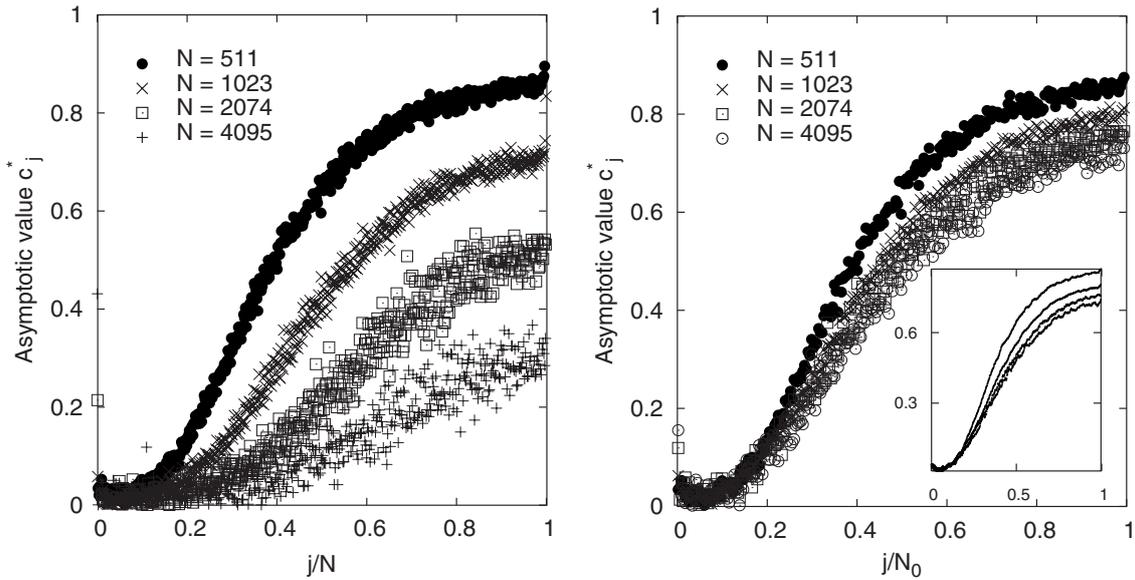


図 3.36: 異なるシステムサイズの系は $j/N \rightarrow j/N_0$ ($N_0 = 511$) のスケーリングで同等となる。システムサイズの増大とともに、相関の形状はある極限的な普遍曲線に近づくように見え、熱力学極限においても相空間の混合性が欠落していることが示唆されている。(文献 [CGGP07] より転載)

考察したほか、きわめて挑戦的な試みとして、パラメタ空間を系統的に探索し FPU 系の緩和時間の表式を提案している。FPU $\alpha\beta$ 模型と FPU β 模型における緩和特性を整理すると下記のようになる：

- (1) ダイナミクスの初期段階において Toda 格子とは（エネルギー分配傾向の観点で）区別することができない（図 3.37）。
- (2) 熱力学極限において緩和時間のベキ則 $T_{\text{ex}} \sim A\epsilon^{-a}$ が成立する。与えられた α に対する β の大きさの違いが A を変化させるものの、指数は $a \sim 2.25$ で一定となる。ただし $\beta \approx \beta_T = 2\alpha^2/3$ (Toda value と呼ばれる値。Toda 格子のポテンシャルを Taylor 展開することで得られる。) の場合、 a は $a \approx 3$ に増加する（図 3.38）。またシステムサイズが小さい領域においては緩和時間は stretched exponential $\exp(\epsilon_N^*/\epsilon)^b$ で表現されるが、 $N \rightarrow \infty$ に向けてベキ則への crossover が見られる（図 3.39）。
- (3) エネルギー密度 ϵ を固定して、 β を変化させると T_{eq} は $\beta = \beta_T$ 付近で最大値を取る（図 3.40 左）。この事実から、FPU $\alpha\beta$ 模型は調和振動を摂動したモデルと考えるのではなく、「摂動を受けた Toda 格子」と見なすべきである¹²。このとき摂動の leading order が $(\beta - \beta_T)r^4$ となる。（このアイデアから彼らは高

¹²同様の観点から、Ponno らは Toda 格子と FPU α 模型を比較する事で、“secular avalanche stage” と “diffusion of tail modes” なる 2 つの異なる緩和過程が存在することを見出している [PCSF11]。

次 FPU 模型 (modified FPU, modFPU) を導入し, その模型において (1) を見出した。

- (4) ϵ を固定すると $\beta > \beta_0$ で $T_{eq} \sim (\beta - \beta_0)^{-2}$ となる (図 3.40 右)。(1) の性質 $T_{eq} = A\epsilon^{-2.25} = A\epsilon^{-4/9}$ と両立させるための表式は

$$T_{eq} = C\epsilon^{-1/4} [(\beta - \beta_0)\epsilon]^{-2}, \quad \beta_0 \simeq \beta_T, \quad C = \text{const.} \quad (\alpha = -1), \quad (3.37)$$

となる。

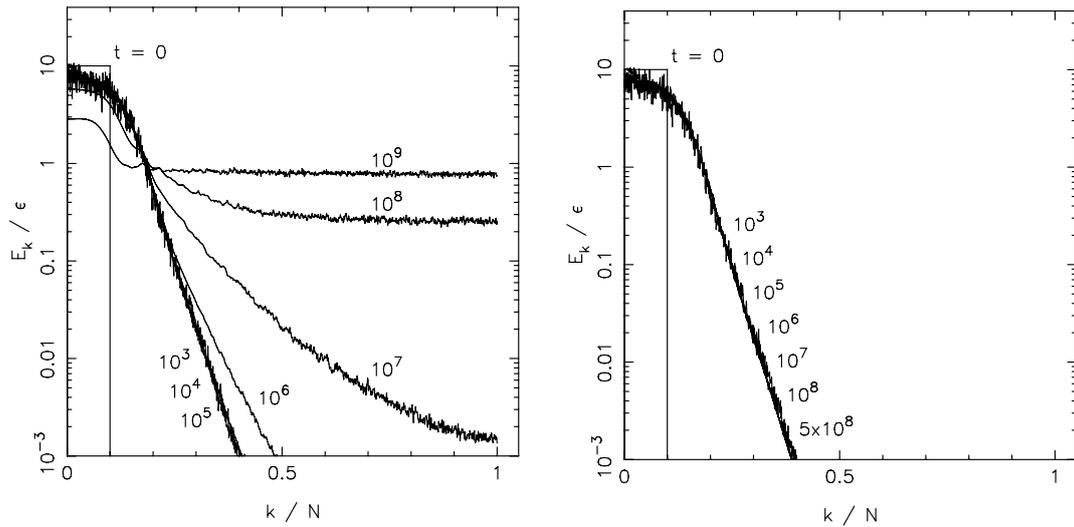
- (5) さらにより一般的な緩和法則の表式

$$T_{eq}^{\alpha\beta}(\alpha, \beta, \epsilon) \sim C|\alpha|^{-1/2}\epsilon^{-1/4} [(\beta - c\alpha^2)\epsilon]^{-2}, \quad c \simeq 2/3, \quad (3.38)$$

を提案した。この一般化された緩和則は数値結果ときわめてよく一致する (図 3.41)。表式 (3.38) は系のコントロール・パラメタが $|\alpha|\sqrt{\epsilon}$ と $\beta\epsilon$ であることを用いて自然な形式で (3.37) を拡張すれば得られる。ただしこの法則は $\alpha = 0, \beta/\alpha^2 = c$ の近傍以外で成立する。また FPU β 模型に対しては, $\alpha \rightarrow 0$ による緩和時間の発散を回避するため, その緩和表式を

$$T^\beta(\beta, \epsilon) = D\epsilon^{-1/4}(\beta\epsilon)^{-2}, \quad D = \text{const.}, \quad (3.39)$$

と推測している。FPU β の場合には熱力学極限でベキ則が成立するかどうかは初期条件の違いによって事情が異なることが指摘されている。初期励起モードパケットを振動数 0 に接するように取った場合には熱力学極限においてベキ則が成立するが, 振動数 0 に接しないようなモードパケットを励起した場合, システムサイズが非常に大きいにも関わらず stretched exponential 的緩和が見られる (図 3.42)。Benettin らによって提案されたこれらの緩和法則には現在のところ理論的根拠は見当たらない。



(a) $FPU_{\alpha\beta}$ 模型, $N = 1023$, $\alpha = -1$, $\beta = 2$, $\epsilon = 10^{-4}$. 横軸は規格化されたモード番号, 縦軸はスケールされたモードエネルギーを表す。左側に描かれた四角の領域は初期パケット (モード全体の 10% のサイズを持つ低周波数モード群) を表している。 k/N に対して指数的に減衰した状態が短時間 ($t = 10^3$) で形成され, これが長時間持続し, やがて崩壊して高周波数成分にエネルギーが分配される様子が見られる。

(b) Toda 格子。四角は (a) 同様, 初期励起パケット (モード全体の 10% のサイズをもつ低周波数モード群) を表す。shot time scale に関しては FPU 模型と同じ挙動を示すが, それ以降の第二の時間スケールは存在しない。

図 3.37: $FPU_{\alpha\beta}$ 模型と Toda 格子の時間発展を比較したもの。 x 軸は規格化されたモード番号, 縦軸はスケールされたモードエネルギーを表す。初期に低周波数モードパケット (モード全体の 10% のサイズ) を励起した場合, 両者は時刻 10^3 までは区別されないが, その後 FPU が離脱して第 2 の時間スケールに移行し等分配状態に向かう。(文献 [BP11] より転載)

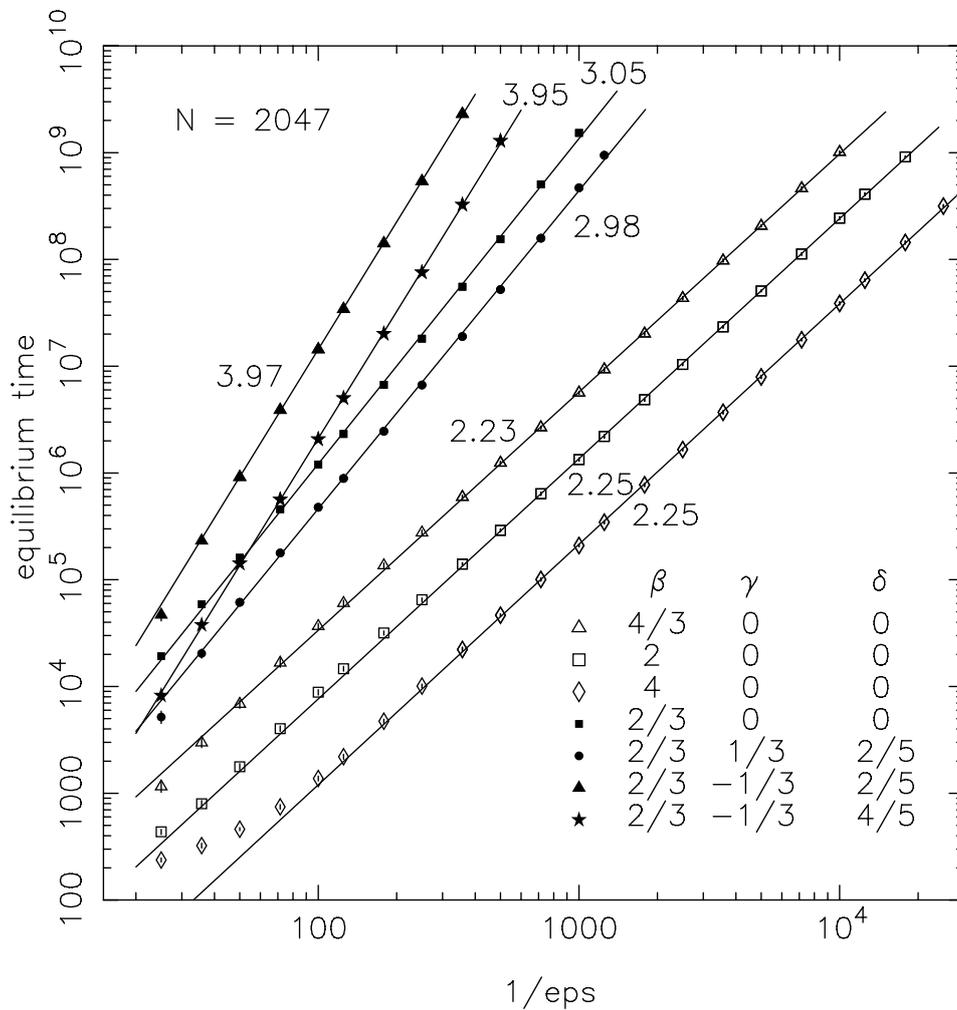


図 3.38: 緩和のベキ則 $T_{eq} = A\epsilon^{-a}$ の指数 a に関する結果。モデルは $FPU_{\alpha\beta}$ 模型, 横軸は $1/\epsilon$, 縦軸は緩和時間 T_{eq} で, プロットシンボルの違いは modified FPU 模型のパラメタの違いを表している。また, $N = 2047, \alpha = -1, \beta_T = 2/3, \gamma_T = -1/3, \delta_T = 2/15$ である。ベキ則の指数 a は $\beta \neq \beta_T$ においては β の値に依存せず約 2.25 で不変である (図中の浅い傾きを持ったデータ系列群, すなわちダイヤ型, \square, \triangle のシンボル)。一方, $\beta \approx \beta_T$ では $a \approx 3$ に増加する ($\blacksquare, \bullet, \blacktriangle, \star$ のシンボル)。(文献 [BP11] より転載)

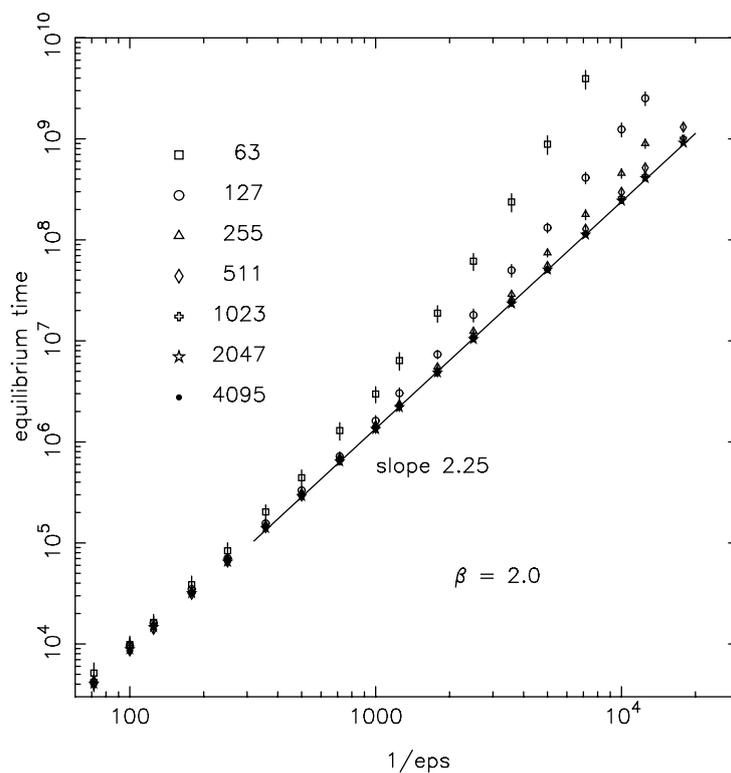


図 3.39: 緩和時間のエネルギー密度依存性。パラメタは $\alpha = -1$, $\beta = 2$ に固定しており、横軸は $1/\epsilon$, 縦軸は緩和時間 T_{eq} を表す。プロットシンボルの違いはシステムサイズの違いを示している。熱力学極限に向けて緩和時間はべき則 $T_{eq} = A\epsilon^{-a}$, $a = 2.25$ に収束してゆく様子が確認できる。システムサイズが小さい場合にはべき則からの分離 (stretched exponential $T_{eq} \sim \exp(\epsilon^*/\epsilon)^b$) が見られる。べき則から分岐する点はシステムサイズが大きいほど低 ϵ 側 (図中右側) にずれていることが分かる。このような power law と stretched exponential law の crossover は FPU_β 模型の場合にも (より顕著に) 見られる。(文献 [BP11] より転載)

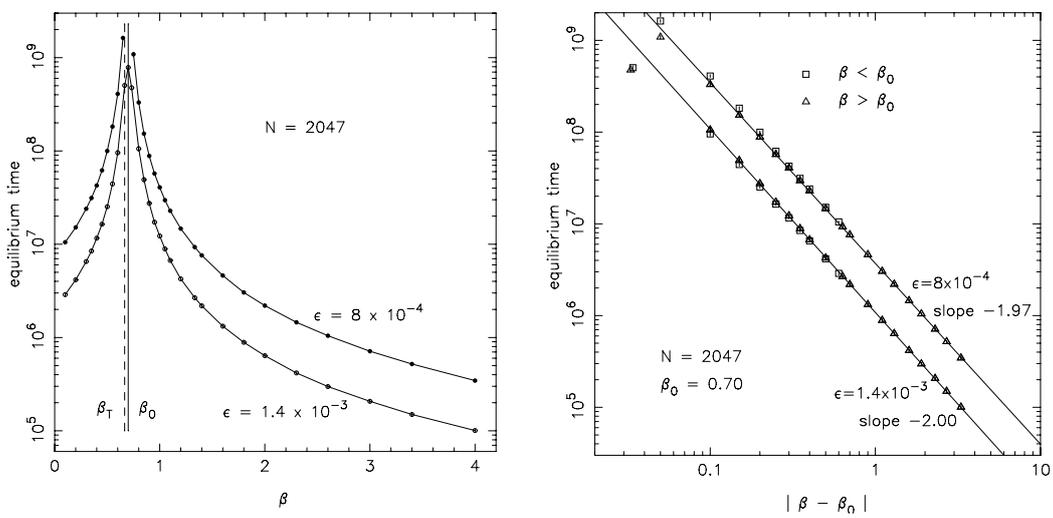


図 3.40: 緩和時間の β 依存性。左図では横軸を β , 右図では横軸を $|\beta - \beta_0|$ とし, 縦軸はいずれも緩和時間 T_{eq} を表している。なお左右の図は同一データから生成されたものである。左図において確認できる $\beta = \beta_T$ 付近のピークに着目し, ゼロでない発散点をもつべき則 $T_{eq} \sim (\beta - \beta_T)^{-2}$ が示唆されている (右図)。ただし $\beta_0 = 0.7$ である。(文献 [BP11] より転載)

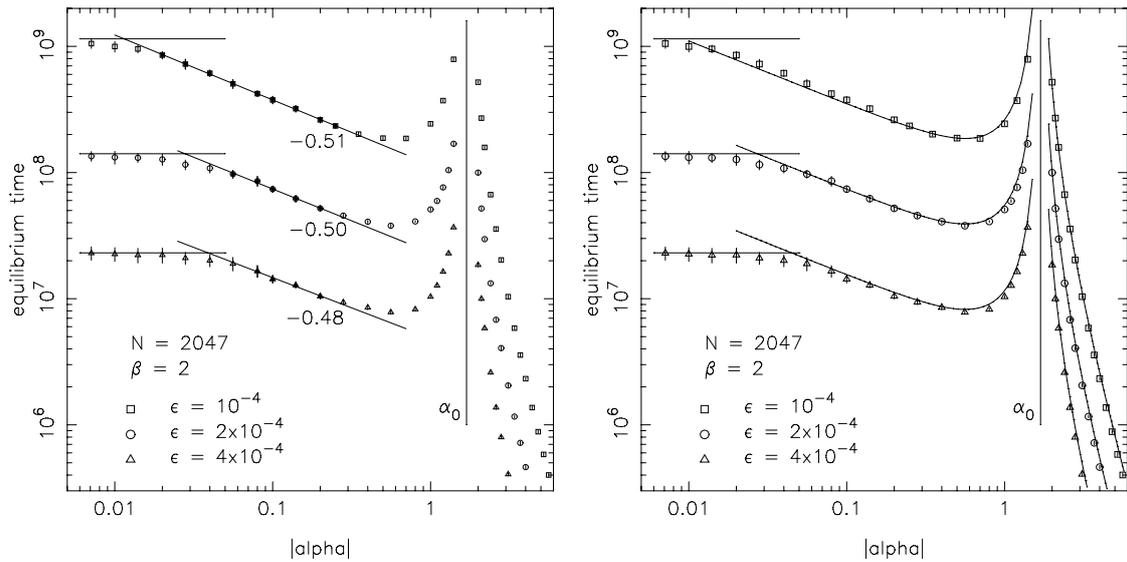
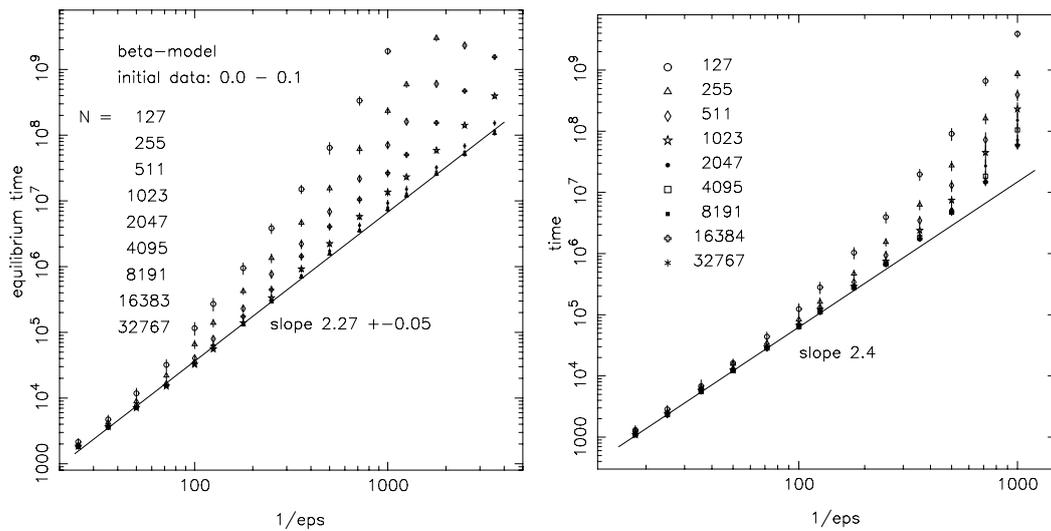


図 3.41: 一般化された緩和表式 (3.38) と数値実験の比較。横軸は $|\alpha|$, 縦軸は緩和時間 $T_{eq}^{(\alpha\beta)}$ で左右の図は同一のデータを表示している。左図は3つの領域 (低・中・高 $|\alpha|$) の性質を示しており, 低い $|\alpha|$ では緩和時間がほぼ一定となり, FPU β 模型の緩和時間 $T_{eq}^{(\beta\epsilon)}$ へのクロスオーバーが見られる。中程度の $|\alpha|$ においてはファクター $\alpha^{1/2}$ の効果が鮮明に観察され, $|\alpha| = \sqrt{\beta/c} \simeq 1.7$ 付近にピークが存在する。右図は一般的な緩和表式 ($T_{eq}^{\alpha\beta}(\alpha, \beta, \epsilon) \sim C|\alpha|^{-1/2}\epsilon^{-1/4}[(\beta - c\alpha^2)\epsilon]^{-2}$, $c \simeq 2/3$) と比較したものである。数値計算の結果は一般表式ときわめてよく一致している。なお, 右図において定数 C はすべて同じ値を取っている。(文献 [BP11] より転載)



(a) 初期励起パケットが $\omega = 0$ に接している場合 ($0 \leq k/N \leq 0.1$)
 (b) 初期励起パケットが $\omega = 0$ に接していない場合 ($1/64 \leq k/N \leq 5/64$)

図 3.42: 一般化された緩和表式 (3.39) が有効であるかどうかは初期励起パケットの配置の仕方に依存する。初期励起パケットが $0 \leq k/N \leq 0.1$ の場合、一般化された FPU β の緩和則 (3.39) が熱力学極限で成立するが、初期励起パケットが $1/64 \leq k/N \leq 5/64$ の場合、大きなシステムサイズでも stretched exponential 的な遅い緩和が生き残る。後者の初期条件では、 $0 \leq k/N \leq 1/64$ の間のギャップを埋めるために時間を要し、そのために高周波数モードにエネルギーが流れにくくなっているためだと解釈されている。($T^\beta(\beta, \epsilon) = D\epsilon^{-1/4}(\beta\epsilon)^{-2}$, $D = \text{const.}$) (文献 [BP11] より転載)

3.5 本研究の背景と目的

孤立系が非平衡状態から平衡状態へ緩和するという不可逆現象を力学過程として理解するため、本論文は大自由度ハミルトン系、特に非線形相互作用をもつ連成振動系を考察の対象とする。非可積分性をもつ大自由度ハミルトン系に典型的に発生すると考えられる乱雑で予測不能な運動＝カオスと緩和の関係性について考察することが主要な興味となる。

前節まで紹介した通り、非線形格子振動系における緩和には、通常の統計的な仮定の下では想定されない非自明な「遅さ」が伴う。すなわち「エルゴード性や混合性が欠落した状況下での緩和過程」が見られ、そこには指数的減衰をもつデバイ型の緩和は現れない。

1950年代、Fermi, Pasta, Ulam (FPU) は非線形格子振動系を用いて非可積分性とカオスおよび緩和の関係性を論じ、素朴な予想に反してエネルギー等分配則が破れる現象 (FPU paradox) を見出した [FPU55]。彼らの発見は「非可積分性が必ずしも混合性・カオス性とは直結しない」ことを示したと言える。これ以降、FPU paradox がどのような条件で発生し、消失するのか (すなわち等分配状態が達成されるか) という観点から、パラメタ空間における臨界線 (stochasticity limit) が提唱された [IC66, IKC70]。しかしながら、この stochasticity limit はダイナミクスの詳細なプロセスを考慮したものではなく、系の動的な性質を反映したものにはなっていなかった。1980年代に入ると、Fucito らの研究 [FMM⁺82] に端を発してダイナミクスの詳細に立ち入った研究が徐々に行われるようになり、主要な問題は「FPU paradox の残存・消滅」から「タイムスケールの分離」へと移り始める。臨界線 (stochasticity threshold) もまたそのような文脈で定義し直された。その後、系統的な研究が相次ぎ、FPU 模型における緩和の遅さは徹底的に調べられた。

これら系統的な研究においては、緩和特性の励起エネルギー (エネルギー密度) 依存性、システムサイズ依存性、初期条件依存性が議論され、緩和のスケールリング則が導かれるなど、遅い緩和の全体像を捉えるという意味できわめて大きな貢献をしたと言える。しかしながら、「なぜ遅いのか」という問題意識を基盤として、緩和の遅さを相空間の軌道と結びつけて理解しようとする試みは十分とは言えなかった。

そこで我々は「粗視化された観測量で見られる緩和過程」と「相空間の微視的情報であるところの軌道不安定性・カオス性」を比較することによって緩和の力学過程を明らかにすることを目的とする。本論文では、種々の粗視化量と Lyapunov スペクトルを比較することにより緩和過程と軌道の遍歴過程を結びつけ、そこから詳細な力学的性質を抽出することを試みる。

第4章 模型と方法

本章では、Fermi-Pasta-Ulam 模型の数値解析に関する方法を記述する。まずは、先行研究よりも一般的でかつ恣意性を排除した緩和指標が導入され、それらの時間発展から緩和時間が定義される。また、粗視化された緩和指標の挙動を観察することに加え、微視的情報、すなわち軌道の局所的不安定性（双曲性）を対応させることで、緩和ダイナミクスを特徴付けることが試みられる。

4.1 模型

以下、非線形相互作用で結合された1次元の格子振動系 (Fermi-Pasta-Ulam 模型) (図 4.1) を扱う。系のハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{FPU}} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=0}^N \left[\frac{\kappa}{2} (q_{i+1} - q_i)^2 + \frac{\alpha}{3} (q_{i+1} - q_i)^3 + \frac{\beta}{4} (q_{i+1} - q_i)^4 \right], \quad (4.1)$$

となり、系は最近接作用する $N + 2$ 個の粒子から構成される。サフィックス i は粒子



図 4.1: Fermi-Pasta-Ulam (FPU) 非線形格子振動模型

番号を表し、0 から $N + 1$ までの値を取るものとする。 p_i, q_i はそれぞれ第 i 番目の粒子の一般化運動量と一般化座標で、 κ, α, β はそれぞれ調和、3次、4次ポテンシャルの係数を表す。粒子の質量は m で均質であるとする。本論文の全体を通して、境界条件は固定端条件

$$q_0(t) = 0, \quad q_{N+1}(t) = 0, \quad (4.2)$$

$$p_0(t) = 0, \quad p_{N+1}(t) = 0, \quad (\text{for all } t) \quad (4.3)$$

とし、したがって可動粒子数は N となる。また各ポテンシャルの係数は $\kappa = 1$, $\alpha = \beta = 1/8$ (FPU $\alpha\beta$ 模型¹)、質量は $m = 1$ で固定する。対応するハミルトン正

¹ 本研究では FPU α 模型および FPU β 模型は扱わない。前者に関しては高エネルギーにおけるポテンシャル井戸領域からの離脱がある。また後者に関しては、模型依存の特殊な選択則 [SHI75][SI76] により、初期励起が偶数モードであった場合には奇数モードへのエネルギー流入が禁制され、奇数モード励起の場合には偶数モードへのエネルギー流入が禁制されるため、すべてのノーマルモード間でのエネルギー等分配が原理的に実現しない。

準方程式は8次のシンプレクティック法 [Yos90][McL95] によって積分²され、時間刻みは $\Delta t = 5 \times 10^{-3}$ とする。この時間刻みは熱力学極限 ($N \rightarrow \infty$) において系内で最も速い時間スケールを持つモードの周期の約628分の1に相当する。また数値計算は $t_{\max} = 2 \times 10^6$ まで行われ、これは 4×10^8 ステップの計算となる。全系の力学的エネルギーは相対誤差 $|E_{\text{final}} - E_0|/E_0 \times 100 \simeq 10^{-10}\%$ で保存している。

4.2 基準振動分解

ハミルトニアン (4.1) に対応する正準方程式の解 (\mathbf{p}, \mathbf{q}) から基準座標・基準運動量 (\mathbf{P}, \mathbf{Q}) への変換は、離散フーリエ変換

$$Q_k(t) = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{i=1}^N q_i(t) \sin \frac{ik\pi}{N+1}, \quad (4.4)$$

$$P_k(t) = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{i=1}^N p_i(t) \sin \frac{ik\pi}{N+1}, \quad (4.5)$$

でおこなわれる。サフィックス k はモード番号を表す。第 k 番目の基準振動エネルギー E_k は

$$E_k(t) = \frac{P_k^2(t)}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_k^2 Q_k^2(t) \quad (k = 1, \dots, N), \quad (4.6)$$

で与えられる。ここで ω_k は第 k 番目のモードの周波数で

$$\omega_k = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sin \left[\frac{k\pi}{2(N+1)} \right], \quad (4.7)$$

となる。調和系 ($\alpha = \beta = 0$) においては N 個の基準振動エネルギー E_k はすべて系の第一積分となる。したがって各基準振動間のエネルギー輸送は禁制されている。しかし、付加された非線形性によって保存量が破壊され、エネルギー輸送が可能になることで、ダイナミカルにモード間エネルギー等分配状態が達成されることが素朴には期待される (図4.2)。しかしすでに述べた通り、低エネルギー領域では等分配則が破れることが知られている (FPU paradox [FPU55])。

4.3 初期条件

初期条件として、時刻0で最低周波数モードを単一励起する場合 ($k_0 = 1$) を考える。系のエネルギー E_0 はポテンシャルパート V_0 と運動エネルギーパート K_0 にあ

²積分スキームの詳細は付録を参照。

る比率 γ で分配することとする：

$$\begin{aligned} V_0 &= \gamma E_0, \quad K_0 = E_0 - V_0. \\ q_i(0) &= \pm A_0 \sin\left(\frac{2\pi i k_0}{N}\right). \\ p_i(0) &= \pm 2\sqrt{\frac{mK_0}{N+1}} \sin\frac{ik_0\pi}{N+1}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

ここで、励起の振幅 A_0 は FPU ハミルトニアン (4.1) のポテンシャルパートが V_0 となるように調整される定数である。

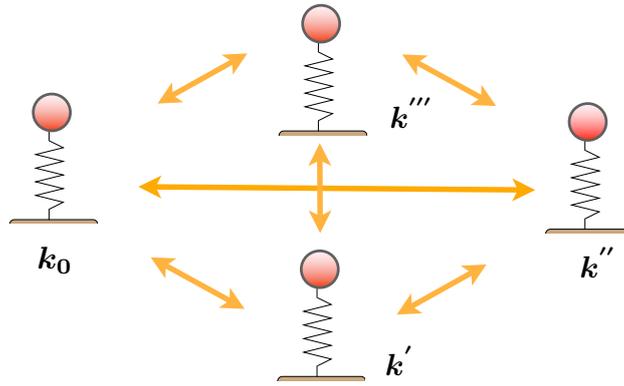


図 4.2: 非線形性により第一積分である基準振動エネルギーが“破壊”され、基準振動間のエネルギー輸送が可能になる。

4.4 粗視化された緩和指標

相空間のエネルギー曲面の混合性が十分であるならば、古典平衡統計力学の帰結通り、基準振動間のエネルギー等分配

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T E_k(t) dt = E_0/N \quad (\text{for all } k), \quad (4.9)$$

が成立する。熱化の度合いを定量化するために、「等分配状態からの距離」として σ

$$\sigma(t) = \left[\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (\rho_k(t) - \rho^*)^2 \right]^{1/2}, \quad \rho^* = \frac{1}{N}, \quad (4.10)$$

を導入する。ここで ρ_k は第 k モードエネルギーが全基準振動エネルギーに対して占める割合

$$\rho_k(t) = \frac{E_k(t)}{\sum_{l=1}^N E_l(t)}, \quad \sum_{l=1}^N \rho_l(t) = 1, \quad (4.11)$$

としている。すなわち、(4.10)は、「各モードが等分配状態において取るべき値 $\rho^* = 1/N$ から平均的にどれだけ乖離しているか」を表す指標となる。(4.10)と同様の指標は過冷却液体 [TMK89], 自己重力多体系 [TKG94][TTK98], タンパク質 [SST00], 鎖状多体系 [KY10] に関する研究でも用いられている。

FPU系の緩和過程が観察される際、Shannon情報量によって定義されたスペクトラル・エントロピー

$$S(t) = - \sum_{k=1}^N \rho_k(t) \log \rho_k(t), \quad (4.12)$$

が等分配の指標としてしばしば導入される [LPR⁺85, PL90, PCS91, KLR94, Yos96, CCSPC97]。しかしながら、この指標は対数関数の性質から、エネルギー分配の詳細（特に tail modes の成長に対して）鈍感な指標となることを注意しておきたい。Berchiarellaらは、スペクトラル・エントロピーとは異なる指標を導入 [BGG04] しているが、彼らの指標はすでに3.4.1で述べたように、エネルギー輸送の方向や natural packet phenomena の存在を仮定するなど、若干の恣意性を伴うものであると考えられる。そこで我々は、より一般的で恣意性を極力排除した指標 σ を用いることとする。さらに補助的な指標として、スペクトラル・エントロピーから計算される「有効励起自由度」 N_{ex} を導入する。（これはいくつかの先行研究においても用いられている）

$$N_{\text{ex}}(t) = \exp [S(t)]. \quad (4.13)$$

なお、 σ と N_{ex} は熱化に向けてそれぞれ0に減少、 $\log N$ に増加する関数である。

4.5 Lyapunov spectrum 解析 - 軌道不安定性

前節で導入した「等分配からの距離」 σ および「有効励起自由度」 N_{ex} はいずれも粗視化された熱化の指標である。この粗視化された量が示す緩和過程と相空間における微視的状态、すなわち軌道の不安定性の対応関係を観察することでダイナミクスを理解するため、Lyapunov スペクトル解析を行う。Lyapunov 指数は、軌道の不安定性、すなわち近接した独立な2本の軌道の指数的発散の傾向を定量化したもので、軌道のカオス性を実質的に反映する量となる。

4.5.1 Lyapunov 指数および Lyapunov スペクトルの定義

いま、 N 自由度ハミルトン力学系

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad (4.14)$$

を考える。ここで \mathbf{x} は全自由度の運動量と座標を要素とする N 次元ベクトル $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N, x_{N+1}, x_{2N}) = (p_1, \dots, p_N, q_1, \dots, q_N) = (\mathbf{p}, \mathbf{q})$ をあらわす。これは $2N$ 次元相空間上の状態点となり、系はある初期条件

$$\mathbf{x}^0 = (x_1^0, x_2^0, \dots, x_{2N}^0), \quad (4.15)$$

のもとで時間発展し、相空間内に軌道 $\mathbf{x}(t)$ を描く。また、系のハミルトニアンを H とすると

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), \dots, f_N(\mathbf{x}), f_{N+1}(\mathbf{x}), \dots, f_{2N}(\mathbf{x})) \quad (4.16)$$

$$= \left(-\frac{\partial H}{\partial q_1}, \dots, -\frac{\partial H}{\partial q_N}, \frac{\partial H}{\partial p_1}, \dots, \frac{\partial H}{\partial p_N} \right), \quad (4.17)$$

となる。

次に相空間内の微小変位（2つの独立な軌道の“ずれ”）の時間発展を捉えるため、この力学系に付随する変分方程式（すなわち接空間の方程式）

$$\frac{d}{dt}(\delta\mathbf{x}) = D\mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \delta\mathbf{x}, \quad (4.18)$$

を考える。これは、軌道をわずかに摂動するという状況設定 $\mathbf{x}(t) \rightarrow \mathbf{x}(t) + \epsilon\delta\mathbf{x}(t)$ のもとで元の力学系を1次まで展開することで得られる。すなわち接空間方程式は、オリジナルの軌道と摂動された軌道間のズレに関する時間発展を記述している。ここで $\delta\mathbf{x}$ は元の力学系に対する $2N$ 次元接ベクトルを表し、 $D\mathbf{f}$ は $(2N \times 2N)$ -Jacobi 行列で、その要素は

$$[D\mathbf{f}(\mathbf{x})]_{ij} = \left[\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\mathbf{x}) \right]. \quad (4.19)$$

すなわちハミルトニアンの2階偏微分で与えられる。接空間方程式 (4.18) は、元の力学系 (4.14) の軌道 $\mathbf{x}(t)$ を参照軌道としながら、ある初期条件

$$\mathbf{x}^0 = (x_1^0, x_2^0, \dots, x_{2N}^0), \quad \delta\mathbf{x}^0 = (\delta x_1^0, \delta x_2^0, \dots, \delta x_{2N}^0), \quad (4.20)$$

のもとで

$$\delta x_i(t; \mathbf{x}^0, \delta\mathbf{x}^0), \quad (4.21)$$

なる解をもつ。(4.18) の解は形式的に指数解

$$\delta\mathbf{x}(t) = \exp \left[\int_0^t D\mathbf{f}(\mathbf{x}(t')) dt' \right] \delta\mathbf{x}(0) \triangleq \mathbf{\Lambda}(t) \delta\mathbf{x}(0), \quad (4.22)$$

となる。ここで $\mathbf{\Lambda}$ は $2N \times 2N$ 行列である。いま

$$\|\delta\mathbf{x}(t)\|^2 = {}^t \delta\mathbf{x}(t) \cdot \delta\mathbf{x}(t) = {}^t \delta\mathbf{x}(0) {}^t \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Lambda} \delta\mathbf{x}(0), \quad (4.23)$$

であり、これにより参照軌道 $\mathbf{x}(t)$ の安定性に関する議論は行列 ${}^t \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Lambda}$ の固有値問題に帰着される。すなわち固有ベクトルを v として

$${}^t \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Lambda} v = \exp(2\lambda t)v, \quad (4.24)$$

となる。このとき λ の長時間平均を Lyapunov 指数という。

線形微分方程式 (4.18) には $2N$ 個の独立な解が存在し、これらは各固有ベクトル方向に関する情報を与える。各方向に対応する固有値 ν_i についての対数の長時間平均を第 i Lyapunov 指数 λ_i と呼ぶ：

$$\lambda_i(\mathbf{x}^0, \delta\mathbf{x}^0) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log |\nu_i| \quad (i = 1, \dots, 2N). \quad (4.25)$$

このように $2N$ 次元相空間においては $2N$ 本の方向に対してそれぞれ Lyapunov 指数が定義され、その組 $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{2N}\}$ は Lyapunov スペクトルと呼ばれる。一般に、Lyapunov スペクトルのうち少なくともひとつ Lyapunov 指数が正である状態を指して「カオス」と呼称し、十分に大きな正の数を持つならば、運動は高い混合性を示すと考えることができる。系がハミルトン系である場合には、そのシンプレクティック性により特別に Lyapunov スペクトルの対称性が成立する：

$$\begin{aligned} \lambda_i &= -\lambda_{2N-i+1} \quad (i = 1, \dots, 2N). \\ (\lambda_1 &\geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{2N}). \end{aligned} \quad (4.26)$$

したがってハミルトン系の場合には、独立な Lyapunov 指数の個数は相空間次元の半分（すなわち自由度の数）となる。この対称性を数値的に観察することで、接空間方程式の数値積分および Lyapunov 指数の算出が正しく遂行されていることを確認している（図 4.3）。

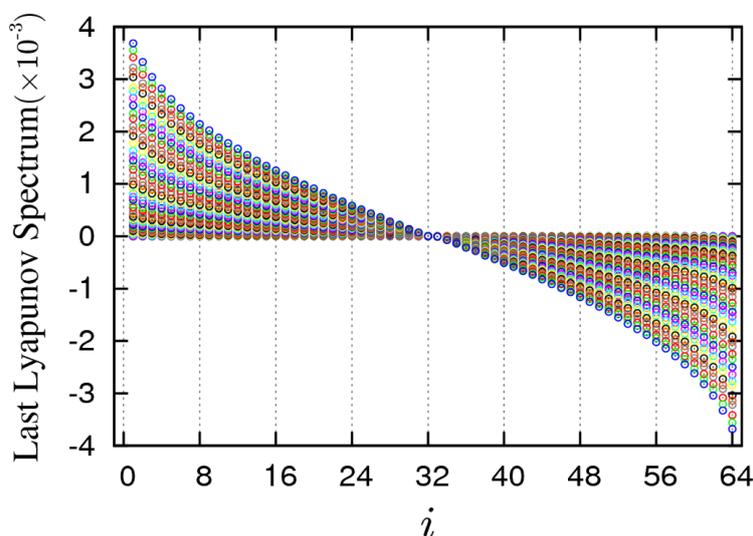


図 4.3: FPU 模型の Lyapunov スペクトルの例。ハミルトン特有の対称性を確認することで計算の妥当性を確かめる。

4.5.2 最大 Lyapunov 指数の数値的計算方法

以下、数値的に Lyapunov 指数を求める方法について述べる。まず、最も簡単な事例として、最大 Lyapunov 指数を求めるスキームを考える。いま、ある変位の方角を e とすれば、その方向に関する Lyapunov 指数は

$$\lambda(e, \mathbf{x}^0, \delta \mathbf{x}^0) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log \frac{\|\Lambda(t)e\|}{\|e\|} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log \frac{\|\delta \mathbf{x}(t)\|}{\|\delta \mathbf{x}(0)\|}, \quad e \triangleq \frac{\delta \mathbf{x}(0)}{\|\delta \mathbf{x}(0)\|}, \quad (4.27)$$

と表される（図 2.2）。ここで e は一般に $2N$ 個の固有ベクトルの線形結合で表される。時間発展とともに Lyapunov 指数がもっとも高い方向の運動が優勢となり、長

時間経過後には変位 $\delta \mathbf{x}$ は最大 Lyapunov 指数をもつ固有ベクトルに一致することとなる。Lyapunov 指数を数値的に扱う際の大きな問題はその発散である。すなわち、カオスを示す系であれば少なくともひとつの Lyapunov 数が正の値を持つために、参照軌道と摂動軌道が指数的に乖離し、接空間方程式 (4.18) における線形近似が破綻してしまう。この場合、もはや摂動軌道の意味が失われている。

そこで、この指数発散の問題を回避するため、「軌道の引き戻し」を施す。この操作は、(4.18) の線形近似が有効となる範囲で、Lyapunov 指数がその方向 e のみに依存し、大きさにはよらないことに着目している。すなわち、変位方向を保持しつつその大きさをリスケールし、参照軌道の近傍に別の摂動軌道を用意する方針を取る。この計算スキームの概念図を図 4.4 に示した。

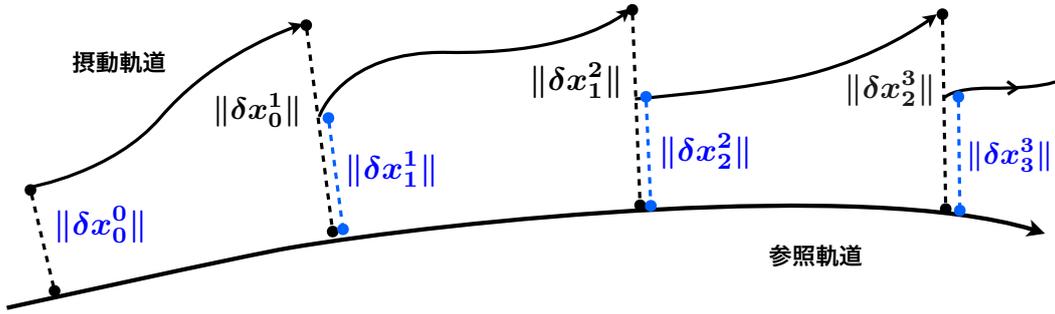


図 4.4: 数値計算において、正の Lyapunov 指数がもたらす指数的发散を回避するために変位ベクトルの方向を保持したまま軌道を「引き戻す」操作をする。Lyapunov 指数が変位の大きさには依存せず方向のみによって決まるという性質から、変位ベクトルの大きさをリスケールすることが許される。

いま、初期変位ベクトル $\delta \mathbf{x}_0^0$ がごく短時間 Δt 経過ののち (4.18) によって $\delta \mathbf{x}_0^1$ へ写されるとする。この $\delta \mathbf{x}_0^1$ の方向を保持しながら、その大きさを初期変位ベクトルの大きさ $\|\delta \mathbf{x}_0^0\|$ にまで縮め、ベクトル $\delta \mathbf{x}_1^1$ を構成する：

$$\delta \mathbf{x}_1^1 = \|\delta \mathbf{x}_0^0\| \cdot \frac{\delta \mathbf{x}_0^1}{\|\delta \mathbf{x}_0^1\|}. \quad (4.28)$$

ここで上付きサフィックスは「時刻」をあらわし、下付きサフィックスは「引き戻し操作の回数」を表す。このように「接空間方程式による時間発展」と「軌道の引き戻し操作」を順次繰り返す：

$$\delta \mathbf{x}_{i-1}^{\tau-1} \xrightarrow{(4.18)} \delta \mathbf{x}_{i-1}^{\tau}. \quad (4.29)$$

$$\delta \mathbf{x}_i^{\tau} = \|\delta \mathbf{x}_{i-1}^{\tau-1}\| \cdot \frac{\delta \mathbf{x}_{i-1}^{\tau}}{\|\delta \mathbf{x}_{i-1}^{\tau}\|}. \quad (4.30)$$

これによりベクトル $\delta \mathbf{x}_0^0, \delta \mathbf{x}_0^1, \delta \mathbf{x}_1^1, \delta \mathbf{x}_1^2, \delta \mathbf{x}_2^2, \delta \mathbf{x}_2^3, \delta \mathbf{x}_3^3, \dots$ を生成し、軌道の拡大率を長時間にわたって平均すると最大 Lyapunov 指数 λ_{\max} が得られる：

$$\lambda_{\max} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t \cdot T} \sum_{\tau=1}^T \log \frac{\|\delta \mathbf{x}_{\tau-1}^{\tau}\|}{\|\delta \mathbf{x}_{\tau-1}^{\tau-1}\|}. \quad (4.31)$$

4.5.3 Lyapunov スペクトルの数値的計算方法

前節では最大 Lyapunov 指数を数値的に取得する方法を見たが、Lyapunov 指数は本来相空間の次元と同じ個数存在する。次に、線形独立な $2N$ 個の方向に対する Lyapunov 指数 $\{\lambda_1, \lambda_1, \dots, \lambda_{2N}\}$ を求める方法を示す。それぞれの指数は、相空間内の線形独立な各方向に対する不安定性を測る指標となり、最大 Lyapunov 指数単独よりも相空間構造に関して多くの情報をもつ。接空間方程式 (4.18) は線形なハミルトン系であり、 $2N$ 個の独立な解 $\delta \mathbf{x}_1(t), \delta \mathbf{x}_2(t), \dots, \delta \mathbf{x}_{2N}(t)$ が存在する。これらは Gram-Schmidt の方法を用いて $\delta \mathbf{y}_1(t), \delta \mathbf{y}_2(t), \dots, \delta \mathbf{y}_{2N}(t)$ に直交化され

$$\delta \mathbf{y}_i(t) = \delta \mathbf{x}_i(t) - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{\langle \delta \mathbf{x}_i(t), \delta \mathbf{y}_j(t) \rangle}{\langle \delta \mathbf{y}_j(t), \delta \mathbf{y}_j(t) \rangle} \delta \mathbf{y}_j(t), \quad (i = 1, 2, \dots, 2N), \quad (4.32)$$

となる。この $\delta \mathbf{y}_i$ は Lyapunov ベクトルと呼ばれ、Lyapunov ベクトル (のうち少なくとも一つが) 指数関数的に伸びることを以てカオスが定義される。このとき、第 i Lyapunov ベクトルが指数的に引き延ばされる割合を長時間平均したものを第 i Lyapunov 指数といい、そのセットを Lyapunov スペクトルという：

$$\lambda_i = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log \frac{\|\delta \mathbf{y}_i(t)\|}{\|\delta \mathbf{y}_i(0)\|}, \quad (i = 1, \dots, 2N). \quad (4.33)$$

まず、 $2N$ 次元相空間内に互いに直交する $2N$ 個の初期変位ベクトルの組

$$\{\delta \mathbf{x}^0\} = \{\delta \mathbf{x}_1^0, \delta \mathbf{x}_1^0, \dots, \delta \mathbf{x}_{2N}^0\}, \quad (4.34)$$

を用意する。ここで各初期変位ベクトル $\delta \mathbf{x}_i^0$ は $2N$ 次元ベクトルで、上付きサフィックスは時刻、下付きサフィックスは各直交方向に付けられた番号を表す。それらの組である $\{\delta \mathbf{x}^0\}$ は $2N \times 2N$ 行列となる。これら $2N$ 個の初期条件のもとで接空間方程式 (4.18) をシンプレクティック法³によって直接積分し、各軌道を時間発展させる。時間発展によって得られた解ベクトルの組を

$$\{\delta \boldsymbol{\xi}^1\} = \{\delta \boldsymbol{\xi}_1^1, \delta \boldsymbol{\xi}_1^1, \dots, \delta \boldsymbol{\xi}_{2N}^1\}, \quad (4.35)$$

とする。初期時刻では直交関係にあった $\delta \mathbf{x}^0$ は時間発展によって $\delta \boldsymbol{\xi}^1$ に写されるが、一般にその直交性は壊れている。そこで、これらの解を Gram-Schmidt の方法によって直交化し、

$$\{\delta \boldsymbol{\eta}^1\} = \{\delta \boldsymbol{\eta}_1^1, \delta \boldsymbol{\eta}_1^1, \dots, \delta \boldsymbol{\eta}_{2N}^1\}, \quad (4.36)$$

とする。この $\boldsymbol{\eta}_i$ が指数的に引き延ばされる割合を長時間平均したものが Lyapunov 指数を与える。ここで、正の Lyapunov 指数による計算のオーバーフローを回避す

³ 元の力学系がハミルトン系であるなら、その接空間方程式もまたハミルトン系となり、シンプレクティック性を持つ。

るため、そのノルムを毎時刻調整（正規化⁴）して

$$\{\delta \mathbf{x}^1\} = \{\delta \mathbf{x}_1^1, \delta \mathbf{x}_1^1, \dots, \delta \mathbf{x}_{2N}^1\}, \quad (4.37)$$

を生成し、このセットを (4.18) に取り込ませて時間発展を継続する。ここまでのスキームをある時刻 τ について整理すると以下のようなになる：

$$(i) \delta \mathbf{x}_i^{\tau-1} \xrightarrow{(4.18)} \delta \xi_i^\tau : \text{symplectic integrator.} \quad (4.38)$$

$$(ii) \delta \xi_i^\tau \xrightarrow{\text{orthogonalization}} \delta \eta_i^\tau \xrightarrow{\text{normalization}} \delta \mathbf{x}_i^\tau : \text{Gram-Schmidt method.} \quad (4.39)$$

$$\begin{aligned} \delta \eta_1^\tau &= \delta \xi_1^\tau, & \delta \mathbf{x}_1^\tau &= \delta \eta_1^\tau / \|\delta \eta_1^\tau\|, \\ \delta \eta_2^\tau &= \delta \xi_2^\tau - \langle \delta \xi_2^\tau, \delta \mathbf{x}_1^\tau \rangle \delta \mathbf{x}_1^\tau, & \delta \mathbf{x}_2^\tau &= \delta \eta_2^\tau / \|\delta \eta_2^\tau\|, \\ & \dots \dots \dots & & \\ \delta \eta_{2N}^\tau &= \delta \xi_{2N}^\tau - \sum_{j=1}^{2N-1} \langle \delta \xi_{2N}^\tau, \delta \mathbf{x}_j^\tau \rangle \delta \mathbf{x}_j^\tau, & \delta \mathbf{x}_{2N}^\tau &= \delta \eta_{2N}^\tau / \|\delta \eta_{2N}^\tau\|. \end{aligned}$$

以上から Lyapunov ベクトルの指数拡大率の累積時間平均

$$\lambda_i(t) = \frac{1}{\Delta t \cdot T} \sum_{\tau=1}^T \log \frac{\|\delta \eta_i^\tau\|}{\|\delta \mathbf{x}_i^{\tau-1}\|}, \quad (4.40)$$

が求まる。また、注4より

$$\lambda_i(t) = \frac{1}{\Delta t \cdot T} \sum_{\tau=1}^T \log \|\delta \eta_i^\tau\|, \quad (4.41)$$

となる。 $\lambda_i(t)$ は時間無限大 ($t \rightarrow \infty$) の極限で Lyapunov 指数 λ_i に一致する。また、Lyapunov スペクトルから計算される Kolmogorov-Sinai エントロピー

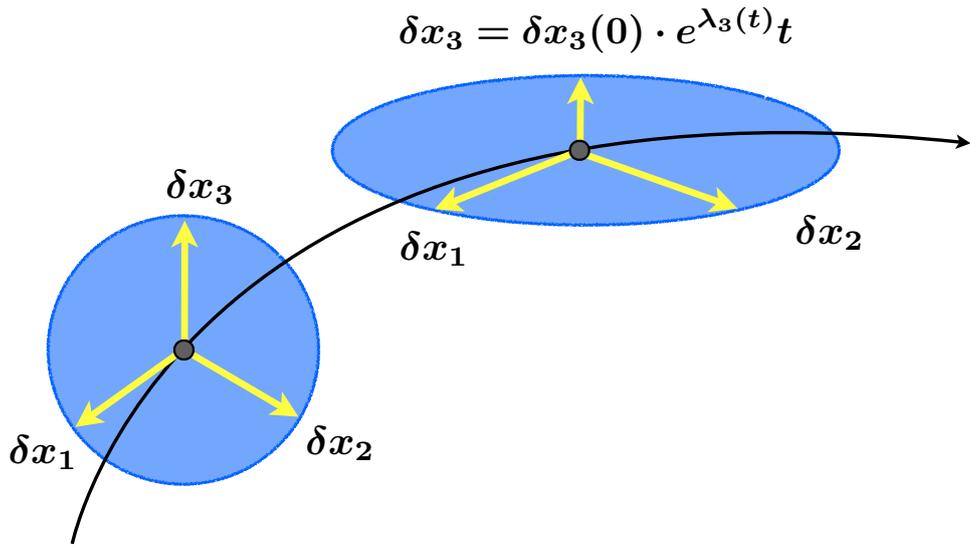
$$S_{KS} = \sum_{i=1}^N \lambda_i, \quad (4.42)$$

はある状態点の集合が相空間内を輸送されてゆく際の、領域の拡大率、すなわち N 次元体積要素の拡大率を意味している。

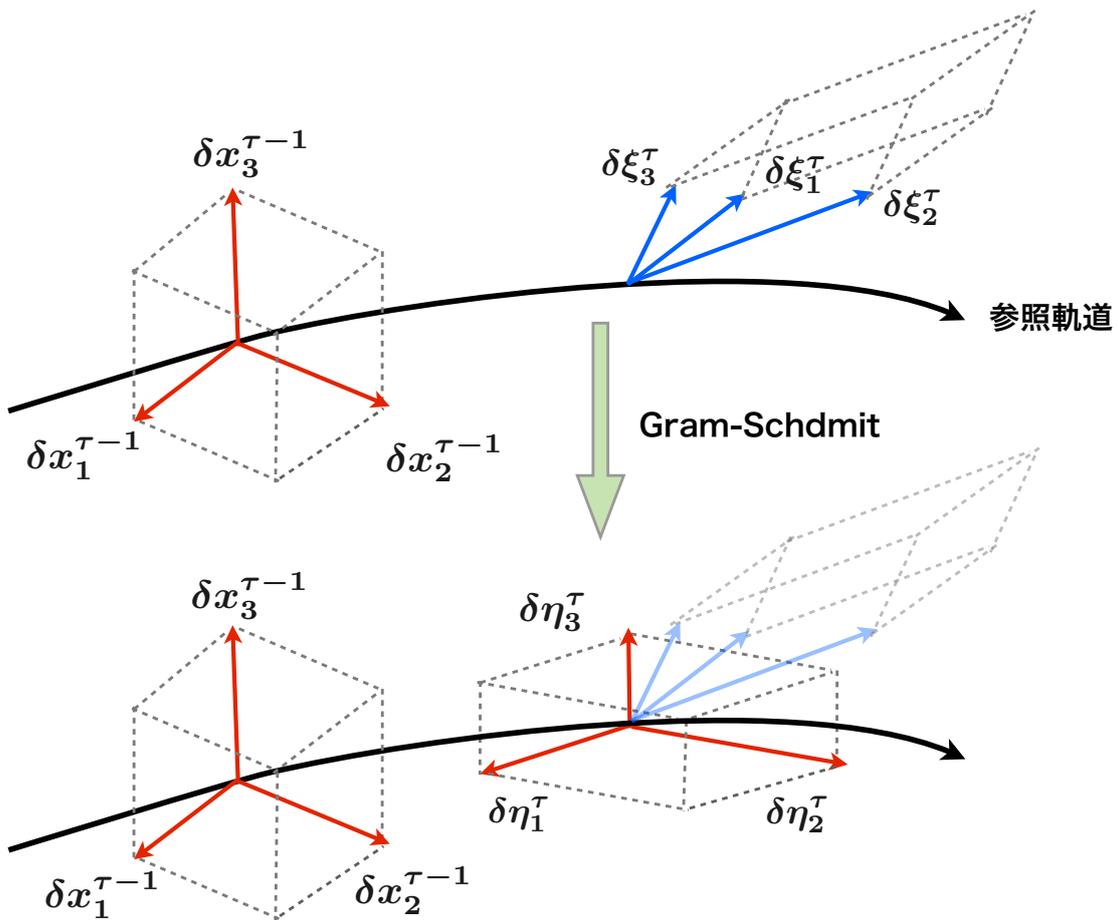
$$V(t) \sim \exp(t S_{KS}). \quad (4.43)$$

以上の Lyapunov スペクトルの計算スキームのイメージ図を図 4.5 に示しておく。

⁴一般に Lyapunov 指数は、参照軌道の初期条件 \mathbf{x}^0 と初期変位 $\delta \mathbf{x}^0$ に依存する量であるが、[Ose68][BGS76] によれば、初期値空間においてルベグ測度がゼロとなるような集合を除いて、初期値に依存せずにある値に収束する。したがって、本論文においては初期変位ベクトルの組 $\{\delta \mathbf{x}^0\} = \{\delta \mathbf{x}_1^0, \delta \mathbf{x}_1^0, \dots, \delta \mathbf{x}_{2N}^0\}$ として正規直交ベクトルを選ぶこととする。この場合、各ノルムは「微小ではない（大きさ1）」が、これは Lyapunov 数が変位の大きさにとは無関係で方向だけで決まる量であることから正当化される。したがって、「軌道の引き戻し」操作において「正規化」が行われる。



(a) Lyapunov スペクトルは微小変位超球の変形に際して主軸の伸長を定量化したものとなる。



(b) Lyapunov スペクトルの数値計算スキーム。

図 4.5: Lyapunov スペクトルのイメージ (a) と Lyapunov スペクトルの数値計算スキームのイメージ。接空間方程式による時間発展と Gram-Schmidt 直交化を繰り返し用いて、各 Lyapunov ベクトルの指数成長の割合を求める。

4.6 Hénon-Heiles 模型の場合

ここでは、Hénon-Heiles 模型を例に Lyapunov スペクトラムと相空間内の軌道 (Poincaré 写像) の比較を行うことにする。Hénon-Heiles 模型 [HH64] は、銀河力学系における第三積分 (エネルギー、角運動量以外に相空間の運動領域を狭めるような保存量) を議論する中で提唱された、2 自由度の非線形ハミルトン系である。系のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{k}{2}(q_x^2 + q_y^2) + \lambda \left(q_x^2 q_y - \frac{1}{3} q_y^3 \right), \quad (4.44)$$

と表され、粒子は 2 次元ポテンシャル内を運動する (図 4.6)。相空間は (p_1, p_2, q_1, q_2) の 4 次元で張られ、エネルギー保存の拘束から実際の軌道は 3 次元に展開している。Hénon-Heiles 模型の相空間では、トーラスが形作る「島構造」とカオスの「海」が

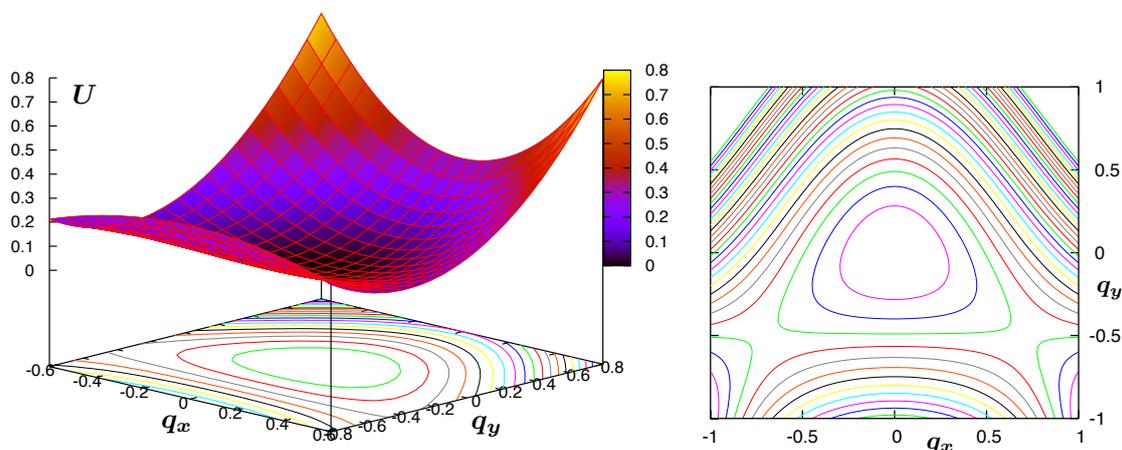


図 4.6: Hénon-Heiles 模型のポテンシャル曲面と等高線。

共存する様子が見られ、Poincaré-Birkhoff の定理が主張する相空間のフラクタル性や摂動パラメタの増加に伴うトーラスの崩壊などが観測される典型例となっている。図 4.7 および図 4.8 に Hénon-Heiles 模型の Poincaré surface of section Σ を示した。横軸は q_y 、縦軸は p_y を表しており、軌道が $q_x = 0$ を $q_x > 0$ で通過した点を Poincaré 写像としている。初期条件はエネルギー曲面上に一様にサンプリングしている。系の摂動パラメタ (すなわちエネルギー) が低い領域においては周期的な相空間構造 (島) が見られるが、エネルギーの増加に伴って徐々にランダムな点列 (カオスの海) が広がる様子が確認できる。また図 4.9 から、Poincaré-Birkhoff の定理が主張する相空間の階層的構造を確認することができる。図 4.10 にはいくつかの軌道に対する Poincaré 写像と Lyapunov スペクトルを示した。周期的運動が見られる場合には Lyapunov 指数はゼロに減衰するが、周期軌道が破壊されてカオスが発生する場合にはゼロでない値を取るようになる。

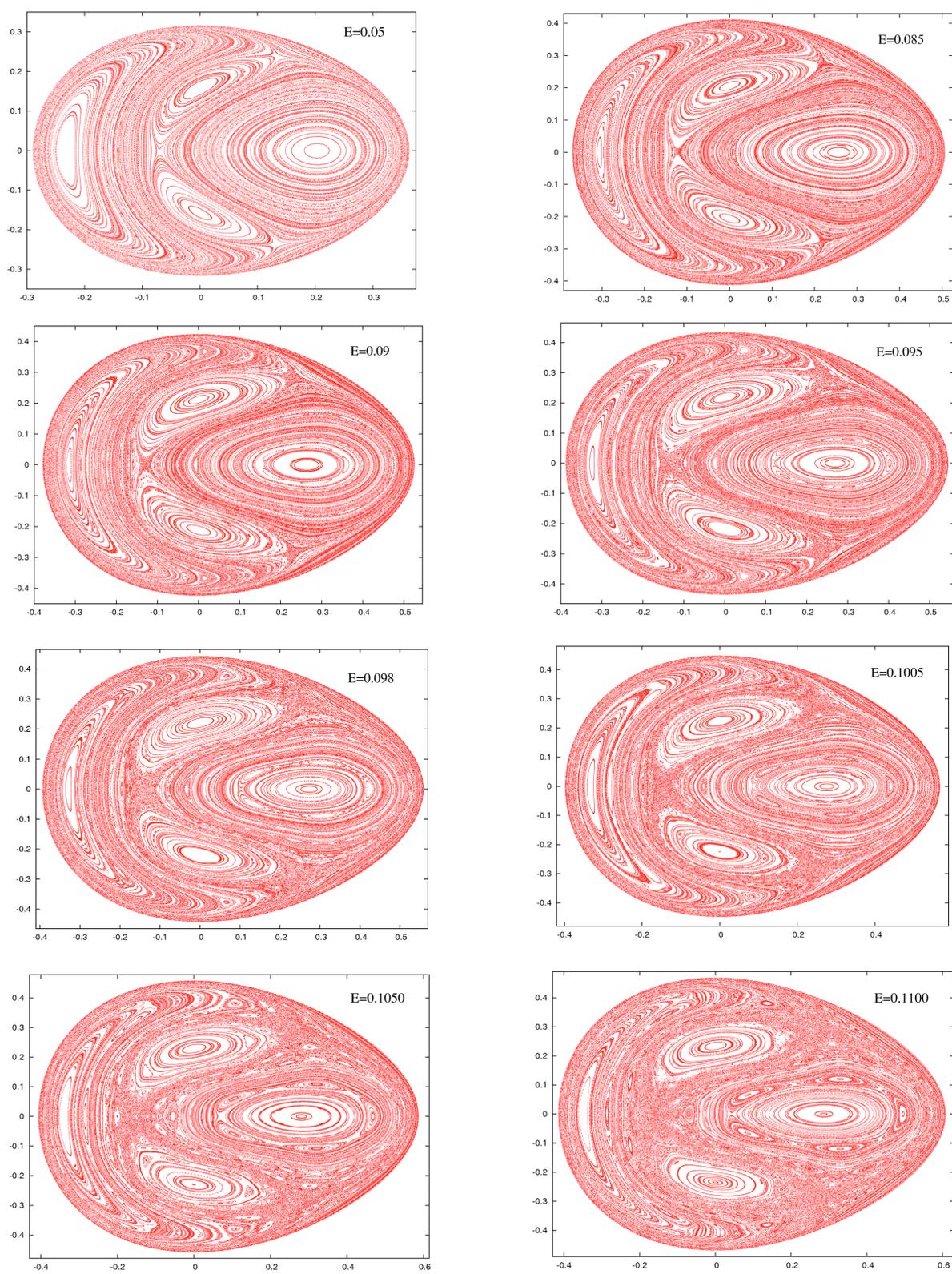


図 4.7: Hénon-Heiles 模型における Poincaré 断面の様子。

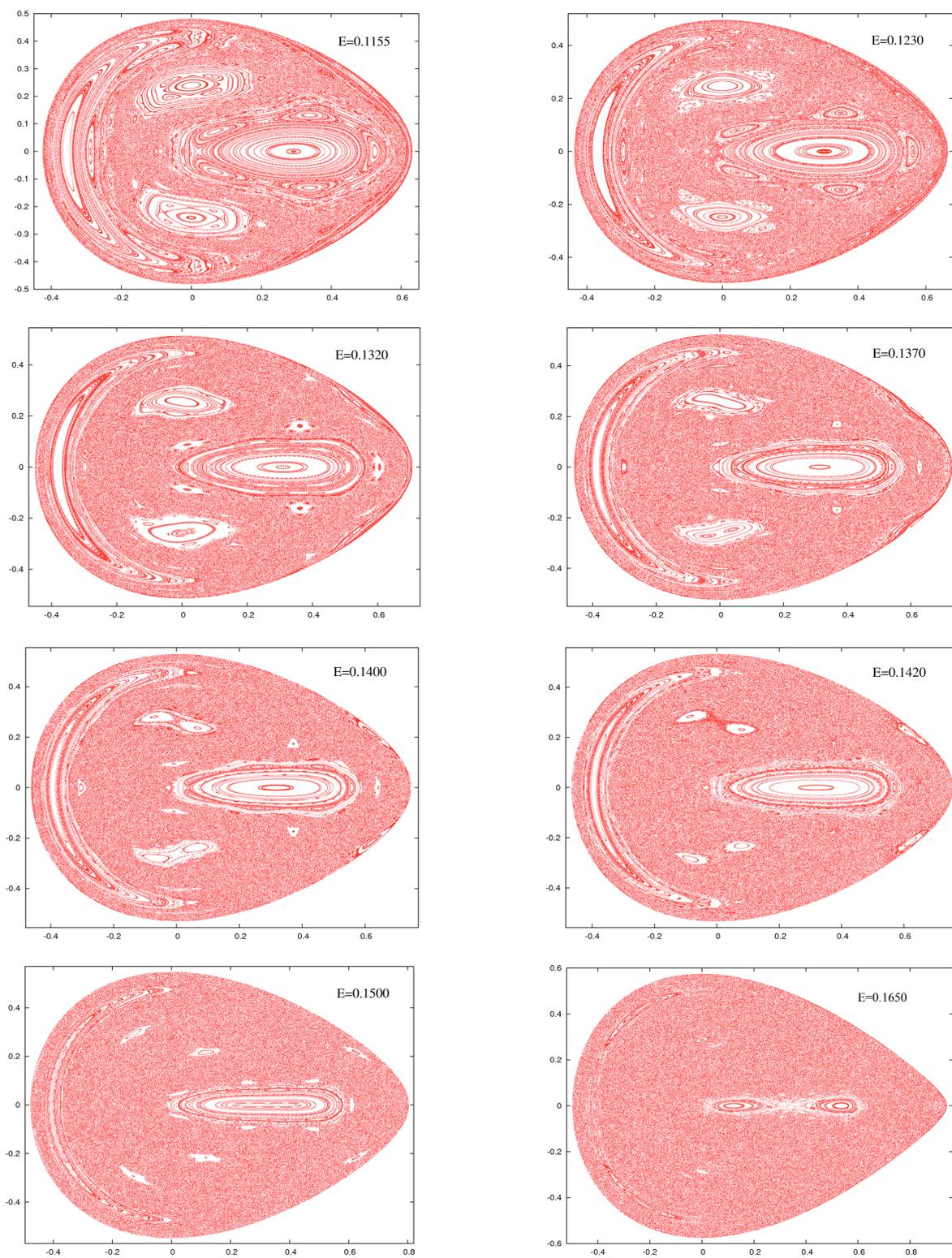


図 4.8: Hénon-Heiles 模型における Poincaré 断面の様子。

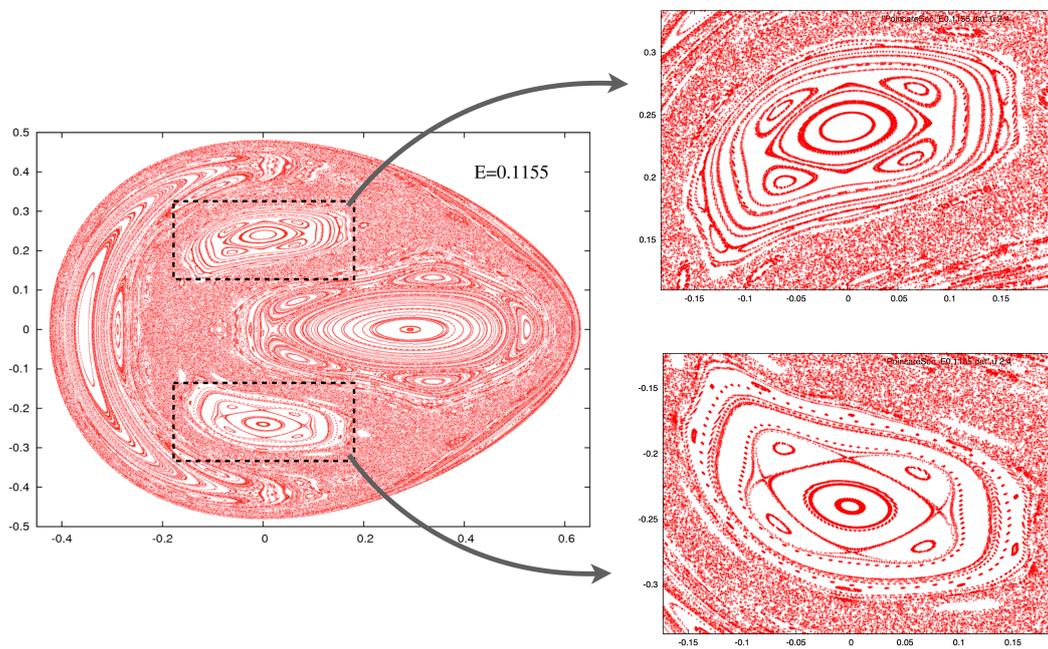


図 4.9: Poincaré-Birkhoff の定理の主張どおり，相空間が階層構造を形成している。

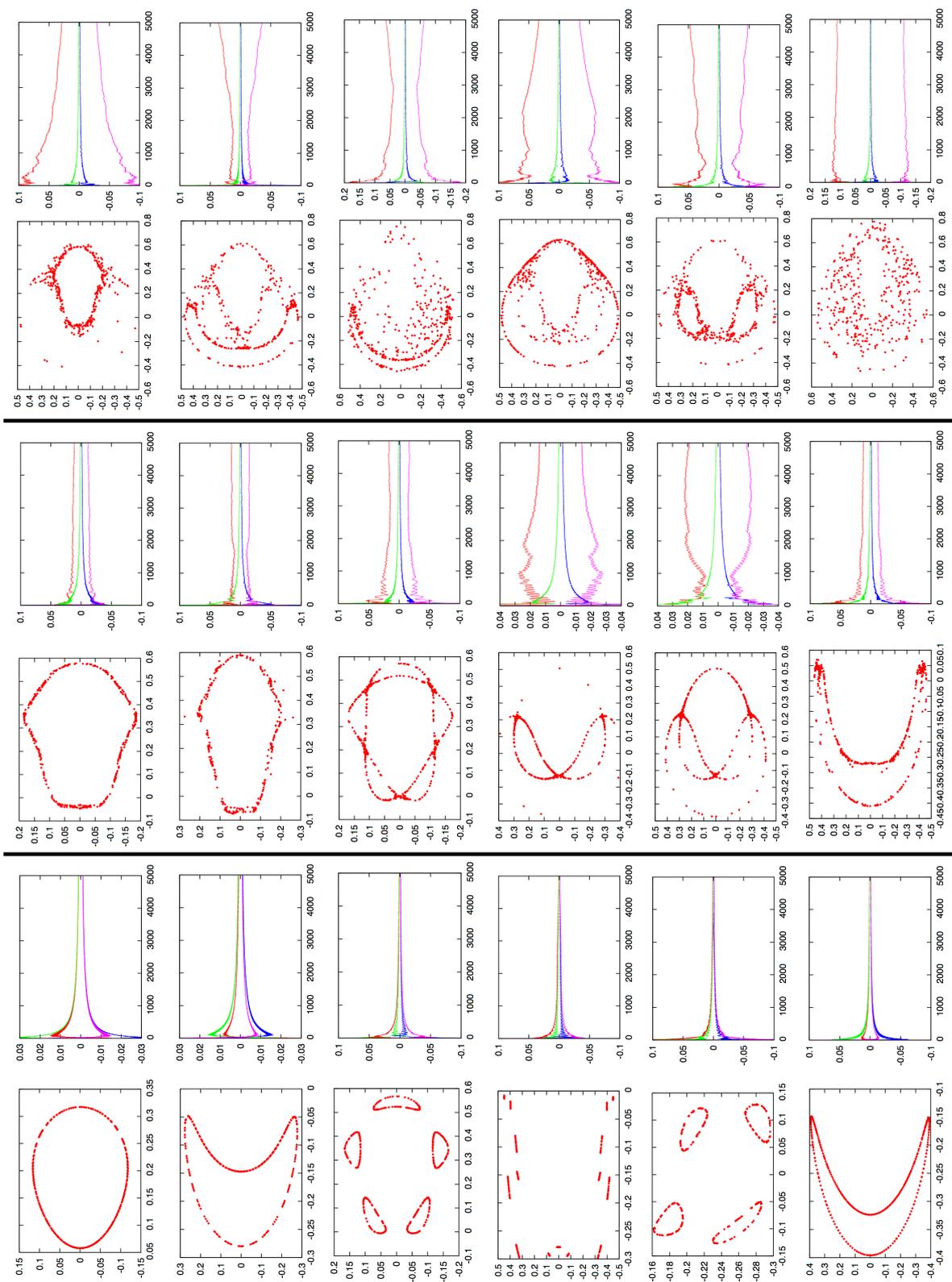


図 4.10: Hénon-Heiles 模型における Poincaré 断面と Lyapunov スペクトルの関係。

第5章 Multistage Slow Relaxation

5.1 プラトーおよび遅い多重緩和過程

まず4.4において導入した粗視化された緩和指標 σ (4.10) および N_{ex} (4.13) の性質を見るため、2つの典型的な例（高エネルギー、低エネルギー励起）に関してその挙動を見てみることにする。いま、 $\bar{\sigma}$ と $\overline{N_{\text{ex}}}$ を長時間平均

$$\bar{\sigma}(t) = \frac{1}{t} \int_0^t \sigma(t') dt', \quad (5.1)$$

$$\overline{N_{\text{ex}}}(t) = \frac{1}{t} \int_0^t N_{\text{ex}}(t') dt', \quad (5.2)$$

とし、これらとモードエネルギー占有率の長時間平均 $\bar{\rho}_k$ と比較して例示する（図5.1）。ただし模型のパラメタは $\kappa = 1, \alpha = \beta = 1/8, m = 1$ であり、本論文を通してこれらは変更されない。励起エネルギーが低い場合（図5.1(a), 5.1(b), $E_0 = 0.575, \epsilon_0 = E_0/N = 1.797 \times 10^{-2}, N = 32$ ），にはモードエネルギー間のエネルギー交換が十分にされず、本来分配されるべき32個のモードのうちわずか6個のモードだけが支配的にエネルギーを占有し、さらに各モードは互いに異なる特定の値へ収束し、計算時間中 ($t_{\text{max}} = 2 \times 10^6$) にエネルギー等分配が達成されない。なお、この計算条件は、FPUのオリジナル論文において再帰現象が確認されたパラメタ領域付近にある。この非混合的な緩和の様子は、 $\bar{\sigma}, \overline{N_{\text{ex}}}$ ではプラトーという形で現れる。一方エネルギーが高い場合（図5.1(c), 5.1(d), $E_0 = 3.575, \epsilon_0 = E_0/N = 1.117 \times 10^{-1}, N = 32$ ），各モードエネルギーは共通の値へと収束して等分配が達成され、 $\bar{\sigma}$ および $\overline{N_{\text{ex}}}$ は順調にその値を減少・増加させている。

図5.1ではデモンストレーションのために2つの極端な ϵ_0 の場合を示したが、より広い ϵ_0 領域に関する結果を図5.2に示す。図中のプロットシンボルの違いはエネルギー密度 ϵ_0 の違いを表し、 ϵ_0 が低い系から高い系の順に図中上から下に並んでいる。エネルギー密度の領域は $\epsilon_0 = 2.344 \times 10^{-3}, \dots, 3.695 \times 10^{-1}$ で、等間隔 $\Delta\epsilon_0 = 7.813 \times 10^{-3}$ で48分割している。またここで示した結果は10の異なる初期励起位相の軌道を平均化したものである。低いエネルギー密度に関しては先の例に示したように緩和が数値計算中に達成されず、プラトーが最後まで持続している。また中間エネルギー密度領域では緩和の途中にプラトーが形成され、熱化が長時間阻害されたのち、プラトーが崩壊して緩和が遂行される様子が見られる。エネルギー密度が高くなるとプラトーはほとんど確認されず、緩和は比較的速やかに遂行されることがわかる。エネルギーが低い場合に見られる振動ゆらぎは、再帰現象に由来するものである。結果として、緩和過程にプラトーが形成されこれがボトルネック

としてはたらくことで緩和が大幅に遅延する様子が確認できる。

プラトーに挟まれた二段階緩和はガラス転移における α 緩和と β 緩和ときわめてよく似ている。二段階ダイナミクスの存在についてはこれまでも先行研究で報告されている。本研究ではそれらとは異なる指標で同様に二段階緩和 (two-stage relaxation) を確認した。しかし、より詳細な観察によると、特に小さなシステムサイズの系において、多段階緩和 (multistage relaxation) が存在することが分かる。

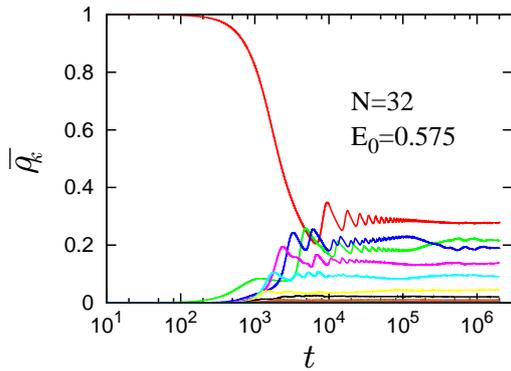
multistage relaxation の顕著な例を図 5.3 に示した。上図は $N = 32$ ($\epsilon_0 = 4.141 \times 10^{-2}, 5.703 \times 10^{-2}, 6.484 \times 10^{-2}, 7.266 \times 10^{-2}$), 下図は $N = 16$ ($\epsilon_0 = 2.648 \times 10^{-1}, 2.055 \times 10^{-1}, 2.211 \times 10^{-1}, 2.289 \times 10^{-1}, 2.602 \times 10^{-1}$) の場合の計算結果で、さまざまな初期励起位相から計算したものを示している。上図においては $t \sim 10^3$ から 10^4 にかけて、下図においては $t \sim 2.5 \times 10^2$ から 7.5×10^3 にかけて、緩和の凍結状態 (プラトー) が確認できる。このプラトーはある時刻で崩壊し、緩和が再開するが、その後の緩和にはいくつもの「小さなプラトー」もしくはプラトーとまでは言えない「なだらかなスロープ」による階段状の構造が見受けられる。すなわち興味深いことに FPU 模型における緩和には「遅さ」があるだけでなく、「多段階性」が伴うことが分かる。

5.2 緩和時間 - 緩和の全体像を引き出す

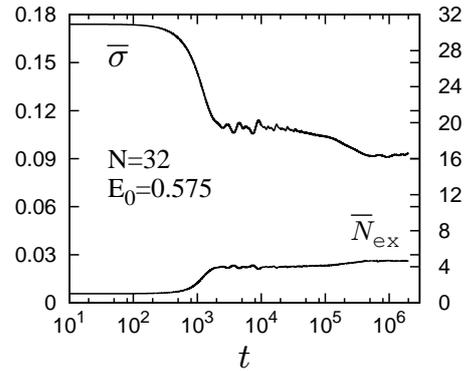
前節において FPU 模型が示す緩和はただ単純に遅いだけでなく、そこに多段階性があることが分かった。次に、この多段階緩和およびプラトーの形成をクリアに捉えるため、緩和時間を導入し、励起エネルギー密度の関数として算出する。

いま、あるエネルギー密度 ϵ_0 のもとでダイナミクスが時間発展し、 $\sigma(t)$ がある緩和判定レベル σ° を通過したとする。このときの通過時刻を緩和時間 τ_{σ° として定義する (図 5.4)。これにより、あるひとつの緩和判定レベルを設定することで緩和時間を励起エネルギーの関数として表現することができる (図 5.5)。なお、エネルギー密度の領域は $\epsilon_0 = 2.344 \times 10^{-3}, \dots, 3.695 \times 10^{-1}$ で、等間隔 $\Delta\epsilon_0 = 7.813 \times 10^{-3}$ で 48 分割する。例外として、計算時間内 ($t_{\max} = 2 \times 10^6$) に判定レベルへ到達しない場合には緩和時間を算出しないものとする。

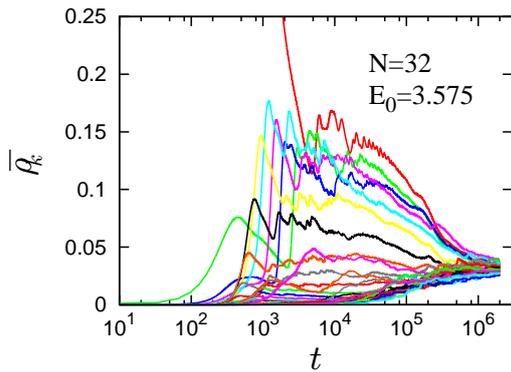
緩和時間を算出する際に、緩和判定レベル σ° の選択の仕方によって恣意性が入り込む余地がある。特に、すでに前節において緩和に多重性があることが確認されており、 σ° の値によって緩和時間の ϵ_0 依存性は大きく異なると思われる。それは、プラトーの上下に設置された 2 つの σ° を想定すれば明らかである。すなわち σ° を決める事は、観察すべきダイナミクスの発展段階 (phase) を固定することを意味し、当然それを決めるための正当な指針はない。そこで、 σ° をひとつに固定することによって非自明なダイナミクスの特性を見落とすことのないよう、複数の σ° を設置することで、ダイナミクス全体を捉えることとする。図 5.6 および図 5.7 に、複数の判定レベルの設置とそれによる緩和時間の計測を模式的に示した。2 つの図中では共通のシンボル (●, ■, ▲, ○, □) を用いている。図中ではわずか 2 つの ϵ_0 , 5 本の σ° の場合を例示しているが、実際は 48 の ϵ_0 および 100 の σ° のもとで緩和時間



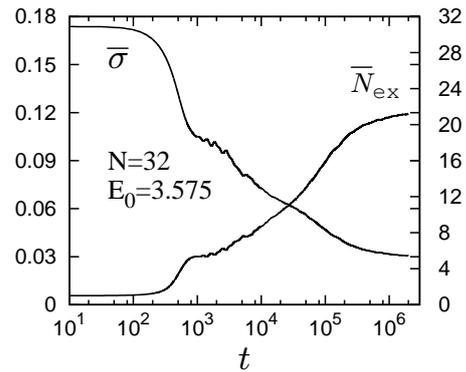
(a) 低エネルギー条件下 ($E_0 = 0.575$) におけるモードエネルギー-長時間平均 $\bar{\rho}_k$ の時間発展



(b) 左図の挙動に対応する緩和指標 $\bar{\sigma}$ および \bar{N}_{ex} の時間発展



(c) 高エネルギー条件下 ($E_0 = 3.575$) におけるモードエネルギー-長時間平均 $\bar{\rho}_k$ の時間発展



(d) 左図の挙動に対応する緩和指標 $\bar{\sigma}$ および \bar{N}_{ex} の時間発展

図 5.1: 2つの典型的な事例 (低エネルギー励起, 高エネルギー励起) に関して, $\bar{\rho}_k$, $\bar{\sigma}$, \bar{N}_{ex} の時間発展を示す。低エネルギーの場合には等分配は達成されず, 緩和指標は途中で停滞するが, 高エネルギーの場合は等分配が実現していることが分かる。緩和の停滞は $\bar{\sigma}$ と \bar{N}_{ex} に関してはプラトーという形で現れる。

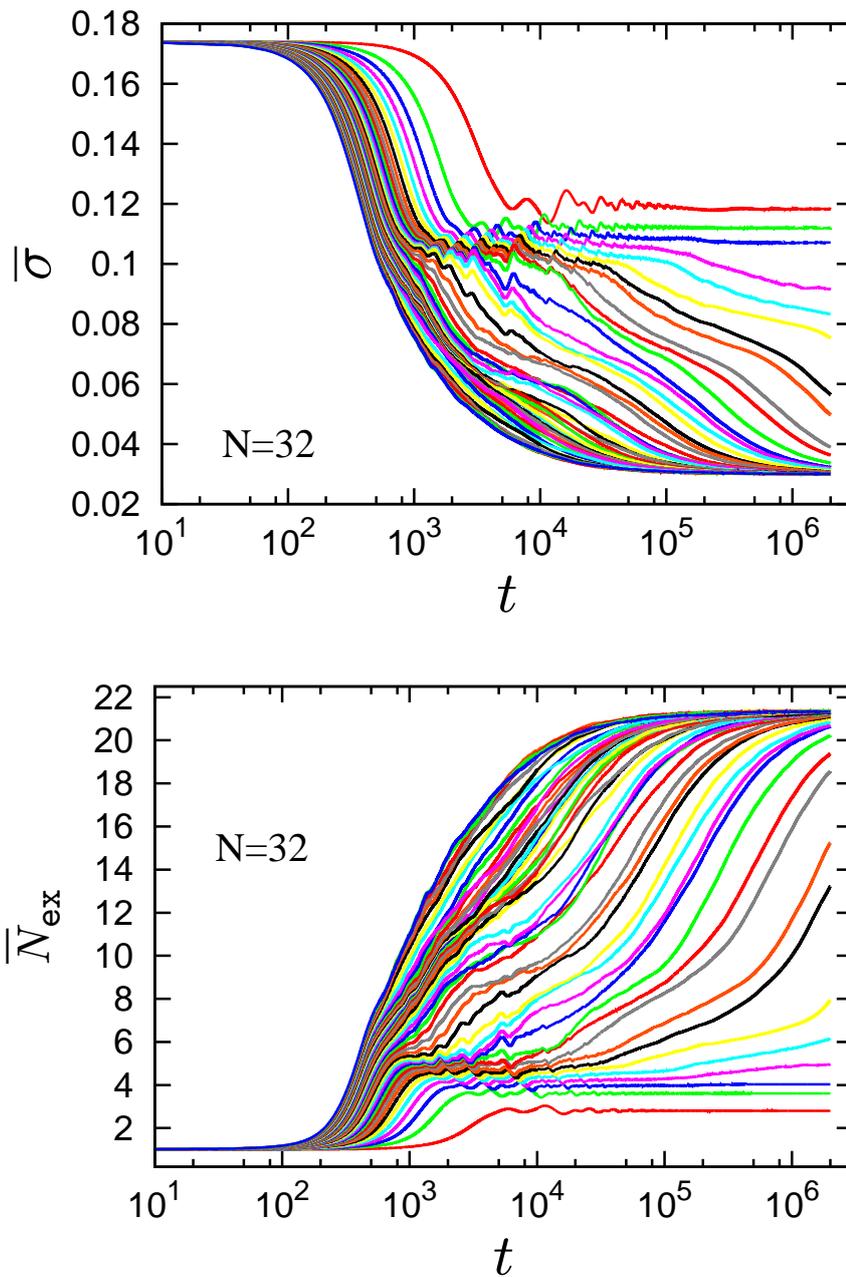


図 5.2: 様々なエネルギー密度で励起した場合の緩和過程。システムサイズは $N = 32$ における緩和指標 $\bar{\sigma}$ および \bar{N}_{ex} の時間発展を示している。プロットカラーの違いはエネルギー密度 ϵ_0 の違いを表す。エネルギー密度の範囲は $\epsilon_0 = 2.344 \times 10^{-3}, \dots, 3.695 \times 10^{-1}$ であり、 $\bar{\sigma}$ に関しては図中の上部から下部に向けて ϵ_0 が大きくなり、 \bar{N}_{ex} に関しては図中の下部から上部に向けて ϵ_0 が大きくなっている。比較的低い ϵ_0 で励起した場合には、緩和過程に長時間持続するプラトーが形成され緩和が大幅に遅延する様子が確認できる。このプラトーを伴う遅い緩和はガラス転移における α, β 緩和にきわめてよく似ている。低 ϵ_0 領域のプラトーに見られるゆらぎは、FPU のオリジナル論文 [FPU55] において報告された再帰現象によるものである。

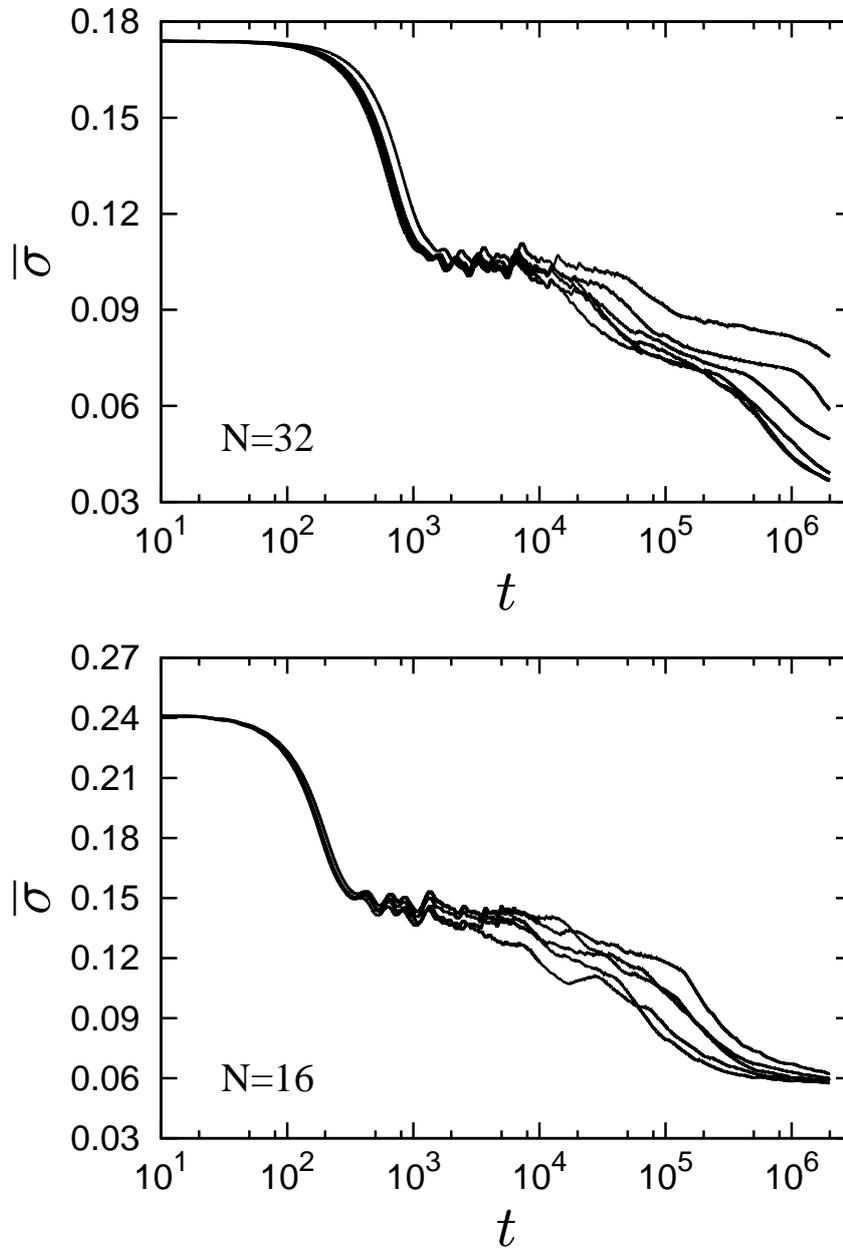


図 5.3: $\bar{\sigma}$ および \bar{N}_{ex} の時間発展において見られる多段階な遅い緩和 (multistage slow relaxation)。図はシステムサイズ $N = 32$ と $N = 16$ において見られる multistage slow relaxation のうちいくつかの顕著な例を示している。 $N = 32$ (上図) に示された結果はエネルギー密度が $\epsilon_0 = 4.141 \times 10^{-2}, 5.703 \times 10^{-2}, 6.484 \times 10^{-2}, 7.266 \times 10^{-2}$ の場合のもので、 $N = 16$ (下図) に示された結果は $\epsilon_0 = 2.648 \times 10^{-1}, 2.055 \times 10^{-1}, 2.211 \times 10^{-1}, 2.289 \times 10^{-1}, 2.602 \times 10^{-1}$ に対するもの。

を計測する。このプロトコルによれば、プラトーが存在する近傍に取った複数の σ° で計測した緩和時間には明確な違いが現れる。すなわち図 5.7 に示したような (▲と○の) 緩和時間ギャップが明確に検出され、そのギャップの大きさはほぼプラトーの寿命となる。以上の方法と同様に有効励起自由度に関する緩和時間も、判定レベルを N_{ex}° として $\tau_{N_{\text{ex}}^\circ}(\epsilon_0)$ と定義することができる。

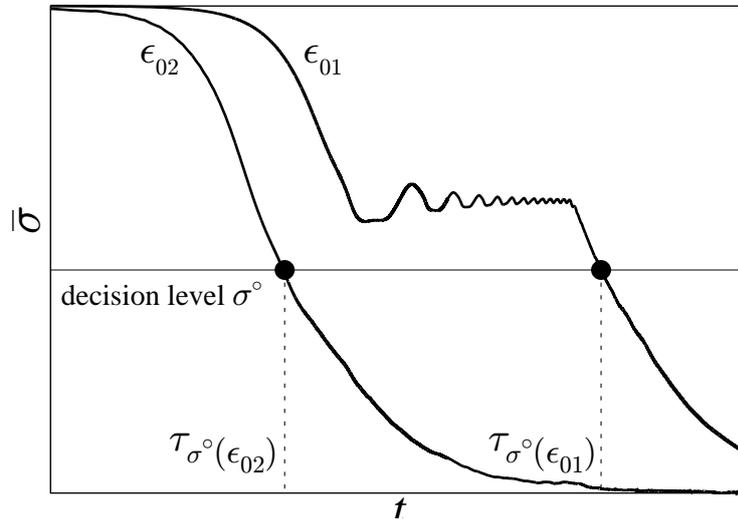


図 5.4: σ に関する緩和時間 τ_{σ° の定義。簡単のため、この図では 2 つの異なるエネルギー密度 ϵ_{01} , ϵ_{02} の下での σ を示している。緩和曲線がある緩和判定レベル σ° を通過した時刻を緩和時間 $\tau_{\sigma^\circ}(\epsilon_0)$ と定義する。

5.3 励起時間 - モードの個性を引き出す

前節で導入した緩和時間 $\tau_{\sigma^\circ}(\epsilon_0)$ および $\tau_{N_{\text{ex}}^\circ}(\epsilon_0)$ は各モードの挙動を捨象することで緩和の巨視的な特性を抽出するものであるが、ここでは前節で切り捨てられている各モードの特性に着目して「モード励起時間 τ_k 」を導入する。

いま、初期励起条件として最低周波数モードを単一に励起している。この条件のもとで、その他の高周波数モードがどのようにエネルギーを獲得していくかに着目する。ここで $k=2$ 以降のすべてのモードに対して、等分配達成度が 25% となる (すなわち各モードのエネルギー占有率が $\bar{\rho}_k = 0.25\rho^* = 0.25/N$ となる) までに要する時間「励起時間」を計算する。励起時間の計測方法を図 5.8 に模式的に示した。ここで計測される「励起時間」は前節の「緩和時間」とはモードの個性に着目しているという点で決定的に異なる量である。

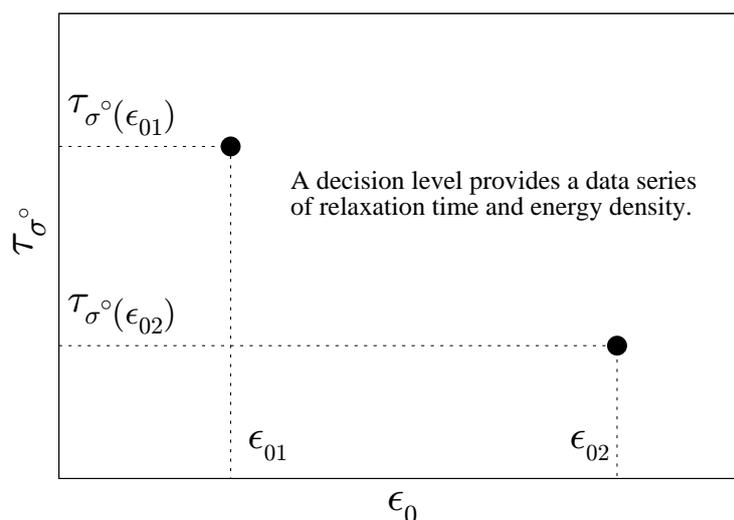


図 5.5: ひとつの緩和判定レベル σ° によってエネルギー密度 ϵ_0 と緩和時間 τ_{σ° のデータ系列がひとつ得られる。図中に示された2個のデータ点は図 5.4 から得られたものを示す。

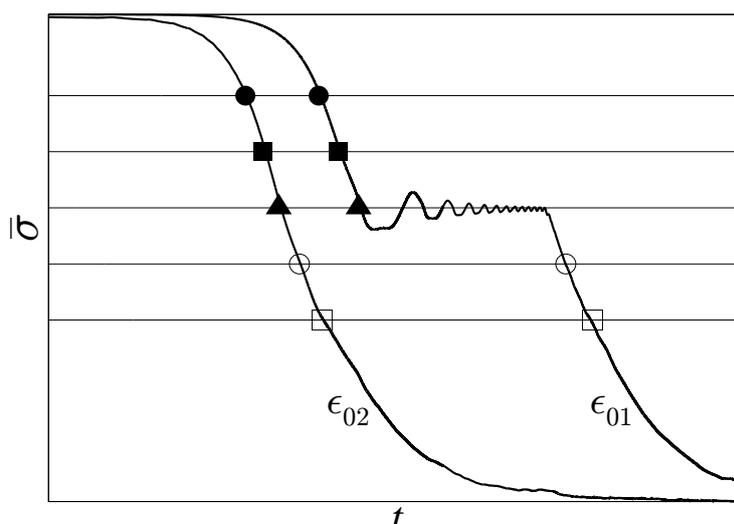


図 5.6: 多数の緩和判定レベル σ° に対して $\tau_{\sigma^\circ}(\epsilon_0)$ を計測する方法を示す。緩和判定レベル σ° をひとつ置くことによって図 5.4 と図 5.5 に示したようなデータ系列 $(\tau_{\sigma^\circ}, \epsilon_0)$ が得られる。我々は多数の σ° (図中では簡単のため、5個の判定レベルを設置した場合を示した) を図の上部から下部に渡って埋め尽くすように置いた。これらの緩和判定レベルは等間隔で置かれ、緩和の全体的な情報を検出する利点をもつ。1個や少数の判定レベルで計測された緩和時間は系のダイナミクスのごく局所的な情報しか検出できないが、この方法によれば、判定レベルの選び方に関する依存性は問題とならず、ダイナミクス全体を隈無く調べることができる。高い σ° は系がプラトーにトラップされる前、すなわち緩和初期のダイナミクスを捉え、一方で低い σ° は緩和後期のダイナミクスを捉える。

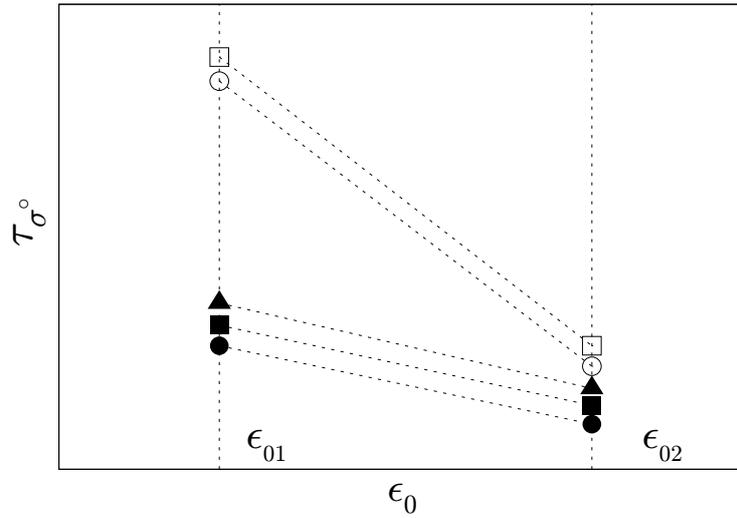


図 5.7: 図 5.6 で計測された緩和時間 τ_{σ} の励起エネルギー密度 ϵ_0 依存性。図中にシンボルは図 5.6 のそれと共通のものを用いている。 $\epsilon = \epsilon_{01}$ において \blacktriangle と \circ の間に顕著な緩和時間のギャップが確認できる。これは長時間持続するようなプラトーが存在することを示している。

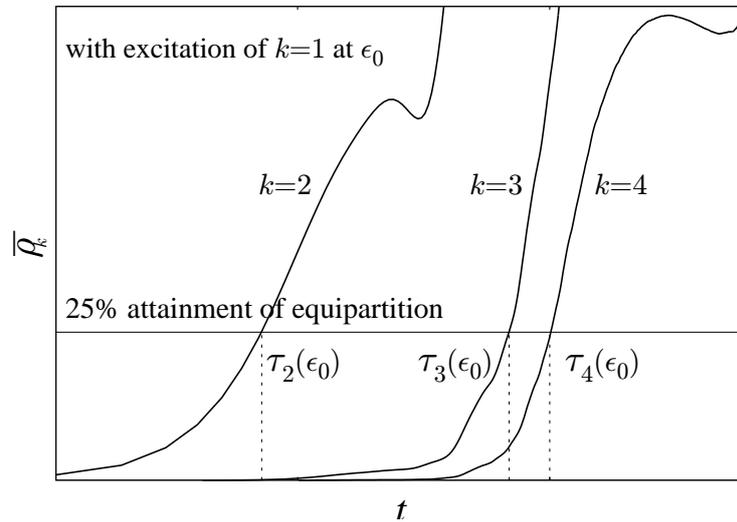


図 5.8: 各ノーマルモードの励起時間 $\tau_k(\epsilon_0)$ の計測方法。励起判定レベルは $\bar{\rho}_k = 0.25\rho^*$ に固定する。ここで ρ^* はエネルギー等分配が成立した状態での各モードのエネルギー占有率，すなわち $1/N$ を意味する。

5.4 緩和時間のエネルギー密度依存性

図 5.2 で見られたガラス転移的な遅い緩和に対する緩和時間 τ_σ および $\tau_{N_{\text{ex}}^\circ}$ の励起エネルギー密度 ϵ_0 依存性を図 5.9 に示す。計算条件は図 5.2 と同様に、 $N = 32$, $\epsilon_0 = 2.344 \times 10^{-3}, \dots, 3.695 \times 10^{-1}$, である。横軸はエネルギー密度 ϵ_0 , 縦軸は緩和時間 τ_{σ° , $\tau_{N_{\text{ex}}^\circ}$ の両対数表示で、シンボルの違いは緩和の判定レベル σ° , N_{ex}° の違いを表している。緩和の判定レベルは $\sigma^\circ = 0.17$ から 0.0035, $N_{\text{ex}}^\circ = 21$ から 1.2 を 100 等分割している。判定レベルがエネルギー等分配状態から遠い順（上図の場合には σ° が大きい順, 下図の場合には N_{ex}° が小さい順）に、図中下から上にプロットされている。すなわち図中下部にプロットされているデータ列はダイナミクスの初期段階に関する緩和特性を与え、逆に上部のデータ列はダイナミクスの後期段階に関する知見を与える。

図 5.9 から明らかなように、明確に分離した 2 つの異なる緩和特性の存在が確認できる。ダイナミクスの初期過程においては緩和時間が ϵ_0 の逆数に関してべき的依存性

$$\tau(\epsilon_0) = \frac{a}{\epsilon_0^b} \quad (a, b : \text{const.}), \quad (5.3)$$

を持つことが分かる。このべき則が成立する「ダイナミクス初期過程」とは図 5.2 において見られる“最初”のプラトーに拘束される前のダイナミクスに相当している。一方、判定レベルがプラトーが横たわる位置をまたぐと、プラトーの寿命に相当する緩和時間のギャップが形成され、緩和特性はべき則から大幅に分岐してゆく様子が確認できる。プラトーに挟まれた緩和の二段階性は、緩和特性がべき則 (a/ϵ_0^b) から別の特性領域へと遷移することによる二段階性であるということが出来る。またエネルギー密度が高い領域においては緩和の全域でべき則が成立するが、徐々にエネルギー密度が低下すると緩和特性が分岐し始めている。これまでの先行研究において導入されてきた stochasticity threshold をこの場合定義するのであれば、緩和特性が分離するエネルギー密度 ϵ^* を臨界値とすべきであろう。本論文では、このように分離した 2 つのプラトー形成前の運動相とプラトー崩壊後の運動相をそれぞれ “graceful relaxation” と “sticky relaxation” と呼ぶことにする。

次に表示の視点を変えて図 5.9 とまったく同じデータ列を $(\tau_\sigma^\circ, \sigma^\circ)$ 空間と $(\tau_{N_{\text{ex}}^\circ}, N_{\text{ex}}^\circ)$ 空間にプロットし直すと図 5.10 を得る。図中のシンボルはエネルギー密度 ϵ_0 の違いを表し、図の上部から下部に向けて ϵ_0 が増加している。理想的な単調緩和であれば、この空間では欠損のない連続的な曲線が描かれるが、図 5.10 が示す結果はそれとは違う緩和特性の存在を捉えている。エネルギー密度が高い領域（図の下部）に関してはなめらかな緩和曲線が描かれているが、エネルギー密度が比較的低い領域においては、プラトーに相当する緩和曲線の欠損が見られる。またさらに、複数の欠損が階段状の構造をなしており、緩和の多段階性が明確に捉えられていることが分かる。

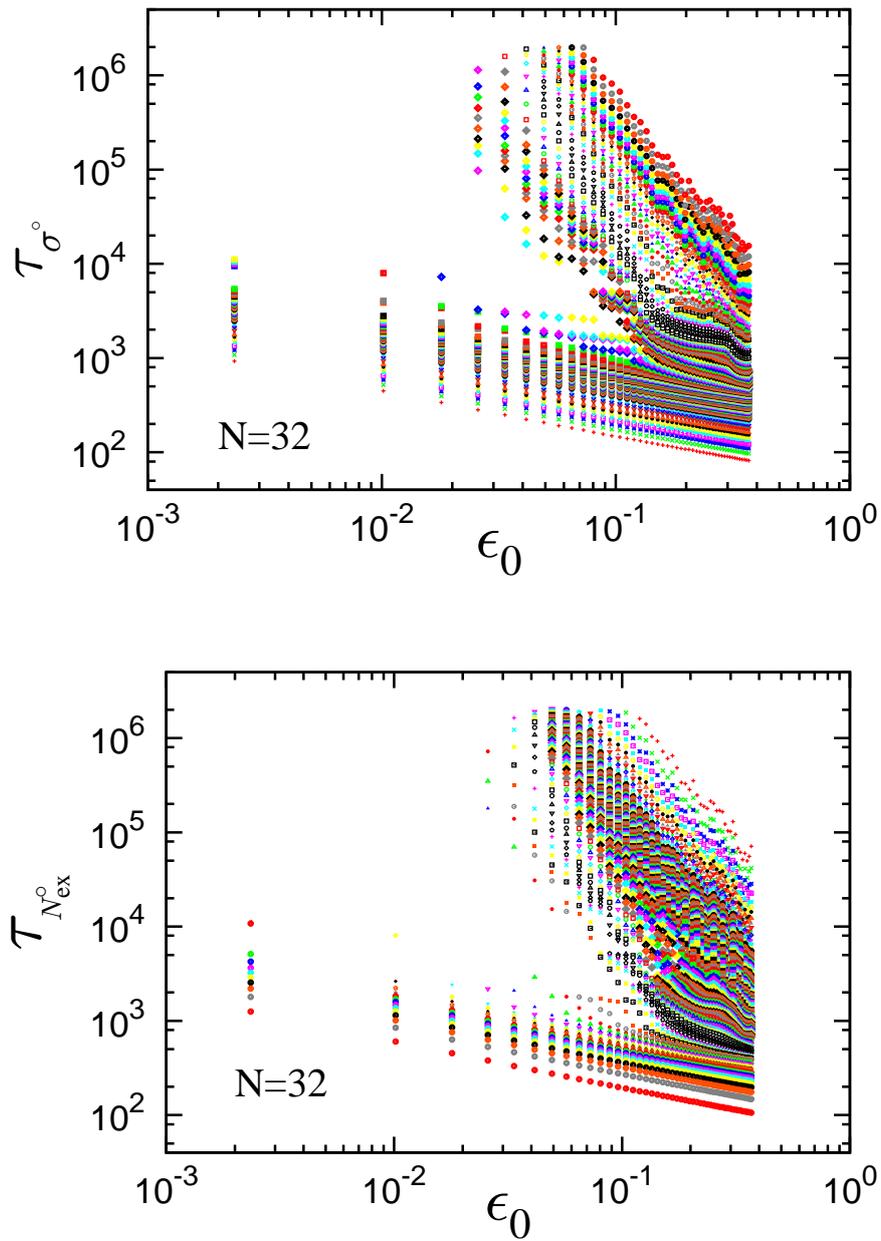


図 5.9: 緩和時間 τ_σ および $\tau_{N_{\text{ex}}}^\sigma$ のエネルギー密度 ϵ_0 依存性。システムサイズは $N = 32$ 。結果は励起位相 γ が異なる 10 本の軌道を平均したものを示した。異なるプロットシンボルは緩和判定レベル σ° , N_{ex}° の違いを表している。図よりデータ系列が 2 つに分離している様子が確認できる。ひとつは ϵ_0 に関してベキ則をもつ系列で、もう一方はこのベキ則から分離する、より遅い緩和を表している。ベキ則は大きな σ° あるいは小さな N_{ex}° で得られた系列で、これはすなわちプラトーに捕捉される以前のダイナミクスを表している。一方でベキ則から分離するデータ系列は小さな σ° あるいは大きな N_{ex}° で得られており、これは緩和後期の特性を捉えている。これらの 2 つの分離した系列の間に見られる緩和時間のギャップは、実質的にプラトーの持続時間に対応している。

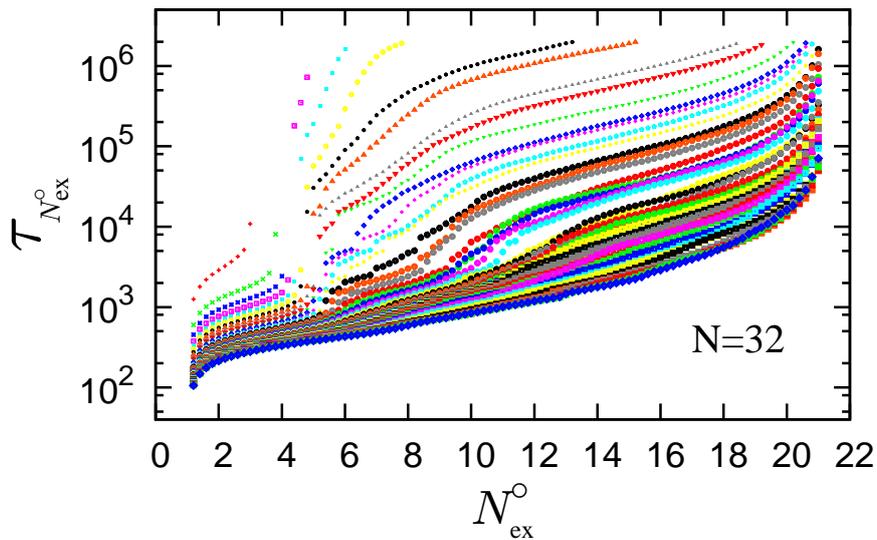
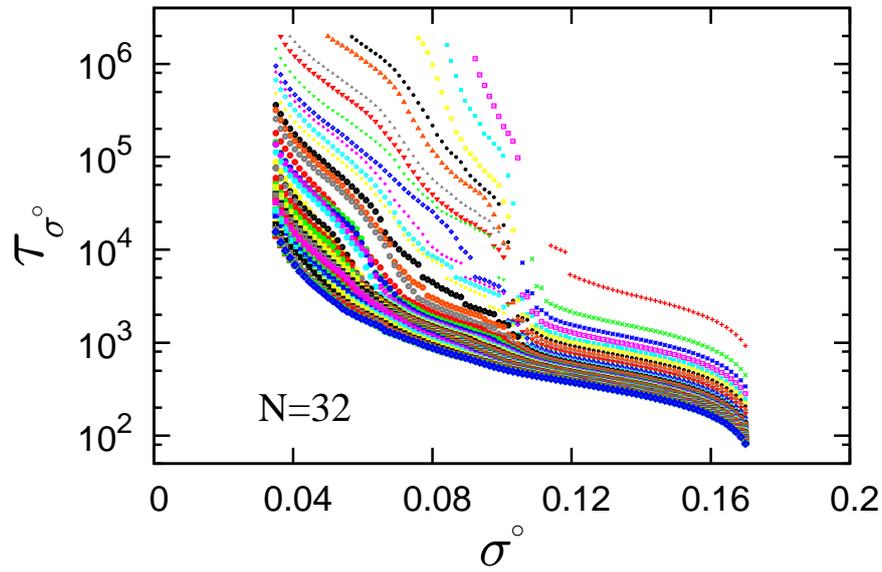


図 5.10: 緩和時間 $\tau_{\sigma^{\circ}}$ および $\tau_{N_{\text{ex}}^{\circ}}$ の緩和判定レベル σ° および N_{ex}° 依存性。データは図 5.9 のものと全く同一のものを用いている。異なるプロットシンボルはエネルギー密度 ϵ_0 の違いを表し、図の上部の系列は低い ϵ_0 において得られたもので、下部の系列は高い ϵ_0 によるものを表す。 ϵ_0 が低い場合には緩和時間にいくつかのギャップが見られ、これが階段状の構造を形成している。

5.5 励起時間のエネルギー密度依存性

これまで見てきた緩和時間 τ_o と $\tau_{N_{ex}}$ は粗視化された熱化の指標に対する緩和時間であった。ここで、各モードがエネルギーを獲得するために要する時間「モード励起時間 τ_k 」のエネルギー密度依存性に注目する。図 5.11 は横軸を ϵ_0 、縦軸を各モードの励起時間 τ_k とし、シンボルはモード番号の違いを表す。ある ϵ_0 を固定した場合、下から上に向けて時間発展があり、低エネルギーにおいてはモードエネルギーの輸送があるモード番号で長期的に停止し、その他のモードにエネルギーを漏らすまでにきわめて長い時間を要することが分かる。エネルギーを長期にわたって独占するようなモード群は先行研究において natural packet と呼ばれていたものに相当している。系はおおまかに見て、natural packet とそれ以外の tail modes に二分され、先行研究および前節で確認された二段階緩和と整合している。さらに詳しく観察すると、系はクリアに二分されているわけではなく、各モードの緩和時間には多様性が見られるなど、複雑な構造を持つ事が分かる。

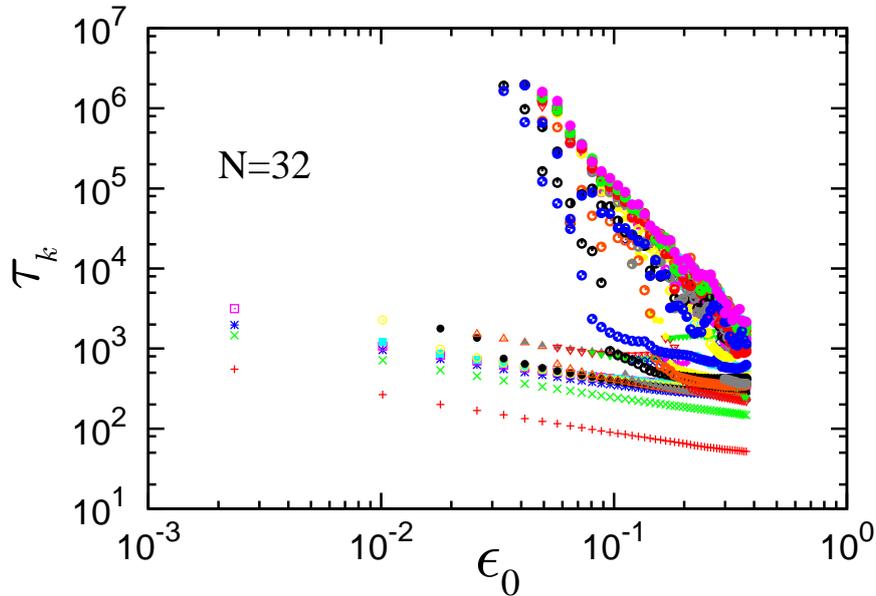


図 5.11: 各ノーマルモードの励起時間 τ_k のエネルギー密度 ϵ_0 依存性。異なるプロットシンボルはモード番号 k の違いを表す。結果は大まかに 2 つの異なるモードグループ、すなわち励起の速いモードと遅いモードが存在することを示している。前者のグループはベキ則 a/ϵ_0^b を持ち、後者はベキ則から離脱してさらに長い励起時間を持つ。これらの 2 系列の分離の様子は図 5.9 において見出されたガラス緩和的な二段階緩和とほぼ同じ傾向を持っている。しかし、この結果を詳細に観察することにより、各モードの励起時間が多様であることが確認できる。この励起時間の多様性は遅い多段階緩和の存在を示唆している。

5.6 有限自由度系での共通性

以上、2つの異なる緩和過程 (“gracefull relaxation” と “sticky relaxation”) の存在、さらに multistage relaxation が $N = 32$ の系で確認された。これが他の有限自由度系でも見られる共通の性質であるかを議論するため、 $N = 16, 12, 10$ に関して同様の解析を行った。

図5.12は緩和時間 τ_σ および $\tau_{N_{\text{ex}}}$ のエネルギー密度 ϵ_0 依存性を示している。 $N = 32$ の系と同様に、緩和特性が大まかに2つに分離している様子が確認できるだけでなく、 $N = 16$ の場合には、3つの緩和特性へ分離する様子が確認でき、multistage relaxation の存在が明確に示されている。また、異なる緩和特性間の乖離の大きさ、すなわちプラトーの持続時間はシステムサイズが小さくなるにつれて長くなることが分かる。図5.13に示した τ_σ の σ° 依存性および $\tau_{N_{\text{ex}}}$ の N_{ex}° 依存性に関しても、緩和過程を示す曲線が階段状の構造を形成している様子が見て取れる。図5.14は励起時間 τ_k の ϵ_0 依存性を示している。ここでもまた natural packet phenomena を捉える事ができる。以上の事実から、graceful relaxation と sticky relaxation の分離、natural packet phenomena の存在、multi-stage relaxation の存在が有限系において共通の性質であることが示唆される。

5.7 遅い緩和のダイナミクス - 4つの動力学相

これまで見てきたように、FPU 模型は multistage slow relaxation を示す事が分かった。次に、この遅いダイナミクスを特徴付けるために、「粗視化された緩和指標」と「微視的状态の不安定性」、すなわちノーマルモードエネルギー、 σ 、 N_{ex} などの種々の粗視化量と相空間の軌道がもつ不安定性（双曲性）を対応させる。「相空間での軌道が履歴が、どのように緩和の遅さと結びつくのか？」という問いを念頭に置きつつ、緩和過程を特徴付け、その理解様式を提案することが本章の中心的な目的となる。

5.7.1 Kolmogorov-Sinai エントロピー

図5.15に有限自由度系 ($N = 10, 12, 16, 32$) における σ の時間発展を示す。ただしこれらは初期励起位相が $\gamma = 0.5$ となるようなただ1本の軌道による計算である。これらの軌道を reference orbit とした相空間の運動方程式を直接解くことで Lyapunov 解析を行い、Kolmogorov-Sinai エントロピー (KS エントロピー) を得た。図5.16は図5.15の軌道に対する KS エントロピーの時間的収束の様子を示している。図5.16のシンボルの違いは、エネルギー密度 ϵ_0 の違いを表し、 ϵ_0 が低い順に、下から上にプロットされている。黒の直線は、理想的な周期運動に対して見られる $1/t$ 型のベキ減衰をあらわしている。低い ϵ_0 領域においては、軌道が $1/t$ に沿って周期様運動をしている。一方、 ϵ_0 が増加すると KS エントロピーは $1/t$ 型の減衰に沿って運動したのち、分岐し、不安定性を獲得する様子が確認できる。軌道が周期的に振る舞う時間は、エネルギー密度 ϵ_0 が低くなるにつれて急激に長くなる事が分かる。

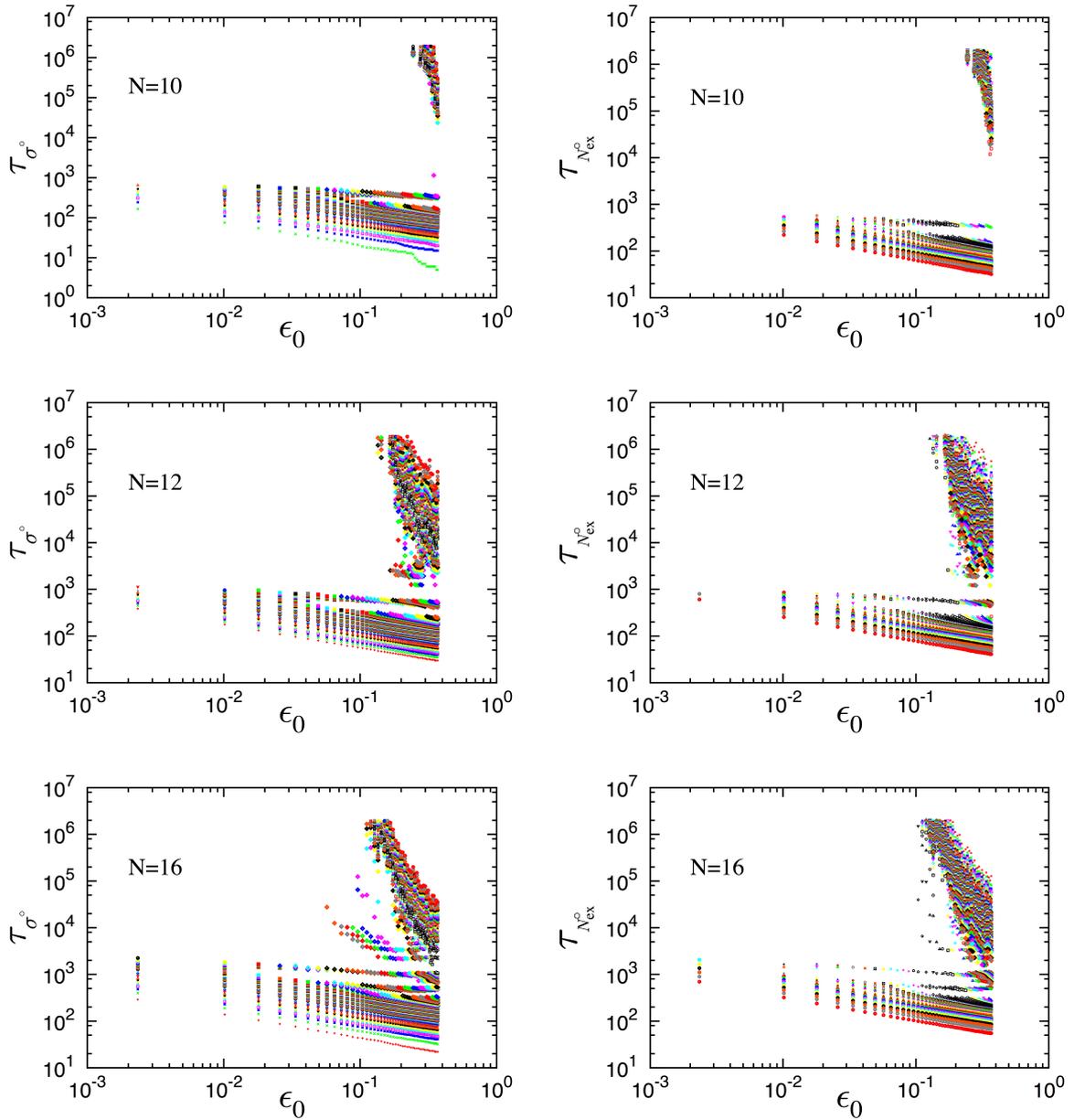


図 5.12: 有限自由度 ($N = 10, 12, 16$) における緩和時間 τ_{σ^o} および $\tau_{N^o_{N^{\text{ex}}}}$ のエネルギー密度 ϵ_0 依存性。 $N = 32$ の場合と同様に緩和過程の分離が見られる。これらの結果は大まかに二段階の緩和があることを示している。また、 $N = 16$ に対する τ_{σ^o} の結果は顕著に緩和の多段階性を捉えている。多段階緩和は図 5.13 と図 5.14 においてよりクリアに捉えられている。

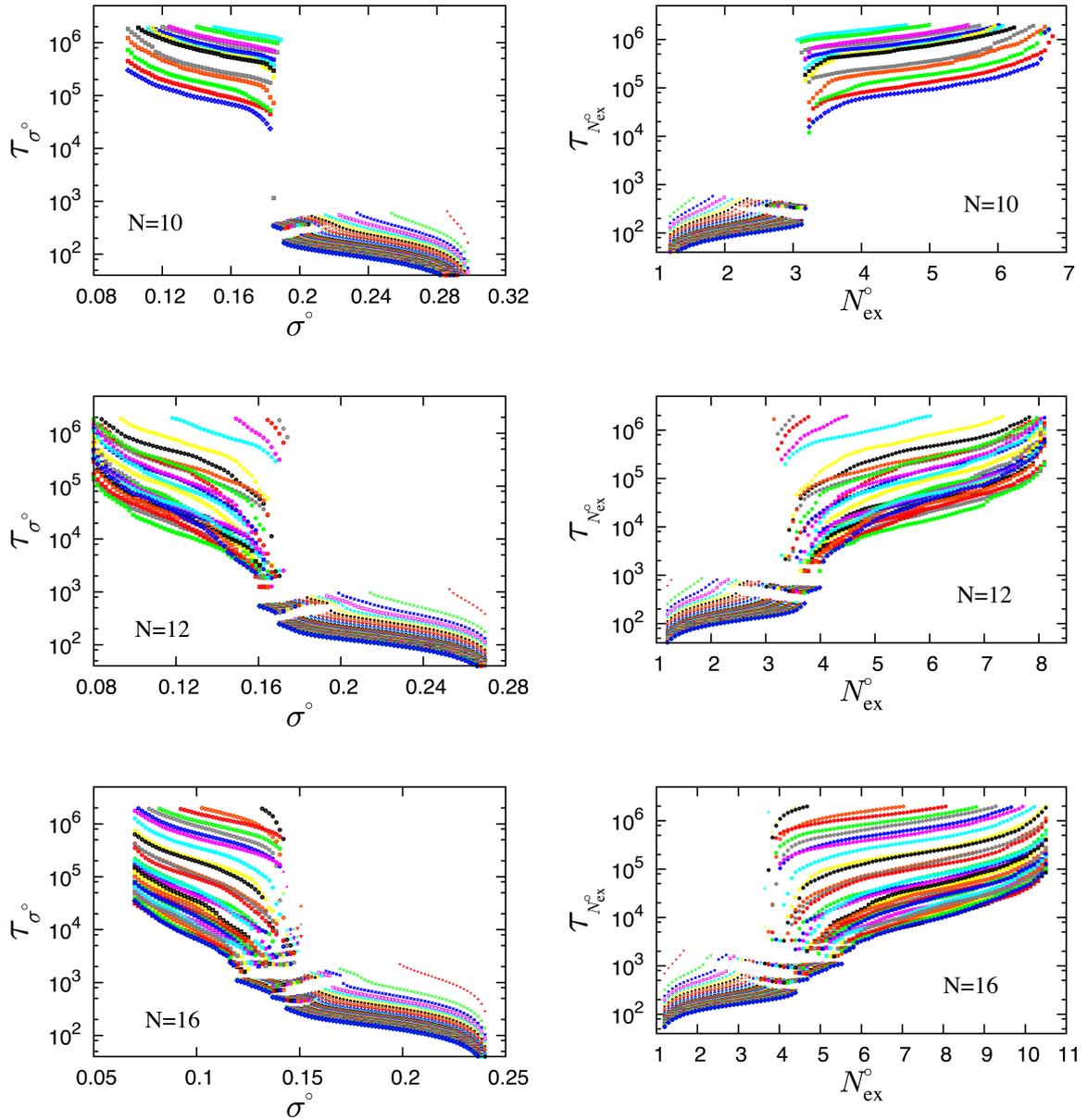


図 5.13: 有限自由度 ($N = 10, 12, 16$) における緩和時間 τ_{σ° および $\tau_{N_{\text{ex}}^\circ}$ の緩和判定レベル σ° および N_{ex}° 依存性。異なるプロットシンボルはエネルギー密度 ϵ_0 の違いを表しており，図中の上部の系列は低い ϵ_0 によるもの，下部の系列は高い ϵ_0 によるものを表す。緩和曲線は階段状の構造を呈し，遅い多段階緩和の存在を示唆している。

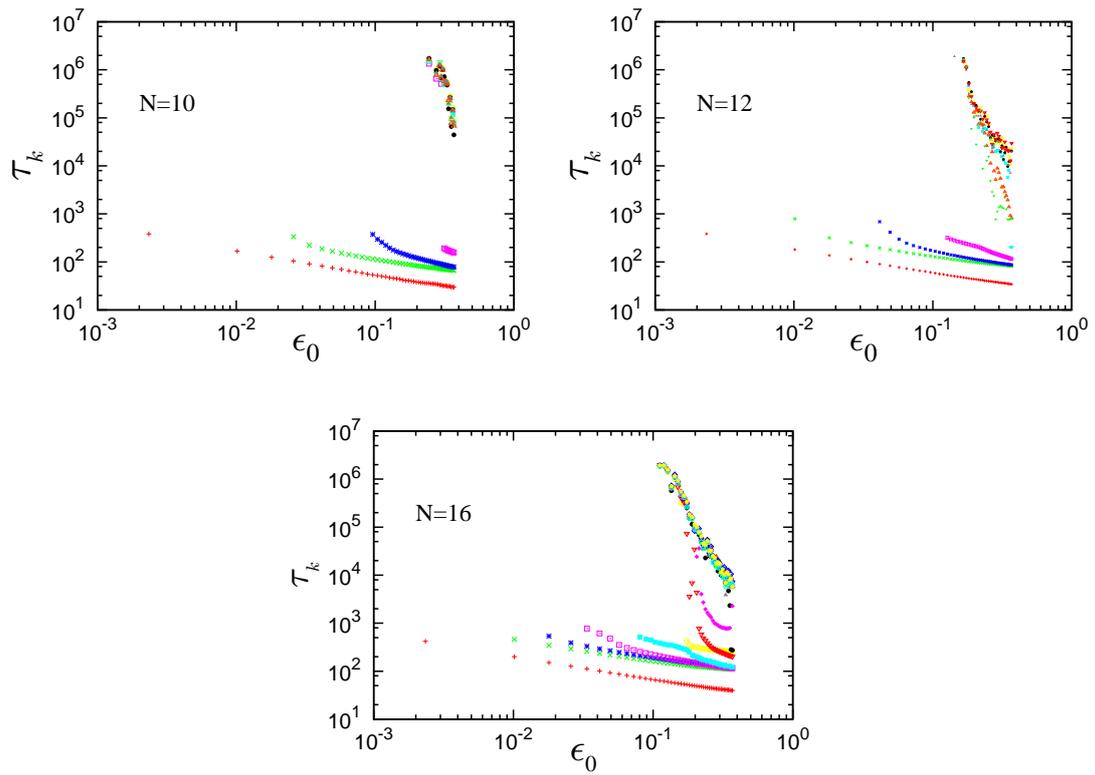


図 5.14: 有限自由度 ($N = 10, 12, 16$) における各モードの励起時間 τ_k のエネルギー密度 ϵ_0 依存性。励起時間にはモードごとに個性があることが分かる。励起時間の多様性は緩和に多段階性が伴うことを示唆している。

ここで、より詳細に粗視化量 σ と KS エントロピーを比較することで、遅い緩和過程と相空間における軌道の遍歴過程を結びつける。図 5.17(a) は、 $N = 32, E_0 = 1.825, \epsilon_0 = 5.703 \times 10^{-2}, \gamma = 0.5$ における $\sigma(t)$ と $\overline{N_{\text{ex}}}(t)$ の挙動を示したものである。青の領域は緩和過程で最初に形成される「第一プラトー」を表し、赤の領域は長時間に渡るゆるやかな緩和の遂行（スロープ）を表す（これは実質的に「第二プラトー」と呼んで差し支えない）。すなわちこの場合、系は明らかに multistage relaxation を示している。図 5.17(b) は、KS エントロピーの時間的収束の様子を表したものである。図中の青領域と赤領域はパネル (a) で「第一プラトー」および「第二プラトー」が観測される時間領域と対応している。KS エントロピーの挙動によれば、系には 4 つの動力学相が存在することが分かる：

phase I (緑)： $1/t$ 型の減衰に沿った準周期的運動が観測される。この動力学相は系が第一プラトーに捕捉される前の運動に対応している。

phase II (青)： この時間領域では系は第一プラトーにあり緩和は一時中断される。phase I と同様に power law による KS エントロピーの減衰が見られるが、その傾きは $1/t$ 型の減衰よりも浅く、軌道が準周期軌道に引きずられるいわゆる「淀み運動 (stagnant motion)」をしつつ、ゆっくりと準周期運動から遠ざかっていることを示唆している。

phase III (赤)： この phase は、第一プラトー崩壊後の動力学相を表している。系は第一プラトーを離脱するも、その後きわめて長い時間に渡ってゆるやかな緩和（スロープ、第二プラトー）を経験することになる。このとき KS エントロピーは一時的にある値に収束し、ある一定の不安定性を獲得していることが分かる。この状態を「ローカル・カオス」と呼ぶことにする。この弱い不安定化によって軌道は準周期運動を離れて相空間内を訪問するようになると考えられる。しかしながら、依然として軌道の訪問領域は局所的なエリアに制限されており、その結果粗視化された緩和指標 σ はわずかに減少するに留まっている。

phase IV (紫)： phase II において一旦収束した KS エントロピーはこの動力学相で再び増加を始め、より強いカオスへと遷移している。この強いカオスは軌道が相空間のより広い領域を訪問することを手助けし、エネルギー等分配状態が達成されつつある。

このように、 σ の挙動、および KS エントロピーの時間的収束の様子から系の運動を 4 つの動力学相に分類することができる。そこで各 phase の性質をより詳細に抽出するため、Lyapunov スペクトル $\{\lambda_i\}$ 、モードエネルギー占有率 $\{\overline{\rho_k}\}$ 、モードエネルギー E_k のパワースペクトルを解析することにする。

5.7.2 Lyapunov スペクトル

図 5.18 は phase I, II, II, IV における Lyapunov スペクトルのスナップショットを示しており、横軸は i 、縦軸は第 i Lyapunov 指数 λ_i を表す。各動力学相における Lyapunov スペクトルの性質は次のようにまとめられる：

phase I : Lyapunov スペクトルの形状に階段状の構造が見られる。さらにその中にはほぼ等しい不安定性をもつ自由度が存在し、それらはいくつかのクラスターを形成している。(図 5.18(a) 参照。)

phase II : phase I と同様に、クラスター形成・階段上の構造が確認できる。系は、安定な自由度と不安定な自由度に二分されており、第 18 番目以降の Lyapunov 指数はきわめて小さい値 (ほとんどゼロ) を取る。(図 5.18(b) 参照。)

phase III : Lyapunov スペクトルの階段構造が破壊され、なめらかなスペクトルが形成される。(図 5.18(c) 参照。)

phase IV : 中間領域 ($i = 3 - 20$) の自由度の不安定性が最大 Lyapunov 指数 λ_1 の成長に引きずられるように時間発展とともに増大する。(図 5.18(d) 参照。□ → ■ → ○ → ● の順に時間発展を表す。)

5.7.3 モードエネルギー占有率 $\overline{\rho_k}$ のスペクトル

図 5.19 は、各 phase I, II, III, IV におけるモードエネルギー占有率 $\overline{\rho_k}$ のスペクトルを示す。横軸は $\overline{\rho_k}$ の大きさでソートされたモード番号を、縦軸は $\overline{\rho_k}$ を表す。各動力学相に対する $\overline{\rho_k}$ スペクトルの特性は次のようにまとめられる：

phase I : 図 5.19(a) のシンボルは、下部から上部に向けて時間発展を表す。運動初期段階では系の半分 ($N/2$) の自由度が支配的にエネルギーを占有し、その支配層内には指数関数的な序列が確認できる。時間発展とともにすばやくエネルギーはより広い波数空間に輸送される。この動力学相の最終段階では 4-8 番目のモードに局所的等分配が成立するモードパッケージが形成されている。

phase II : ノーマルモードは、内部で部分的に等分配が成立するようないくつかの等分配パッケージに別れ、クラスター構造を持つようになる。時間発展とともに tail modes がいくつかの等分配パッケージを保ちながら徐々に成長する。このとき、支配的なモード群 (1st-5th モード) とそれらに追従するモード群 (6th-13th モード) は安定に保持されている。(図 5.19(b) 参照。□ → ■ → ○ の順に時間発展を表している。)

phase III : 支配的なモード群と、それに追従するモード群 (1st-8th) は依然として保持されつつ tail modes が着々とエネルギーを獲得する。(図 5.19(c) 参照。□ → ■ → ○ → ● → △ の順に時間発展を表している。)

phase IV : 最終的に phase II および III と同様に、支配層と追従層は保持され、tail modes が顕著にエネルギーを獲得し成長し、等分配状態へと移行する。(図 5.19(d) 参照。□ → ■ → ○ → ● → △ → ▲ の順に時間発展を表している。)

5.7.4 モードエネルギー $E_k(t)$ のパワースペクトル

ダイナミクスがどの程度確率過程を模倣しているかを考察するため、ノーマルモードエネルギー E_k のパワースペクトルを解析することにする。図 5.20 に phase I&II, III, IV のそれぞれに対するパワースペクトルを示した。いずれも横軸は振動数、縦軸はスペクトル密度を表す。また黒の実線は、力学が Markov 過程を模倣してランダムに振る舞う場合に見られる、高周波数領域での挙動（すなわち Lorentzian が高周波数領域において示す傾き-2 の power law）を表している。各動力学相におけるパワースペクトルは以下のような性質をもつ：

phase I&II：パワースペクトルはピーク構造をもち、系が周期性を伴っていることを示唆している。この結果は KS エントロピーが $1/t$ 型のベキ減衰をしていた結果と整合している。

phase III：この相においてはパワースペクトルは複雑な構造をもつ。低周波数領域 ($f = 10^{-5} - 10^{-4}$) ではホワイトノイズが現れ、高周波数領域では準周期的スペクトルと f^{-2} の power law の混合スペクトルが見られる。

phase IV：この動力学相では、KS エントロピーの成長が見られる比較的強いカオス領域であるが、ノイズは Lorentzian を示していない。すなわちカオス的で等分配状態が成立するようなダイナミクスにもかかわらず非熱的ゆらぎが存在することから、系には依然として力学的決定性が残存し、力学が Markov 過程を完全には模倣していないと推測できる。また、Lyapunov 指数の成長と、非熱的ゆらぎが共存している状況は、相空間内にいくつかの異なるローカル・カオス領域が存在するという Giorgilli らの指摘 [GPP05] のひとつの側面を捉えている。相空間はフル・カオスではないが、軌道はいくつかの限定されたカオス領域を長い時間をかけて巡っており、それゆえ相関が消えず未発達な統計性を帯びることで遅い緩和を示すと考えられる。

5.8 緩和障害構造の“ロバストネス”

FPU 模型の遅い多段階緩和は σ もしくは $\overline{N_{\text{ex}}}$ の時間発展上にプラトーとして現れる。このプラトーの形成は FPU 模型の緩和過程として“本質的”な遅延なのだろうか？ここで言う「本質的」であるとは、FPU 系の相空間の中で measurable であることを指す。本節では、遅い多段階緩和・プラトーの形成が相空間の中で稀な現象ではなく、有限の遭遇頻度を持つような一般性のある現象であるかという問題を考える。

そこで我々は、「プラトーが微視的状态の操作というある種の摂動に対してロバストに存在しうるか」という問題に着目する。いま、ある軌道の時間発展上に形成されたプラトーを捉え、そのプラトー上で実現しているモードエネルギー占有率のスペクトル $\overline{\rho_{k(\text{plt})}}$ を摘出し、それ保持したまま、微視的状态 (\mathbf{p}, \mathbf{q}) に操作を加えて、再びダイナミクスを発展させる（この操作の概念図を図 5.21 に示した）。すなわち、マ

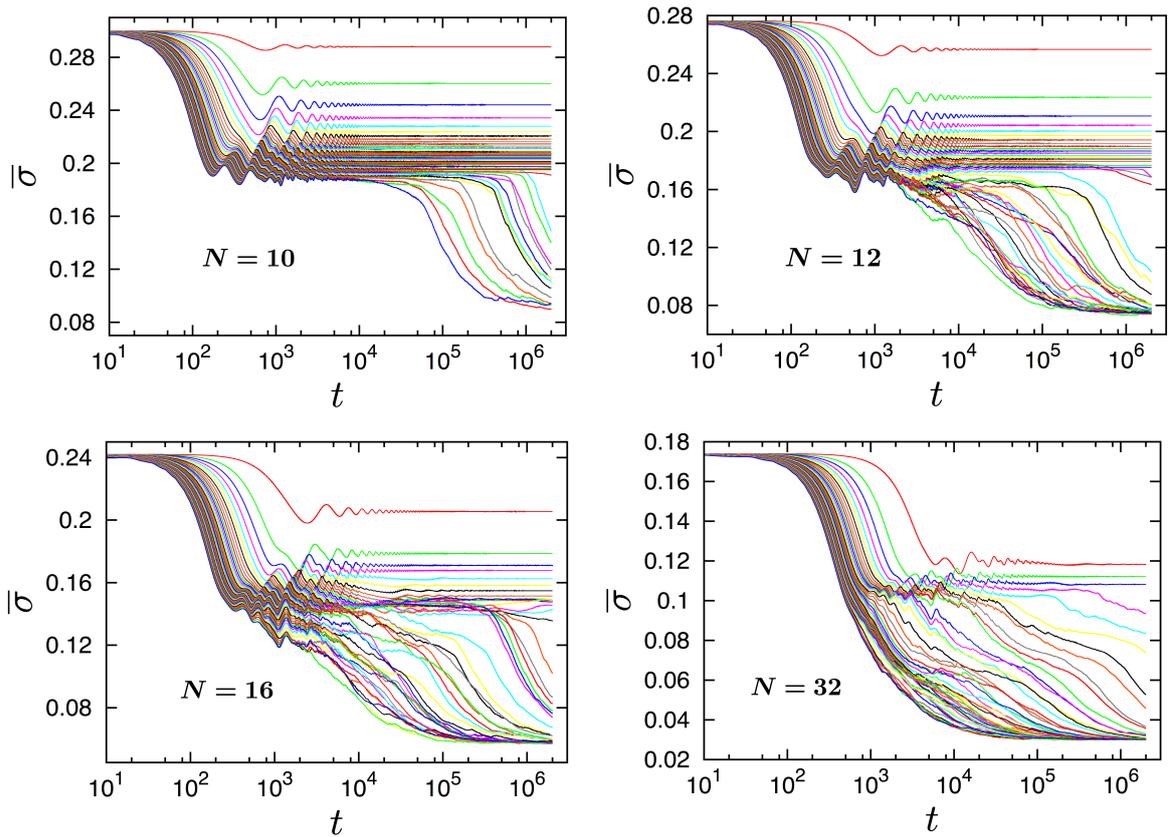


図 5.15: 有限自由度 ($N = 10, 12, 16, 32$) における σ の時間発展。励起位相は $\gamma = 0.5$ 。エネルギー密度 ϵ_0 の範囲は $\epsilon_0 = 2.344 \times 10^{-3}, \dots, 3.695 \times 10^{-1}$ で、図中の上部は低 ϵ_0 、下部は高 ϵ_0 を表している。緩和過程にプラトーが形成されて緩和が長時間停滞する様子が確認できる。

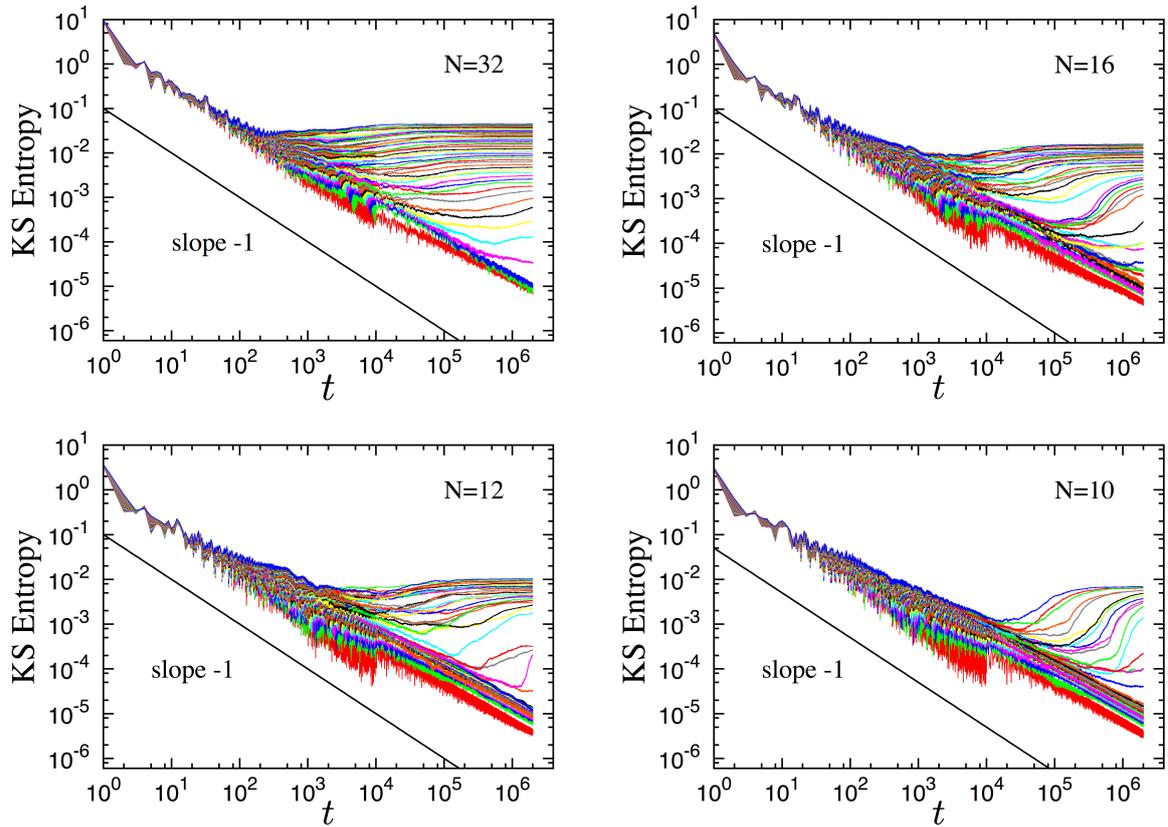
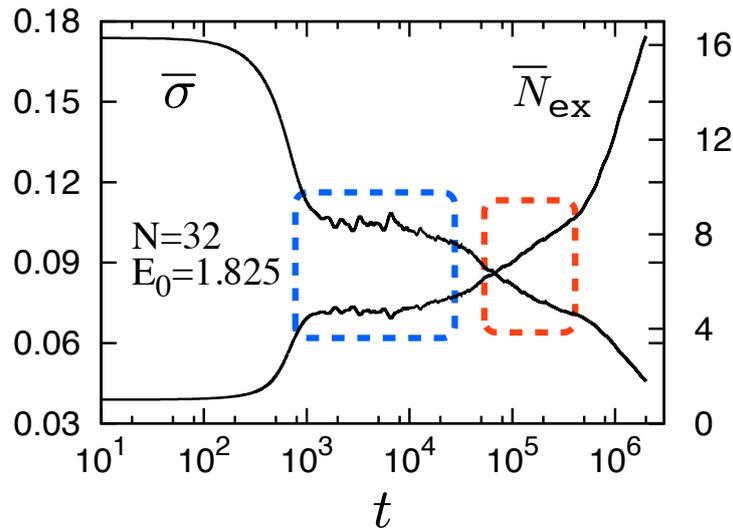
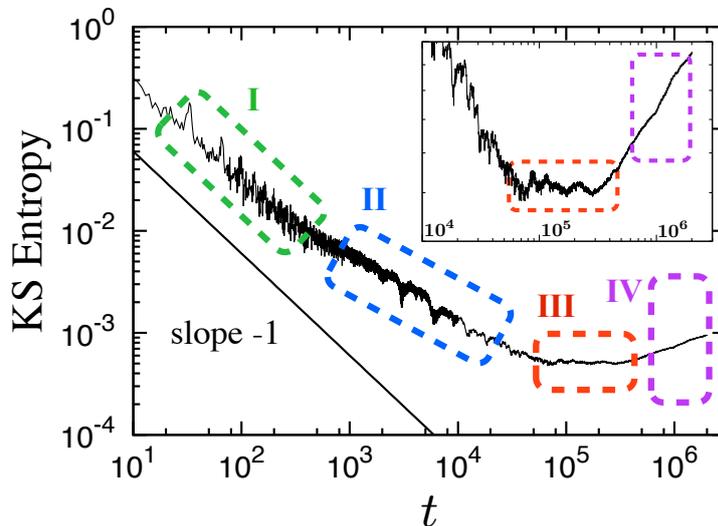


図 5.16: 図 5.15 で示した軌道に対応する Kolmogorov-Sinai エントロピーの時間的収束の様子。システムサイズは $N = 10, 12, 16, 32$, プロットシンボルの違いはエネルギー密度 ϵ_0 の違いを表し, ϵ_0 の範囲は $\epsilon_0 = 2.344 \times 10^{-3}, \dots, 3.695 \times 10^{-1}$ 。シンボルは図 Fig.5.15 と共通のものを使用している。図の上部のデータは高い ϵ_0 における結果, 下部のデータは低い ϵ_0 における結果を表す。黒の実線は $\propto 1/t$ の減衰を示している。Kolmogorov-Sinai エントロピーが $\propto 1/t$ で減衰することは, 対応する軌道が周期運動であることを意味する。低い ϵ_0 では軌道はほぼ周期解として振る舞っているが, 一方, 高い ϵ_0 では軌道は周期運動から離脱しカオス性を獲得している様子が確認できる。



(a) 粗視化された緩和指標の時間発展



(b) 軌道の不安定性を表す KS エントロピーの時間的収束の様子

図 5.17: 粗視化された緩和指標と軌道の不安定性の対応。(a) は $\bar{\sigma}, \bar{N}_{ex}$ の時間発展, と (b) Kolmogorov-Sinai エントロピーの時間的収束の様子。システムサイズは $N = 32$ で, 励起エネルギー密度 $E_0 = 1.825$ ($\epsilon_0 = 5.703 \times 10^{-2}$), 励起位相が $\gamma = 0.5$ である軌道に関して計算されたもの。青の領域はこのダイナミクスにおける主要なプラトーでが形成されている領域で, 赤の領域は緩和指標の遅い成長が観測される領域を表す。この2つの構造は系のスムーズな緩和を阻害するものとなっている。このような軌道における Kolmogorov-Sinai エントロピーの収束過程 (b) から, 4つの力学過程が存在することが分かる。(phase I, 緑): KS エントロピーは $\propto 1/t$ 型の減衰を示し, 系は周期解として振る舞う。(phase II, 青): KS エントロピーが $\propto 1/t$ よりも浅い傾きでべき的に減衰し, 周期軌道から徐々に離脱する運動, すなわち「淀み運動」が見られる。(phase III, 赤): KS エントロピーが一時的に収束し, 運動が「ローカルなカオス」であることを示唆している。(phase IV, 紫): KS エントロピーの値が顕著に成長する領域。比較的強いカオスが発生しエネルギー等分配がほぼ達成されつつある。

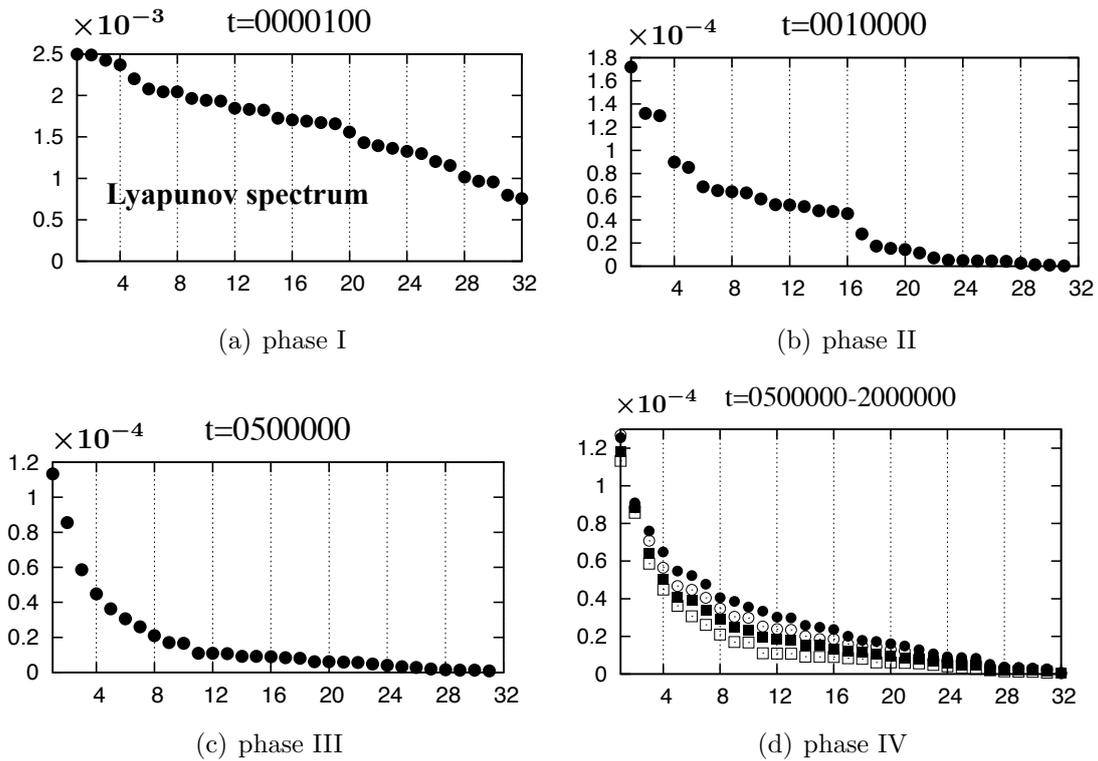


図 5.18: 各力学過程における Lyapunov スペクトル。横軸は i , 縦軸は λ_i を表す。

クロにはまったく同じスペクトルを持ちつつも、異なる微視的状态を初期点とする軌道たちのダイナミクスを観察することを考える。仮に、微視的状态を操作された軌道がプラトーを経由しないシンプルな緩和過程を辿った場合、これまで見てきたような特異な緩和特性は相空間内でレアな現象である可能性がある。一方で、微視的状态を変更しているにも関わらず依然としてプラトーの形成や遅い緩和が見られるのであれば、相空間内に「広く」そのような現象があることの傍証となるだろう。

いま、ある軌道の時間発展上にプラトーが形成されていたとし、この軌道を「オリジナル軌道」と呼ぶことにする。この「オリジナル軌道」が経験するプラトー上でモードエネルギー占有率 $\bar{\rho}_k$ を取り出し、このスペクトルを $\bar{\rho}_{k(\text{plt})}$ とする。この $\bar{\rho}_{k(\text{plt})}$ の微視的状态 (\mathbf{p}, \mathbf{q}) を下記のプロトコルで操作し $(\tilde{\mathbf{p}}, \tilde{\mathbf{q}})$ に変更する。このと

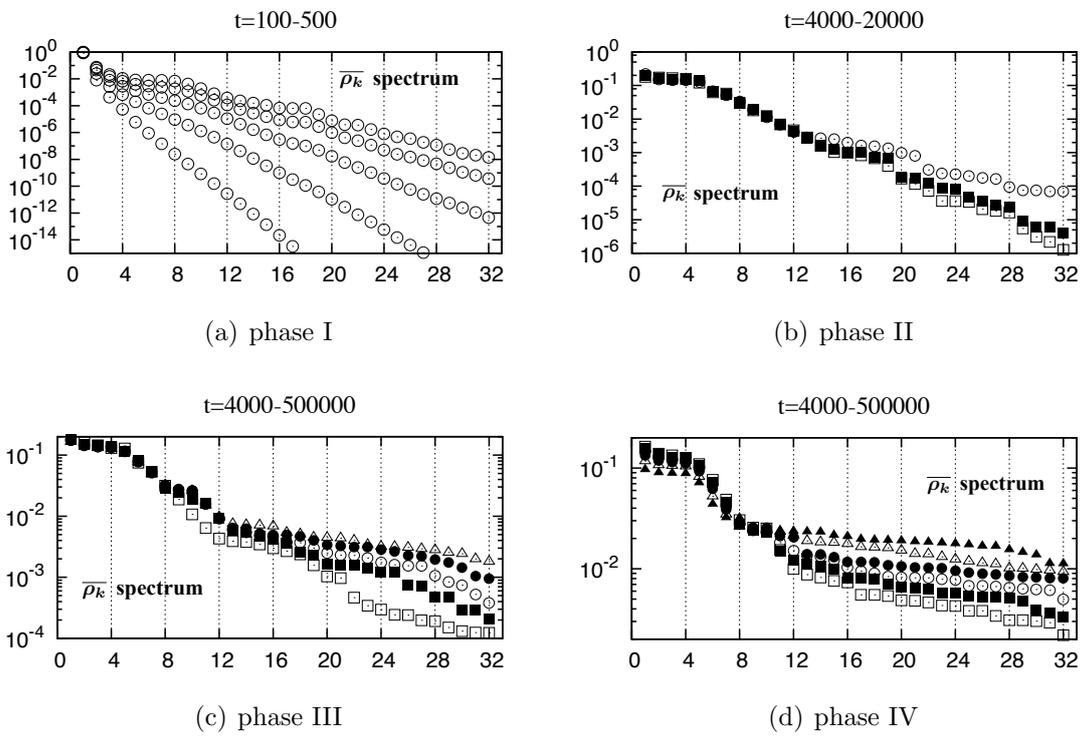


図 5.19: 各力学過程におけるノーマルモードエネルギー占有率のスペクトル。横軸がソートされたモード番号 k , 縦軸が $\bar{\rho}_k$ を表す。

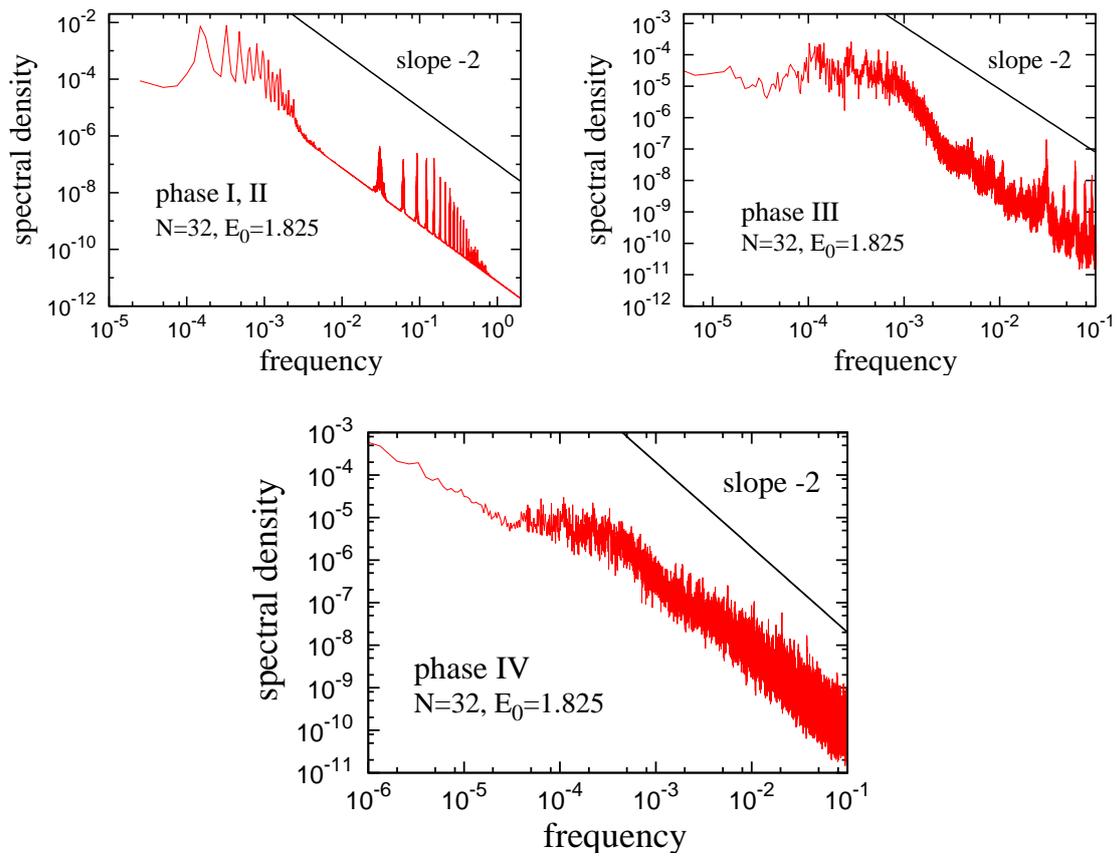


図 5.20: 各力学過程 (phase I&II, III, IV) におけるモードエネルギーのパワースペクトルの平均。横軸が周波数で縦軸がスペクトル密度。

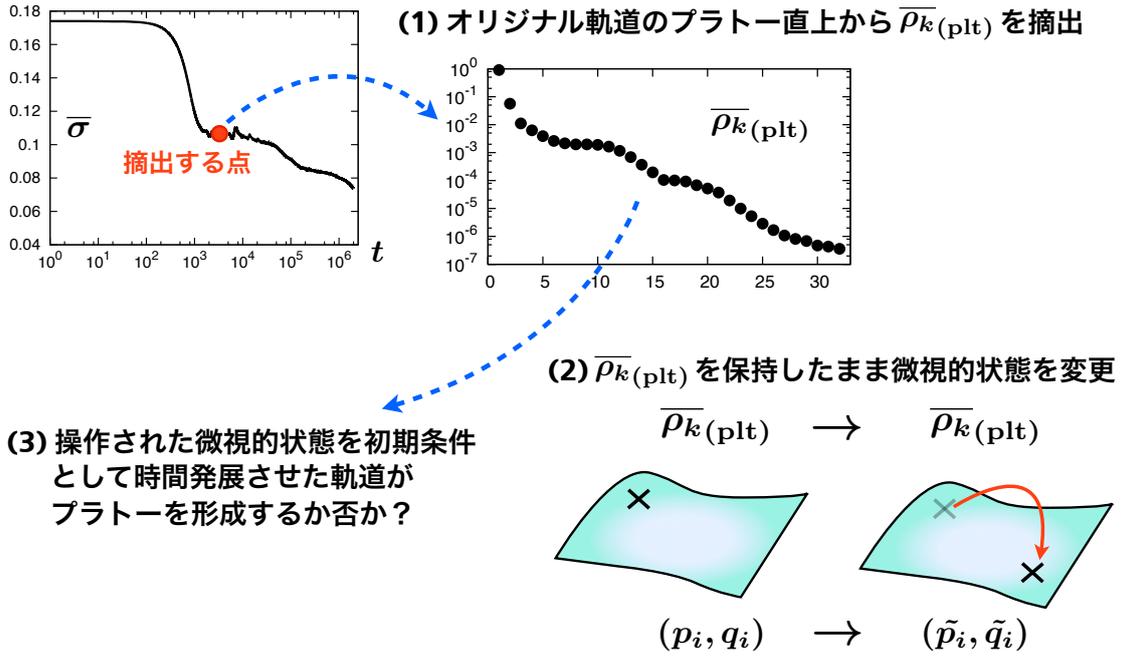


図 5.21: プラトーのロバストネスを考察するための「微視的状态の操作」方法。

きスペクトル $\bar{\rho}_k(\text{plt})$ は保持するものとする：

$$V_0 = \gamma E_0, \quad K_0 = E_0 - V_0.$$

$$V_k(0) = \bar{\rho}_k(\text{plt}) V_0 \zeta, \quad K_k(0) = \bar{\rho}_k(\text{plt}) K_0. \quad (5.4)$$

$$\tilde{Q}_k(0) = \pm \sqrt{\frac{2V_k}{m\omega_k^2}}, \quad \tilde{P}_k(0) = \pm \sqrt{2mK_k} \quad (k = 1, 2, \dots, N). \quad (5.5)$$

$$\tilde{q}_i(0) = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{k=1}^N \tilde{Q}_k(0) \sin \frac{ik\pi}{N+1},$$

$$\tilde{p}_i(0) = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{k=1}^N \tilde{P}_k(0) \sin \frac{ik\pi}{N+1} \quad (i = 1, 2, \dots, N). \quad (5.6)$$

ここで、 γ はポテンシャルパートと運動エネルギーパートへのエネルギー分配比率を表す。 ζ は k に依存しない定数で、(5.6) を系のハミルトニアン (4.1) に代入することで得られるポテンシャルエネルギーが V_0 となるように調整されるものとする。また、(5.5) の符号は等確率でランダムに選択する。上記のプロトコルで生成された「操作された微視的状态」 (\tilde{p}, \tilde{q}) を初期点として走る軌道を「操作軌道」と呼ぶこととする。このように、同じマクロなスペクトル $\bar{\rho}_k(\text{plt})$ をもち、微視的状态が異なる2つの軌道：「オリジナル軌道」と「操作軌道」の違いを観察する。

図 5.22 に、 $N = 16$, $E_0 = 0.5375$, $\epsilon_0 = 3.359 \times 10^{-2}$ に関する結果を示す。パネル (a) は「オリジナル軌道」がプラトーを形成している様子を示している。図中の赤でマーキングされた時刻 ($t = 2 \times 10^4$) からスペクトル $\bar{\rho}_k(\text{plt})$ を抽出し、先の手順で微視的状态に操作を施し「操作軌道」を発展させた結果がパネル (b) となる。いくつか

の γ で計算を実行したところ、いずれの場合も緩和過程に「オリジナル軌道」と同様に安定的に持続するプラトーを形成している様子が確認された。それぞれの「操作軌道」を参照軌道とする Lyapunov 解析を行った結果をパネル (c) に示した。いずれも、Kolmogorov-Sinai エントロピーは $1/t$ 型の減衰を経た後、より浅い傾きをもつべき則で減衰していることから、これらが準周期運動および淀み運動であることが分かる。結果として、「オリジナル軌道」で形成されていたプラトーは、微視的状態の操作に対してロバストであることが結論された。すなわち、これまでの議論で取り上げた異常な緩和現象は FPU 模型の相空間でしばしば遭遇しうる現象であることを示唆している。

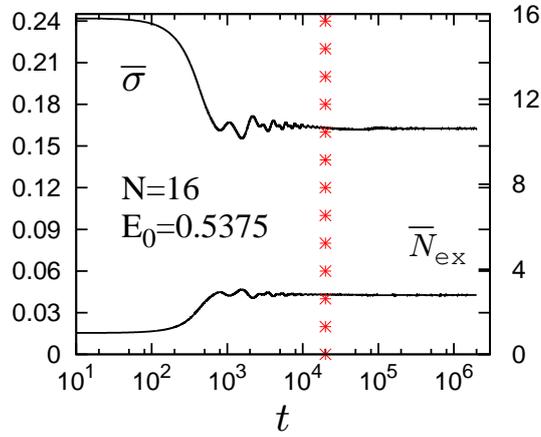
5.9 熱力学極限における異常緩和の消失と残存

本節では、熱力学極限における multistage slow relaxation を議論する。ここで「熱力学極限を取る」とは、エネルギー密度 $\epsilon_0 = E_0/N$ を有限に保ちつつ $N \rightarrow \infty$ とする操作を指す。FPU 模型をはじめとする大自由度ハミルトン力学系が示す非自明なダイナミクスを考究することを平衡統計力学の基本問題として位置づけるとき、熱力学極限に向けてその特異な挙動が残り続けるか、消失するかという問いかけはきわめて重要な意味を持つ。

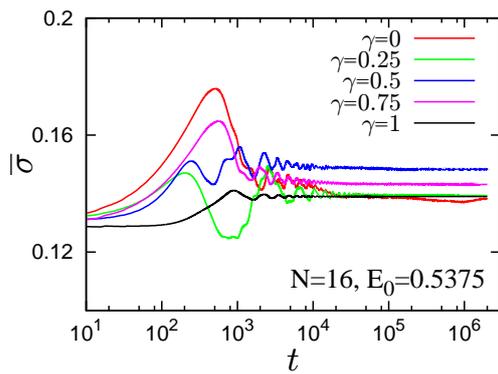
図 5.23 は $N = 64, 128, 256, 512$, $\gamma = 0.5$ における緩和時間 τ_σ° の ϵ_0 依存性を表す。初期条件にはこれまでと同様にエネルギーを最低周波数モードに集中させる方法 (4.8) を採用している。結果は、熱力学極限にむけて緩和時間のギャップ (すなわちプラトーの持続時間) が消失する傾向があり、最終的には緩和時間がべき則 $\tau = a/\epsilon_0^b$ (a, b は定数) に統合されてゆくと考えられる (graceful-sticky overlap)。この予想は Benettin らが [BP11] において与えた描像、すなわち FPU $_{\alpha\beta}$ 模型の熱力学極限で緩和時間が $T_{\text{eq}} \sim A\epsilon_0^c$ (A, c は定数) と表されるという指摘と整合している。

一方、各モードの励起時間 τ_k では事情が異なってくる。図 5.24 は $N = 64, 128, 256, 512$, $\gamma = 0.5$ におけるモード励起時間 τ_k の ϵ_0 依存性を示している。 τ_σ° の場合と異なり、緩和の遅さが熱力学極限に向けて生き残るように見える。この結果は先行研究 [BGG04][BGP04][PP05] と整合している。

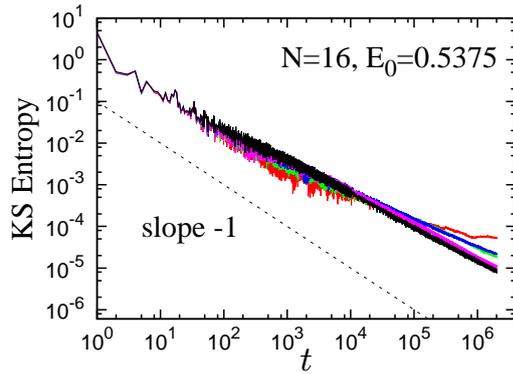
以上のように、熱力学極限での緩和特性に関しては、 τ_σ° と τ_k が相反する結果を示す。これらの矛盾する主張が共存していることについては次章で議論することとする。



(a) プラトーを形成するオリジナルの軌道



(b) 微視状態を“操作”された軌道



(c) Kolmogorov-Sinai エントロピーの時間的収束

図 5.22: 「微視的状态の操作」という摂動に対するプラトーのロバストネス。オリジナルの軌道で形成されるプラトーからモードエネルギー占有率のスペクトル $\bar{\rho}_{k(\text{plt})}$ を採取し、スペクトルを保持したまま微視的状态を操作して再び軌道を発展させた。(a) はオリジナルの軌道で、 $\bar{\rho}_{k(\text{plt})}$ を採取した箇所は時刻 $t = 2 \times 10^4$ ((a) の赤*)。 (b) は微視的状态を操作された軌道の時間発展。操作は異なる 5 パターンの励起位相で行われた。(c) は操作後の軌道に対する Kolmogorov-Sinai エントロピーの時間的収束の様子。結果として微視的状态を操作してもプラトーが消失することなく、プラトーが摂動に対してロバストであることを示唆している。これより、プラトーの形成は相空間上でありふれた現象であると考えられる。

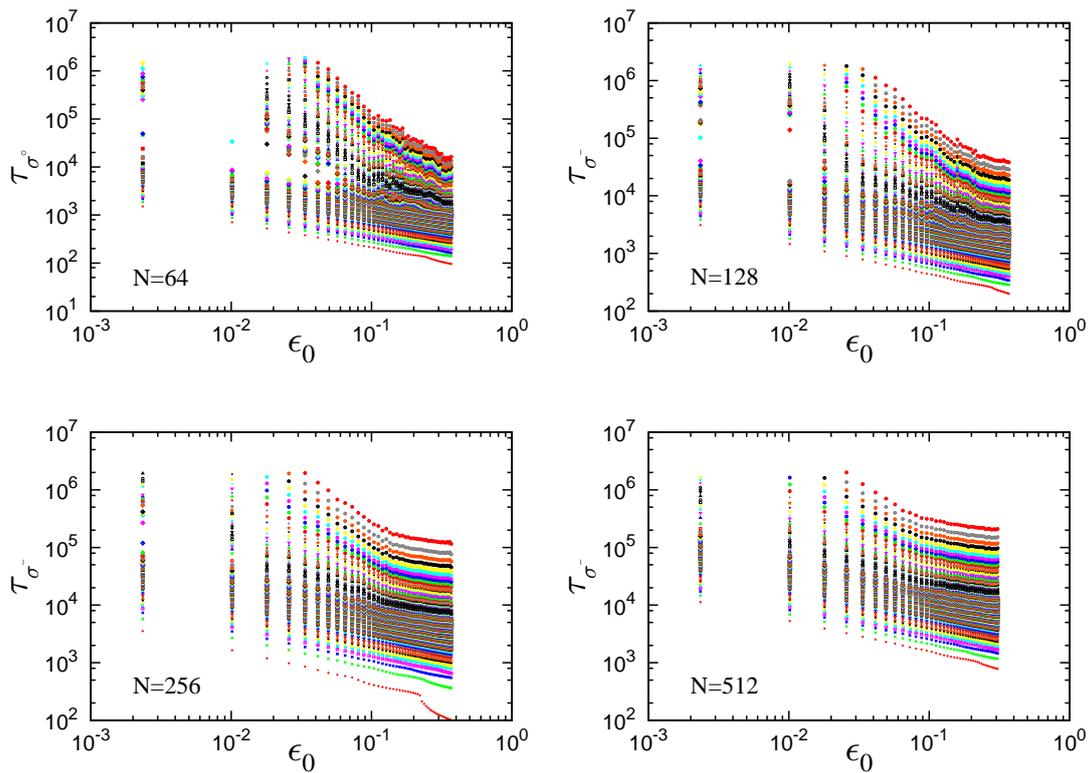


図 5.23: システムサイズが大きい場合の緩和時間 τ_σ のエネルギー密度 ϵ_0 依存性。異なるシンボルは緩和判定レベル σ の違いを表す。熱力学極限に向けて、二段階緩和が解消される現象 “graceful-sticky overlap” が見られ、緩和特性はベキ則 a/ϵ_0^b に統一されていく傾向がある。

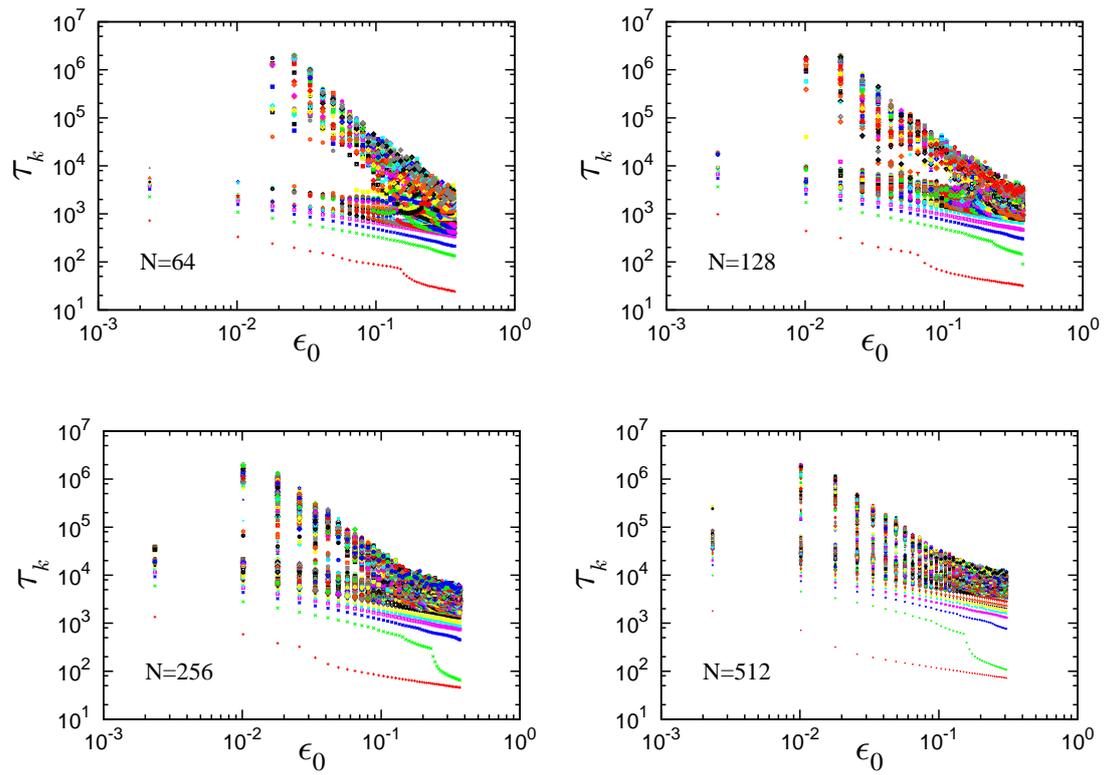


図 5.24: 各モードエネルギーの励起時間 τ_k のエネルギー密度 ϵ_0 依存性。異なるシンボルはモード番号 k の違いを表す。 τ_k の分岐の形状が熱力学極限においても保持されるように見える。

第6章 結果の要約と考察

本論文は、大自由度ハミルトン系である Fermi-Pasta-Ulam 模型の緩和ダイナミクスを、平衡統計力学の基本問題と位置づけて研究したものである。以下に示すのは、前章までに示された結果の要約と、そこにいくつかの議論を付加したものである。

6.1 異常緩和 - Multistage Slow Relaxation

緩和・熱化の指標として「エネルギー等分配状態からの距離」 σ (4.10) と N_{ex} (4.13) を導入し、その長時間平均 $\bar{\sigma}$ および $\overline{N_{\text{ex}}}$ の時間発展を観察した。我々の数値シミュレーションによれば、時間発展上に緩和の停滞状態（プラトー）が形成され、ガラス転移と酷似した二段階緩和（graceful relaxation, sticky relaxation）が確認された（図 5.2）。さらに詳細な観察によると、緩和過程は多段階性（multistage relaxation）を示すことが分かった（図 5.3）。multistage relaxation をクリアに捉えるために $\bar{\sigma}$, $\overline{N_{\text{ex}}}$ に関する緩和時間、および各ノーマルモードの励起時間 τ_k を計算し、それらの全エネルギー密度 $\epsilon_0 = E_0/N$ 依存性を得た。その結果、multistage relaxation の存在が明確に示された（図 5.9, 図 5.10, 図 5.11）。これは有限自由度系において一般に確認される挙動であった（図 5.12, 図 5.13, 図 5.14）。

6.2 4つの動力学相 - 軌道の遍歴過程

緩和時間のエネルギー密度依存性など、緩和の全体的な性質を議論するだけでなく、ダイナミクスの詳細に立ち入って相空間の軌道の遍歴過程と遅い緩和を対応させ、multistage relaxation を特徴付けることを試みた。そのためにまず、運動方程式で駆動される軌道を参照軌道として接空間方程式を並列的に解き、Lyapunov 解析をおこなった。Kolmogorov-Sinai エントロピー、Lyapunov スペクトル、モードエネルギー占有率の長時間平均に関するスペクトル、およびモードエネルギーの時間変化に対するパワースペクトルの対応関係から、FPU 模型の緩和過程には4つの動力学相が存在することが示唆された：

phase I “準周期運動” この動力学相は粗視化された緩和の指標 $\bar{\sigma}$ がプラトーを形成し始める前のダイナミクスに相当する（図 5.17(a) でプラトーが形成される以前のダイナミクス）。Kolmogorov-Sinai エントロピーは $1/t$ 型のべき的減衰を示し、系の運動が準周期的であること示している（図 5.17(b) の緑領域）。このときモードエネルギーのパワースペクトルはピーク構造をもつ（図 5.20(a)）。

Lyapunov スペクトルは階段状の構造を取り、ほぼ等しい不安定性をもついくつかの自由度がクラスターを形成する (図 5.18(a))。モードエネルギー占有率のスペクトルに関しては、支配層のモードから tail modes にかけて指数関数的差別がある。また、時間発展とともに部分的に等分配が成立しているような「等分配パケット」が形成される (図 5.19(a))。

phase II “淀み運動、準周期運動からのゆっくりとした離脱” この動力学相は、系の運動がプラトーに捕捉されて緩和が一時的に凍結した状態に対応する (図 5.17(a) の青領域)。KS エントロピーが $1/t$ よりも浅い傾きで減衰している (図 5.17(b) の青領域) ことから、系は依然として準周期軌道に引きずられた「淀み運動」をしつつ、徐々に準周期軌道から離脱していると考えられる。Lyapunov スペクトルは phase I と同様に階段状の構造をもち、さらに安定な自由度と不安定な自由度に分裂している。(図 5.18(b))。また、モードエネルギー占有率のスペクトルから、支配的なモード群とそれに追従するモード群が固定的に存続する一方で、tail modes はゆっくりと成長する様子が確認できる。このとき、ノーマルモードはいくつかの「等分配パケット」に分裂し、クラスター構造を取っている (図 5.19(b))。

phase III “ローカルなカオス” ここでは σ はプラトーを離脱しているものの、再び別の阻害構造にトラップされ、平衡状態へ向かう速度はきわめて遅い。この状態は長時間に渡って観測される (図 5.17(a) の赤領域)。これは実質的に“第二プラトー”と呼んで差し支えない。KS エントロピーは一時的にある値に収束し、軌道はある一定の不安定性を獲得しており (図 5.17(b) の赤領域)、この弱い不安定性を利用して軌道は準周期軌道から離れることができるが、依然として狭い領域に制限されたカオス運動であると考えられる。phase I および II の Lyapunov スペクトルに見られた階段状の構造はこの phase では破壊され、なめらかなスペクトルが形成される (図 5.18(c))。支配的モード群とそれに追従するモード群は引き続き安定的に存続し、その他の tail modes が成長する様子が見られる (図 5.19(c))。モードエネルギーのパワースペクトルは複雑な形状をもち、低周波数領域ではホワイトノイズが、高周波数領域ではベキ則と周期性の混合スペクトルが見られる (図 5.20(b))。

phase IV “より強いカオスと非熱的ゆらぎの共存” この動力学相ではエネルギー等分配状態に向けた成長が見られる (図 5.17(a) の $t = 5 \times 10^5$ 以降の運動)。KS エントロピーは phase III で形成された「第二プラトー」を離脱して成長し (図 5.17(b) の紫領域)、軌道はより強い双曲性を獲得して相空間内のより広い領域を巡るようになると考えられる。Lyapunov スペクトルに関しては中間領域の自由度が顕著に不安定性を増している様子が見られる (図 5.18(d))。各モードエネルギー占有率の時間発展は phase III と同様の挙動を示す (図 5.19(d))。また、この領域は KS エントロピーの顕著な成長が見られるにも関わらずモードエネルギーのパワースペクトルは Lorentzian を示さない (図 5.20(c))。すなわち、カオス的な運動の中に非熱的ゆらぎが存在し、力学は Merkov 過程を完

全に模倣しているとは言えない。これは、相空間内に “local chaotic regions” がいくつか存在し、それらの間を軌道が長時間行き来しているとする Giorgilli らの指摘 [GPP05] を想起させる。

6.3 熱力学極限 - 矛盾する2つの主張に関する考察

前節まで述べた通り、FPU 模型においては遅い多段階の緩和が存在する。本節ではこの遅い多段階緩和が熱力学極限においても残るかどうかを考察する。ここで、熱力学極限とはエネルギー密度 $\epsilon_0 = E_0/N$ を有限に保ったまま N を無限大とすることを意味する。

我々の数値シミュレーションによれば、緩和時間 τ_σ と各モードの励起時間 τ_k は熱力学極限において異なる性質を示すことが分かった。

前者の場合 (図 5.23), 熱力学極限においては遅い緩和が消滅し緩和特性はエネルギー密度 ϵ_0 の逆数に関してベキ則 $\tau = a/\epsilon_0^b$ (a, b は定数) に統合される傾向 (“graceful-sticky overlap”) を見せた。この結果は Benettin らが [BP11] において与えた描像, すなわち FPU $_{\alpha\beta}$ 模型の熱力学極限で緩和時間が $T_{\text{eq}} \sim A\epsilon_0^c$ (A, c は定数) と表されるという指摘と整合している。

一方, 後者の場合 (図 5.24) には, 遅い緩和 (より正確には各モードがエネルギーを獲得するのに必要な時間がモードごとに大きく異なり, 「速い緩和モード」と「遅い緩和モード」の分離がある状況) が熱力学極限においても見られることを示唆している。

異なる2つ指標が示す矛盾する主張を説明するために, 指標 τ_σ と τ_k が異なる物理的側面を捉えていることを強調しなければならない。前者は各モードの特徴を捨象して, 平均的な緩和特性を見る指標である一方, 後者は各モードがエネルギーを獲得する際の個性に着目し, それを積極的に捉えようとする指標である。さらに, 前者は緩和の判定レベルを複数設置することでその恣意性を排除して緩和の全体像を捉えるものであるが, 後者を計測する際には平衡状態の達成率が25%となる点を判定レベルとしている。すなわち τ_k が映し出すダイナミクスの特徴は運動の比較的初期段階のものであると言える。

図 5.24 を注意深く観察すると, システムサイズの増大とは無関係に, 励起が最も速いモードと励起が最も遅いモードの励起時間 τ_k の差は変化していない。熱力学極限に向けてシステムサイズが増大すると, 系を構成するモードの数も増大することで, ある振動子は自分の周波数に近い周波数をもつ「近隣のモード」にエネルギーを輸送しやすくなると考えられる¹。その結果, 各モード間のエネルギー交換は比較的速やかに遂行され, natural packet phenomena やそれに起因するプラトーの形成が σ においては検出されなくなる。 τ_k に関しては, N の増大とともに上記の機構でエネルギー輸送が起き, 最も遅いモードと速いモードの間のギャップが徐々に埋められてゆく様子を確認できる (図 5.24)。しかしながら, 速いモードと遅いモード

¹Boltzmann-Jeans conjecture の意味で

の差別化は常に残り続けていると見ることができ、この意味で、熱力学極限においても FPU 模型の遅い緩和が残存すると言える。

異なる物理量は熱力学極限での緩和特性に関して相反する結果をもたらしたが、これは決してアーティファクトではないことに注意したい。すなわち、 σ のように各自由度の特性を見ることをせず系全体の平均的性質を捉える量が重要である場合には、これまで見てきた multistage relaxation は顕在化せず、従来の平衡統計力学の守備範囲となるだろう。しかしながら、異なる自由度間の詳細なエネルギー輸送やその動的性質が重要になるような局面、すなわち化学反応や分子内エネルギー分配、タンパク質内のエネルギー輸送などにおいては、シンプルな統計性の仮定を超えた力学的視点にもとづく理解様式が必要となるだろう。

6.4 異常緩和は “measurable” か？

数値シミュレーションによって見られた multistage relaxation が FPU 模型の相空間内においてどれだけ一般的なイベントであるかを議論するため、プラトーのロバストネスについて考察した。ある軌道の時間発展上の形成されるプラトーからモードエネルギー占有率のスペクトルを抽出し、そのスペクトルを保持しつつ、微視的な状態（座標と運動量）だけに変更を加え、それを新たな初期条件として軌道を計算し、元の軌道との違いを観察した。仮に、プラトーがすぐさま破壊されスムーズな緩和が見られた場合には、プラトーの形成・遅い緩和過程が相空間内では稀な現象である可能性が考えられる。しかしながら、いくつかの微視的な状態の操作（ある種の摂動）に対して、プラトーはロバストに形成され、さらに Lyapunov 解析からその運動が準周期的であることが示された（図 5.22）。この事実から、プラトーの形成・遅い緩和過程、および周期的挙動は FPU 模型の相空間上においてはしばしば見られる一般的な現象であることが示唆された。

6.5 implicit な多谷構造

FPU 模型において見られる multistage slow relaxation はシンプルな統計性の仮定から離れた非平衡系の現象を理解するための重要な知見となる可能性がある。特に着目すべきは、その複雑な相空間遍歴過程にある。通常、タンパク質に代表される多自由度力学系の計算が行われる際には、多谷構造を伴う力場が用いられ、その軌道はさまざまな準安定状態を巡る。一方、本論文で取り上げた FPU 模型のポテンシャルは explicit には多谷構造を持たないにも関わらず、「ダイナミクスの結果として」あたかも多谷構造が存在しているかのような挙動を示す。すなわち implicit に多くの準安定状態が存在し、軌道はそれらを間を長い時間をかけながら訪問している描像が考えられる。[GPP05] や本研究の結果からも、「相空間内に局所カオス領域がいくつか存在し、軌道がそれらを訪問する」というシナリオが推測される。タンパク質のダイナミクス、ガラス転移、分子運動、化学反応など、対象のヘテロな性質によって模型を変えて議論をする方法論に対して、それとは逆に、シンプルで一

一般的な大自由度ハミルトン系²の「相空間遍歴」を明らかにするという文脈の中で、これらの非平衡現象を理解する様式を模索する試みは非常に興味深い課題である。

6.6 今後の展望 - エネルギー輸送ネットワーク

遅い多段階緩和が起きているとき「相空間では何がおきているか？」という点が本論文の主要な問題意識であった。このために我々は、粗視化された緩和指標と軌道不安定性 (Lyapunov スペクトル) を結びつけて議論した。一方、「波数空間で何がおきているか？」という問いもまた重要である。このために、我々はダイナミクスからモード間のエネルギー輸送ネットワークの様相を抽出し、緩和過程を「エネルギー輸送ネットワークの構造変化」として理解する試みを始めている。

モード間のエネルギーのやりとりを定義するため、モードエネルギー E_k の時間微分の積からモード間の相関を取る。いま $dE_j/dt \cdot dE_k/dt < 0$ である場合、モード j と k の間にエネルギー交換が行われたと定義する。 $dE_j/dt > 0, dE_k/dt < 0$ の場合にはモード k から j へエネルギーが輸送され、 $dE_j/dt < 0, dE_k/dt > 0$ の場合にはモード j から k へエネルギーが輸送されたと定義する (図 6.1, 図 6.2)。粗視化された緩和指標 $\overline{\sigma(t)}$ とエネルギー輸送ネットワークの例を図 6.3 に示した。

「エネルギー輸送ネットワークの構造変化」として緩和過程をとらえることができれば、例えば高分子内のエネルギー輸送現象、およびそれに伴う機能発現や、その他、自由度間エネルギー輸送が重要となる化学反応ダイナミクスに対して示唆を与える可能性がある。

² しかし、「どんな現象でも守備範囲にするようなシンプルな模型」で説明することは、「何も説明していない」ことと同じである。系のもつヘテロ性をどの程度捨象するかについてはその都度「見たいもの」に応じて決められるべきだろう。

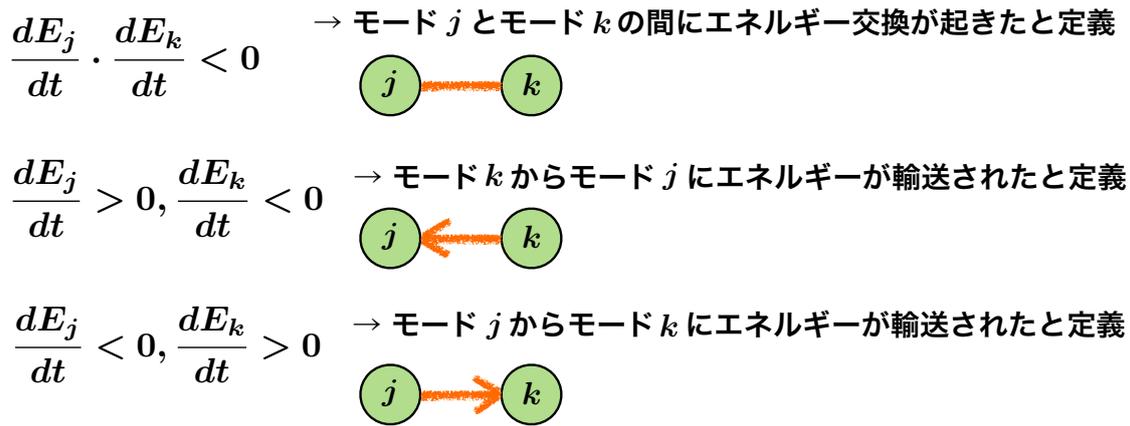


図 6.1: モードエネルギーの相関からエネルギーの輸送を定義する。

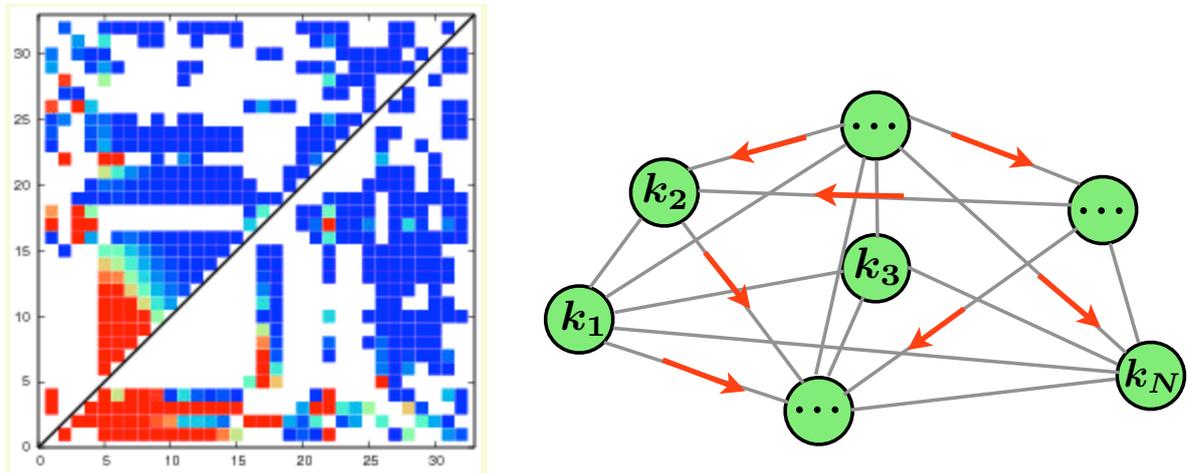


図 6.2: エネルギー輸送の様子からネットワークを抽出する。左図はモードエネルギーの時間微分の積 $dE_j/dt \cdot dE_k/dt$ の値を示した図で、横軸と縦軸はモード番号 k および j を表す。

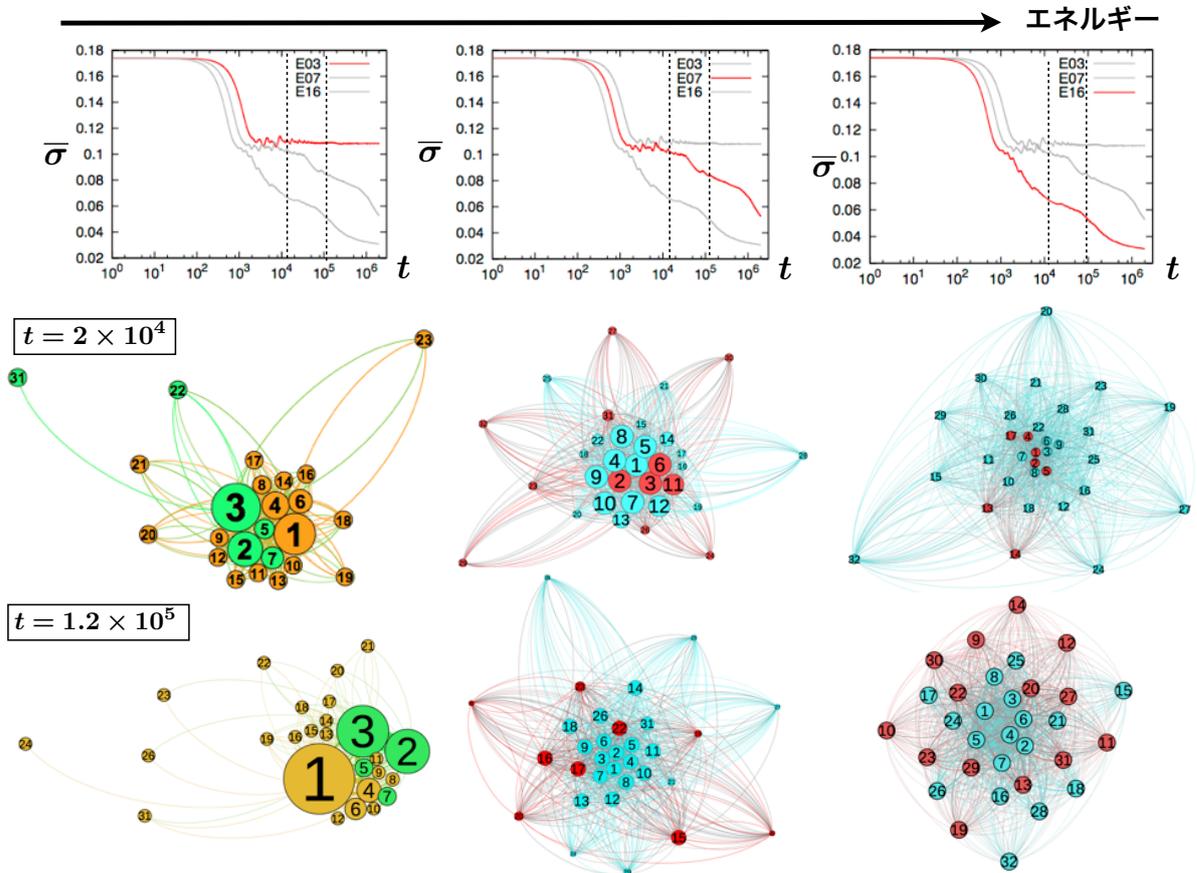


図 6.3: 粗視化された緩和指標 $\bar{\sigma}$ の時間発展とエネルギー輸送ネットワーク。上部に示したのは異なる 3 つの軌道のもとでの $\bar{\sigma}$ の時間発展で、左から順に右に向けてエネルギー密度が高くなっている。それぞれ、「プラトーが形成され計算の最終時刻までそれが保持されるもの」、「途中にプラトーがいくつか形成され多段階的に等分配状態に移行するもの」、「顕著なプラトーを伴わずに比較的スムーズに緩和が遂行されるもの」の例となっている。これらの図中に示された 2 本の破線は時刻 $t = 2 \times 10^4$ および $t = 1.2 \times 10^5$ を表している。この 2 つの時刻周辺でモードエネルギーの相関の平均値を求め、エネルギー輸送ネットワークを描画したものが下部二段の結果となる。各ノードに示された数字はモード番号を表し、そのサイズは媒介中心性、色はコミュニティを示している。緩和過程においてネットワークの構造変化が起きているように見えるが、これを系統的に処理することが現時点での課題となっている。なおネットワークの描画にはソフトウェア「Gephi」を用いた。

謝辞

本論文の結びにあたり、本研究を遂行するうえで実に多くの方々からご協力を賜ったことをここに深く感謝します。指導教官である小西哲郎教授からは博士課程3年間にわたって熱心なご指導をいただきました。宮崎州正教授からは、コロキウム等で毎回の確かなコメントをいただきました。池田研介教授（立命館大学）、清水寧教授（立命館大学）、戸田幹人准教授（奈良女子大学）、和田浩史准教授（立命館大学）、奥島輝昭博士（中部大学）、新山友暁博士（金沢大学）、山口義幸博士（京都大学）、後藤振一郎博士（ランカスター大学・分子科学研究所）、小川駿博士（京都大学）、永幡裕氏（北海道大学）、富士香奈氏（奈良女子大学）とは学会や研究会において刺激的な議論をさせていただきました。また、学生の自主性が最大限に保障されているR研の雰囲気³の中で、風通しの良い議論ができるメンバー（宮崎涼二博士、黒岩健博士、福田博也氏、尾澤岬氏、池田晴國氏、江口佳明氏、鬼塚健太氏、田辺光弘氏、伊賀裕展氏）に恵まれたことは大変喜ばしいことでした。さらに理学館5階界限を闊歩・徘徊するTB研、S研のユニークなメンバー（QG研脱藩浪人約1名を含む）との語らいの中で、時としてはっとする知見に出会うことができました。木村明洋博士（名古屋大学）、榮慶丈博士（名古屋大学）のお二方とは、「身近な異分野の研究者」としてたいへん貴重で有意義な議論をさせていただきました。

最後に本研究の遂行に際して手厚い援助をいただいた、名古屋大学博士課程教育リーディングプログラム・グリーン自然科学国際教育研究プログラム(IGER)に感謝いたします。

ここに改めて、皆々さまに深い感謝の意を表し、謝辞とさせていただきます。

³この点、小西教授・宮崎教授の尽力によるところがきわめて大きい。

付録 A 数値積分法の詳細

本論文においては Hamilton 方程式およびその変分によって得られる接空間方程式 (これ自身もまた Hamilton 系となる) の積分に 8 次のシンプレクティック法 (symplectic integration) を用いている。ここではその積分スキームについて述べる。シンプレクティック法は Hamilton 系のもつシンプレクティック性を厳密に保存する方法であり, Euler 法, 修正 Euler 法, RungeKutta 法などの素朴な差分スキームで見られるようなエネルギー誤差の単調な増大を回避し, 安定的に長時間の計算を遂行することができる。以下の内容は [Ued03][Ued01] による。

A.1 ハミルトン系の時間発展 - Liouville 演算子による記述

共役な一般化運動量 \mathbf{p} と一般化座標 \mathbf{q} を力学変数としてハミルトニアン H が

$$H(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) = K(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) + U(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N), \quad (\text{A.1})$$

と書かれる場合を考える。各粒子の運動量と座標はハミルトン方程式

$$\dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}_i}, \quad \dot{\mathbf{q}}_i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad (i = 1, 2, 3, \dots, N). \quad (\text{A.2})$$

に従う。いま, 微視的状态 (\mathbf{p}, \mathbf{q}) から算出される力学量 $A(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t))$ の時間微分を取ると,

$$\frac{dA(t)}{dt} = \sum_j \left(\frac{\partial A}{\partial \mathbf{q}_j} \frac{d\mathbf{q}_j}{dt} + \frac{\partial A}{\partial \mathbf{p}_j} \frac{d\mathbf{p}_j}{dt} \right), \quad (\text{A.3})$$

となり, p, q の時間微分にハミルトン方程式 (A.2) を用いると

$$\frac{dA(t)}{dt} = \sum_j \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_j} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_j} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}_j} \right) A(t), \quad (\text{A.4})$$

と表される。ここで i を虚数単位として Liouville 演算子 L を

$$iL = \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_j} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_j} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}_j} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j} \right), \quad (\text{A.5})$$

と定義する。これを用いると $A(t)$ の時間微分 (A.4) は

$$\frac{dA(t)}{dt} = iLA(t), \quad (\text{A.6})$$

と表現される。この方程式は形式的の解けて

$$A(t) = \exp(iLt)A(0), \quad (\text{A.7})$$

となり，さらに指数関数演算子は級数

$$\exp(iLt) = 1 + tiL + \frac{t^2}{2!}(iL)^2 + \frac{t^3}{3!}(iL)^3 + \dots, \quad (\text{A.8})$$

によって定義され，時間発展演算子と呼ばれる。いま簡単のため1自由度の場合を考え，Liouville 演算子 L とそのエルミート共役 L^\dagger を取ると，

$$L = i \left(\frac{\partial H}{\partial q}, \frac{\partial H}{\partial p} \right) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial/\partial q \\ \partial/\partial p \end{pmatrix}, \quad (\text{A.9})$$

$$L^\dagger = -i \left(\frac{\partial}{\partial q}, \frac{\partial}{\partial p} \right) \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial H/\partial q \\ \partial H/\partial p \end{pmatrix}, \quad (\text{A.10})$$

から，

$$L^\dagger = -L, \quad (\text{A.11})$$

となる。したがって時間発展演算子 $\exp(iLt)$ はユニタリー演算子であることが分かる：

$$\exp(itL^\dagger) \exp(itL) = \exp(-itL) \exp(itL) = \mathbf{E}. \quad (\text{A.12})$$

ただし， E は単位行列である。この結果は時間発展演算子が時間反転に対して対称であることを示している。

A.2 シンプレクティック法

いま，ある時刻 t における相空間内の状態点を $X(t) = (\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ とすると，時刻 $t + \tau$ における状態点 $\mathbf{X}(t + \tau) = (\mathbf{q}(t + \tau), \mathbf{p}(t + \tau))$ は時間発展演算子による変換として

$$\mathbf{X}(t + \tau) = \exp(i\tau L)\mathbf{X}(t), \quad (\text{A.13})$$

と表現される。ここでハミルトニアンが(A.1)のように運動量と座標に関して separable である場合には時間発展演算子も次のように分解することができる：

$$iL = iL_A + iL_B, \quad (\text{A.14})$$

$$iL_A = - \sum_j \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}_j} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j}, \quad iL_B = - \sum_j \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_j} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_j}. \quad (\text{A.15})$$

したがって

$$\mathbf{X}(t + \tau) = \exp(i\tau(L_A + L_B))\mathbf{X}(t). \quad (\text{A.16})$$

すなわち

$$\begin{pmatrix} \mathbf{q}_1(t+\tau) \\ \dots \\ \mathbf{q}_N(t+\tau) \\ \mathbf{p}_1(t+\tau) \\ \dots \\ \mathbf{p}_N(t+\tau) \end{pmatrix} = \exp(i\tau(L_A + L_B)) \begin{pmatrix} \mathbf{q}_1(t) \\ \dots \\ \mathbf{q}_N(t) \\ \mathbf{p}_1(t) \\ \dots \\ \mathbf{p}_N(t) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.17})$$

となる。

A.2.1 1次のシンプレクティック法

ここである非可換演算子 A, B に関して成立するトロッターの公式

$$\exp(\tau(A + B)) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\exp\left(\tau \frac{A}{n}\right) \exp\left(\tau \frac{B}{n}\right) \right]^n, \quad (\text{A.18})$$

を考える。ただしここで τ は任意のパラメタを表し、いまの場合、実質的に自由に選ぶことが可能な時間刻みの幅に対応している。いまトロッターの公式において A, B を Lipuville 演算子 L_A, L_B とし、 $n = 1$ とすれば

$$\exp(i\tau(L_A + L_B)) = \exp(i\tau L_A) + \exp(i\tau L_B) + \mathcal{O}(\tau^2), \quad (\text{A.19})$$

となる。 L_A, L_B には偏微分演算子が含まれており、この指数関数演算子を作用させる際には任意パラメタを γ としてテーラー展開し

$$\exp\left(\gamma \frac{\partial}{\partial x}\right) f(x) = \left(1 + \gamma \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\gamma^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots\right) f(x) = f(x + \gamma), \quad (\text{A.20})$$

と計算する。座標 \mathbf{q} と運動量 \mathbf{p} でハミルトニアンを偏微分したものをそれぞれ $H_{\mathbf{q}}, H_{\mathbf{p}}$ と書くことにすれば、 \mathbf{q} および \mathbf{p} の変換は

$$\exp\left(\gamma\tau H_{\mathbf{p}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\right) \mathbf{q} = \mathbf{q} + \gamma\tau H_{\mathbf{p}}, \quad \exp\left(\gamma\tau H_{\mathbf{q}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right) \mathbf{q} = \mathbf{q}, \quad (\text{A.21})$$

$$\exp\left(-\gamma\tau H_{\mathbf{q}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right) \mathbf{p} = \mathbf{p} - \gamma\tau H_{\mathbf{q}}, \quad \exp\left(-\gamma\tau H_{\mathbf{p}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\right) \mathbf{p} = \mathbf{p}, \quad (\text{A.22})$$

のように遂行される。すなわち全体の変換を成分表示すると

$$\begin{pmatrix} \mathbf{q}_1(\tau) \\ \dots \\ \mathbf{q}_N(\tau) \\ \mathbf{p}_1(\tau) \\ \dots \\ \mathbf{p}_N(\tau) \end{pmatrix} = \exp(i\tau L_A) \exp(i\tau L_B) \begin{pmatrix} \mathbf{q}_1 \\ \dots \\ \mathbf{q}_N \\ \mathbf{p}_1 \\ \dots \\ \mathbf{p}_N \end{pmatrix} \quad (\text{A.23})$$

$$= \exp(i\tau L_A) \begin{pmatrix} \mathbf{q}_1 + \tau H_{\mathbf{p}_1} \equiv \mathbf{q}_1^1 \\ \dots \\ \mathbf{q}_N + \tau H_{\mathbf{p}_N} \equiv \mathbf{q}_N^1 \\ \mathbf{p}_1 \\ \dots \\ \mathbf{p}_N \end{pmatrix} \quad (\text{A.24})$$

$$= \begin{pmatrix} \mathbf{q}_1^1 \\ \dots \\ \mathbf{q}_N^1 \\ \mathbf{p}_1 - \tau H_{\mathbf{q}_1}(\mathbf{q}_1^1, \mathbf{q}_2^1, \dots, \mathbf{q}_N^1) \\ \dots \\ \mathbf{p}_N - \tau H_{\mathbf{q}_N}(\mathbf{q}_1^1, \mathbf{q}_2^1, \dots, \mathbf{q}_N^1) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.25})$$

トロッターの公式を (A.19) で近似して得られる差分公式 (A.25) を「1 次のシンプレクティック法」と呼ぶ。この変換に際してはシンプレクティック性が保存される：

$$\sum_j d\mathbf{q}_j(\tau) \wedge d\mathbf{p}_j(\tau) = \sum_j d\mathbf{q}_j \wedge d\mathbf{p}_j. \quad (\text{A.26})$$

A.2.2 高次のシンプレクティック法

トロッターの公式 (A.18) の展開次数を上げることによって高次のシンプレクティック法を構成する方法を考える。すなわち、トロッターの公式において τ^n の項を考慮に入れた n 次のシンプレクティック法を構成する。トロッターの公式を

$$\exp(\tau(A+B)) = \prod_{i=1}^k \exp(c_i \tau A) \exp(d_i \tau B) + \mathcal{O}(\tau^{n+1}), \quad (\text{A.27})$$

と展開する。ここで c_i, d_i ($i = 1, 2, 3, \dots, k$) は適切な係数¹である。ある時刻 t での座標 $\mathbf{q}(t)$ と運動量 $\mathbf{p}(t)$ から時刻 $t + \tau$ における座標 $\mathbf{q}(t + \tau)$ と運動量 $\mathbf{p}(t + \tau)$

¹いま $n = 2$ において時間発展演算子が

$$\exp\left(i\tau \frac{L_A}{2}\right) \exp(i\tau L_B) \exp\left(i\tau \frac{L_A}{2}\right), \quad (\text{A.28})$$

を求めるスキームは次のようにまとめられる：

$$\begin{aligned}
\exp(ic_1\tau L_A) : \quad & \mathbf{q} = \mathbf{q}, \quad \mathbf{p}^1 = \mathbf{p} - c_1\tau H_{\mathbf{q}}(\mathbf{q}). \\
\exp(id_1\tau L_B) : \quad & \mathbf{q}^1 = \mathbf{q} + d_1\tau H_{\mathbf{p}}(\mathbf{p}^1), \quad \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_1. \\
\exp(ic_2\tau L_A) : \quad & \mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_1, \quad \mathbf{p}^2 = \mathbf{p}^1 - c_2\tau H_{\mathbf{q}}(\mathbf{q}^1). \\
\exp(id_2\tau L_B) : \quad & \mathbf{q}^2 = \mathbf{q}^1 + d_2\tau H_{\mathbf{p}}(\mathbf{p}^2), \quad \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_2. \\
& \dots\dots\dots
\end{aligned} \tag{A.30}$$

以下同様に展開係数の数だけこのスキームを繰り返すことで解が得られる。注釈 (A.28) の場合には第3ステップで終了するため、 $\mathbf{q}(t+\tau) = \mathbf{q}^1$, $\mathbf{p}(t+\tau) = \mathbf{p}^2$ となる。また、 L_A と L_B を交換した時間発展演算子に関しても同様の計算が可能で、そのスキームは次のようになる。

$$\begin{aligned}
\exp(ic_1\tau L_B) : \quad & \mathbf{q}^1 = \mathbf{q} + c_1\tau H_{\mathbf{p}}(\mathbf{p}), \quad \mathbf{p} = \mathbf{p}. \\
\exp(id_1\tau L_A) : \quad & \mathbf{q}^1 = \mathbf{q}^1, \quad \mathbf{p}^1 = \mathbf{p} - d_1\tau H_{\mathbf{q}}(\mathbf{q}). \\
\exp(ic_2\tau L_B) : \quad & \mathbf{q}^2 = \mathbf{q}^1 + c_2\tau H_{\mathbf{p}}(\mathbf{p}^1), \quad \mathbf{p}^1 = \mathbf{p}^1. \\
\exp(id_2\tau L_A) : \quad & \mathbf{q}^2 = \mathbf{q}^2, \quad \mathbf{p}^2 = \mathbf{p}^1 - d_2\tau H_{\mathbf{q}}(\mathbf{q}^1). \\
& \dots\dots\dots
\end{aligned} \tag{A.31}$$

このように高次のシンプレクティック法の拡張は行われる。実際に問題となるのは展開係数 c_i, d_i であるが、これらの係数の値についてはいくつかの論文で算出されている。本論文においては [Yos90][McL95] に掲載されている係数を用い、8次のシンプレクティック法で数値積分を実行した。

のように展開される場合を考える。一般に k と n の間に一義的な関係性はないが、 $k = 2$ のときに (A.27) の両辺を展開したうえで係数を等置することにより

$$c_1 = \frac{1 - 2d_2}{2(1 - d_2)}, \quad c_2 = \frac{1}{2(1 - d_2)}, \quad d_1 = 1 - d_2, \tag{A.29}$$

と決定される。 $d_2 = 0$ と選べば $c_1 = c_2 = 1/2$, $d_1 = 1$ となる。

参考文献

- [AJL92] M. A. Lieberman A. J. Lichtenberg. *Regular and Chaotic Dynamics*. Number 38 in Applied Mathematical Sciences. Springer, 2 edition, 1992.
- [AKH⁺89] Yoji Aizawa, Yasuhiro Kikuchi, Takahisa Harayama, Kenshi Yamamoto, Motonori Ota, and Kenji Tanaka. Stagnant motions in hamiltonian systems. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 98:36–82, 1989.
- [Arn63a] V. I. Arnold. A proof of a. n. kolmogorov’s theorem on conservation of conditionally periodoc motions under small pertuabations of the hamiltonian. *Rus. Math. Surv.*, 18(5):9–36, 1963.
- [Arn63b] V. I. Arnold. Small divisor problems in classical and celestial mechanics. *Rus. Math. Surv.*, 18(6):85–191, 1963.
- [Arn64] V. I. Arnold. Instability of dynamical systems with several degrees of freedom. *Sov. Math. Dokl.*, 5:581, 1964.
- [Arn81] V. I. Arnold. 古典力学の数学的方法. 岩波書店, 1981.
- [BB91] Oscar Baldan and Giancarlo Benettin. Classical “freezing” of fast rotations. a numerical test of the boltzmann-jeans conjecture. *Journal of Statistical Physics*, 62(1-2):201–219, 1991.
- [BCGG08] G. Benettin, A. Carati, L. Galgani, and A. Giorgilli. *The Fermi-Pasta-Ulam Problem and the Metastability Perspective*, volume 728. Springer, 2008.
- [BCS93] Giancarlo Benettin, Andrea Carati, and Paolo Sempio. On the landau-teller approximation for energy exchanges with fast degrees of freedom. *Journal of Statistical Physics*, 73(1-2):175–192, 1993.
- [Ben94] Giancarlo Benettin. Ergodicity and time-scales for statistical equilibrium in classical dynamical systems. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 116:207–234, 1994.
- [BGG⁺80] P. Butera, L. Galgani, A. Giorgilli, A. Tagliani, and H. Sabata. Stochasticity Thresholds in a Lattice Field Theory. *Il Nuovo Cimento B Series 11*, 59:81–86, 1980.

- [BGG87] Giancarlo Benettin, Luigi Galgani, and Antonio Giorgilli. Exponential law for the equipartition times among translational and vibrational degrees of freedom. *Physics Letters A*, 120(1):23 – 27, 1987.
- [BGG89] Giancarlo Benettin, Luigi Galgani, and Antonio Giorgilli. Realization of holonomic constraints and freezing of high frequency degrees of freedom in the light of classical perturbation theory. part ii. *Communications in Mathematical Physics*, 121(4):557–601, 1989.
- [BGG04] L. Berchiolla, L. Galgani, and A. Giorgilli. LOCALIZATION OF ENERGY IN FPU CHAINS. *Discr. Contin. Dyn. Syst. A*, 11(4):855 – 866, 2004.
- [BGP04] Luisa Berchiolla, Antonio Giorgilli, and Simone Paleari. Exponentially long times to equipartition in the thermodynamic limit. *Phys. Lett. A*, 321(3):167–172, 2004.
- [BGS76] Giancarlo Benettin, Luigi Galgani, and Jean-Marie Strelcyn. Kolmogorov entropy and numerical experiments. *Phys. Rev. A*, 14:2338–2345, 1976.
- [BKR90] V.M. Burlakov, S.A. Kiselev, and V.I. Rupasov. Localized vibrations of homogeneous anharmonic chains. *Physics Letters A*, 147(2–3):130 – 134, 1990.
- [Bol95] L. Boltzmann. On certain questions of the theory of gases. *Nature*, 51:413–415, 1895.
- [BP11] G. Benettin and A. Ponno. Time-Scales to Equipartition in the Fermi-Pasta-Ulam Problem: Finite-Size Effects and Thermodynamic Limit. *J. Stat. Phys.*, 144:793–812, 2011.
- [BSBL70] P. Bocchieri, A. Scotti, B. Bearzi, and A. Loinger. Anharmonic Chain with Lennard-Jones Interaction. *Phys. Rev. A*, 2:2013–2019, 1970.
- [CCSPC97] Lapo Casetti, Monica Cerruti-Sola, Marco Pettini, and E. G. D. Cohen. The Fermi-Pasta-Ulam problem revisited: Stochasticity thresholds in nonlinear Hamiltonian systems. *Phys. Rev. E*, 55:6566–6574, 1997.
- [CDRT98] Thierry Cretegny, Thierry Dauxois, Stefano Ruffo, and Alessandro Torcini. Localization and equipartition of energy in the β -fpu chain: Chaotic breathers. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 121(1–2):109 – 126, 1998.
- [CGGP07] A. Carati, L. Galgani, A. Giorgilli, and S. Paleari. Fermi-Pasta-Ulam phenomenon for generic initial data. *Phys. Rev. E*, 76:022104, 2007.

- [CGS72] C. Cercignani, L. Galgani, and A. Scotti. Zero-point energy in classical non-linear mechanics. *Physics Letters A*, 38(6):403 – 404, 1972.
- [CS84] B.V. Chirikov and D.L. Shepelyansky. Correlation properties of dynamical chaos in hamiltonian systems. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 13(3):395 – 400, 1984.
- [DF76] Alex J. Dragt and John M. Finn. Insolubility of trapped particle motion in a magnetic dipole field. *Journal of Geophysical Research*, 81(13):2327–2340, 1976.
- [DLLL95] J. De Luca, A. J. Lichtenberg, and M. A. Lieberman. Time scale to ergodicity in the fermi–pasta–ulam syste. *Time scale to ergodicity in the Fermi–Pasta–Ulam syste*, 5(1):283–297, 1995.
- [DLLR96] J. De Luca, A. J. Lichtenberg, and S. Ruffo. Universal evolution to equipartition in oscillator chains. *Phys. Rev. E*, 54:2329–2333, Sep 1996.
- [DLLR99] J. De Luca, A. J. Lichtenberg, and S. Ruffo. Finite times to equipartition in the thermodynamic limit. *Phys. Rev. E*, 60:3781–3786, 1999.
- [DLR95] J. DeLuca, A. J. Lichtenberg, and S. Ruffo. Energy transitions and time scales to equipartition in the fermi-pasta-ulam oscillator chain. *Phys. Rev. E*, 51:2877–2885, Apr 1995.
- [Fla74] H. Flaschka. The toda lattice. ii. existence of integrals. *Phys. Rev. B*, 9:1924–1925, Feb 1974.
- [FMM⁺82] F. Fucito, F. Marchesoni, E. Marinari, G. Parisi, L. Peliti, S. Ruffo, and A. Vulpiani. Approach to equilibrium in a chain of nonlinear oscillators. *J. Physique*, 43:707–713, 1982.
- [FPU55] E. Fermi, J. Pasta, and S. Ulam. Studies of non linear problems. *Los Alamos Science Laboratory Report, LA-1940 (unpublished)*, 1955.
- [GPP05] A. Giorgilli, S. Paleari, and T. Penati. LOCAL CHAOTIC BEHAVIOR IN THE FERMI-PASTA-ULAM SYSTEM. *Discr. Contin. Dyn. Syst. B*, 5(4):991–1004, 2005.
- [GS72a] L. Galgani and A. Scotti. Recent progress in classical nonlinear dynamics. *Nuovo Cim.*, 2:189–209, 1972.
- [GS72b] Luigi Galgani and Antonio Scott. Planck-like distributions in classical nonlinear mechanics. *Phys. Rev. Lett.*, 28:1173–1176, May 1972.
- [H74] M. Hénon. Integrals of the toda lattice. *Phys. Rev. B*, 9:1921–1923, Feb 1974.

- [Haa71] D. Ter Haar. *ELEMENTS OF HAMILTONIAN MECHANICS*. Pergamon Press, 1971.
- [HH64] M. Hénon. and C. Heiles. The applicability of the third integral of motion: Some numerical experiments. *Astronomical Journal, Vol. 69, p. 73 (1964)*, 69:73, 1964.
- [IC66] F. M. Izrailev and B. V. Chirikov. Statistical Properties of a Nonlinear String. *Soviet Physics Doklady*, 11(1):30–32, 1966.
- [IKC70] F. M. Izrailev, A. I. Khisamutdinov, and B. V. Chirikov. Numerical experiments with a nonlinear chain. *Los Alamos, LA-4440-TR*, 1968, 1970.
- [Kar83] Charles F.F. Karney. Long-time correlations in the stochastic regime. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 8(3):360 – 380, 1983.
- [KLR94] Holger Kantz, Roberto Livi, and Stefano Ruffo. Equipartition Thresholds in Chains of Anharmonic Oscillators. *J. Stat. Phys.*, 76:627–643, 1994.
- [Kol91] A. N. Kolmogorov. *On the preservation of conditionally periodic motions under small variations of the Hamilton function, In: Selected Works of A. N. Kolmogorov*, volume 1. 1991.
- [Kon05] T. Konishi. Slow dynamics in multidimensional phase space: Arnold model revisited. In M. Toda, T. Komatsuzaki, T. Konishi, R. S. Berry and S. A. Rice, editors, *Advances in Chemical Physics*, volume 130, chapter 21, pages 423–436. Wiley, 2005.
- [KY10] Tetsuro Konishi and Tatsuo Yanagita. Slow relaxation to equipartition in spring-chain systems. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2010(09):P09001, 2010.
- [LN92] P. Lochaka and A. I. Neishtadt. Estimates of stability time for nearly integrable systems with a quasiconvex Hamiltonian. *Chaos*, 2(4):498–499, 1992.
- [LPR⁺83] Roberto Livi, Marco Pettini, Stefano Ruffo, Massimo Sparpaglione, and Angelo Vulpiani. Relaxation to different stationary states in the Fermi-Pasta-Ulam model. *Phys. Rev. A*, 28:3544–3552, 1983.
- [LPR⁺85] Roberto Livi, Marco Pettini, Stefano Ruffo, Massimo Sparpaglione, and Angelo Vulpiani. Equipartition threshold in nonlinear large Hamiltonian systems: The Fermi-Pasta-Ulam model. *Phys. Rev. A*, 31:1039–1045, 1985.

- [McL95] R. McLachlan. On the numerical integration of ordinary differential equations by symmetric composition methods. *SIAM J. Sci. Comput.*, 16(1):151–168, 1995.
- [Mos67] J. Moser. Convergent series expansions for quasi-periodic motions. *Math. Ann.*, 169:136–176, 1967.
- [Nek71] N. N. Nekhoroshev. Behavior of hamiltonian systems close to integrable. *Functional Analysis and Its Applications*, 5(4):338–339, 1971.
- [NH94] Huzio Nakano and Masumi Hattori. エルゴード性とは何か. パリテイ物理学コース クローズアップ. 丸善株式会社, 1994.
- [Ose68] V. I. Oseledec. The multiplicative ergodic theorem of oseledets. *Trans. Moscow. Math. Soc.*, 19(197), 1968.
- [PCS91] Marco Pettini and Monica Cerruti-Sola. Strong stochasticity threshold in nonlinear large Hamiltonian systems: Effect on mixing times. *Phys. Rev. A*, 44:975–987, 1991.
- [PCSF11] A. Ponno, H. Christodoulidi, Ch. Skokos, and S. Flach. The two-stage dynamics in the fermi-pasta-ulam problem: From regular to diffusive behavior. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 21(4):043127, 2011.
- [PL90] Marco Pettini and Marco Landolfi. Relaxation properties and ergodicity breaking in nonlinear Hamiltonian dynamics. *Phys. Rev. A*, 41:768–783, 1990.
- [Poi92] H. Poincaré. *New Methods of Celestial Mechanics*, volume 1. Amer. Inst. Phys., 1993 (1892).
- [PP05] Simone Paleari and Tiziano Penati. EQUIPARTITION TIMES IN A FERMI-PASTA-ULAM SYSTEM. *Disc. Cont. Dyn. Syst. Suppl. 2005*, pages 710–719, 2005.
- [Pri62] I. Prigogine. *Non-equilibrium Statistical Mechanics*, chapter 14. Interscience, 1962.
- [SH67a] Nobuhiko Saitô and Hajime Hirooka. Computer Studies of Ergodicity in Coupled Oscillators with Anharmonic Interaction. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 23(2):167–171, 1967.
- [SH67b] Nobuhiko Saitô and Hajime Hirooka. Long-Time Behavior of the Vibration in One-Dimensional Harmonic Lattice. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 23(2):157–166, 1967.

- [SHI75] Nobuhiko Saitô, Naoteru Hirotsu, and Atsushi Ichimura. The induction phenomenon and ergodicity in the anharmonic lattice vibration. *Journal of the Physical Society of Japan*, 39(6):1431–1438, 1975.
- [SI76] Nobuhiko Saitô and Atsushi Ichimura. The synchronized periodic phenomenon in a nonlinear lattice vibration. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 59:137–147, 1976.
- [SIS06] A. Shudo, K. Ichiki, and S. Saito. Origin of slow relaxation in liquid-water dynamics: A possible scenario for the presence of bottleneck in phase space. *EPL (Europhysics Letters)*, 73(6):826, 2006.
- [SST00] Diane E. Sagnella, John E. Straub, and D. Thirumalai. Time scales and pathways for kinetic energy relaxation in solvated proteins: Application to carbonmonoxy myoglobin. *The Journal of Chemical Physics*, 113(17):7702–7711, 2000.
- [Tab89] M. Tabor. *CHAOS AND INTEGRABILITY IN NONLINEAR DYNAMICS An Introduction*. Wiley-Interscience, 1989.
- [TKG94] Toshio Tsuchiya, Tetsuro Konishi, and Naoteru Gouda. Quasiequilibria in one-dimensional self-gravitating many-body systems. *Phys. Rev. E*, 50:2607–2615, Oct 1994.
- [TMK89] D. Thirumalai, Raymond D. Mountain, and T. R. Kirkpatrick. Ergodic behavior in supercooled liquids and in glasses. *Phys. Rev. A*, 39:3563–3574, 1989.
- [TTK98] Naoteru Gouda Toshio Tsuchiya and Tetsuro Konishi. Chaotic itinerancy and thermalization in a one-dimensional self-gravitating system. *Astrophys. Space. Sci.*, 257(2):319–341, 1998.
- [Ued01] Akira Ueda. 計算物理入門-分子シミュレーションを中心に. サイエンス社, 2001.
- [Ued03] Akira Ueda. 分子シミュレーション-古典系から量子系手法まで. 裳華房, 2003.
- [ULC00] K. Ullmann, A. J. Lichtenberg, and G. Corso. Energy equipartition starting from high-frequency modes in the Fermi-Pasta-Ulam β oscillator chain. *Phys. Rev. E*, 61:2471–2477, 2000.
- [YK98] Yoshiyuki Y. Yamaguchi and Tetsuro Konishi. A geometrical model for stagnant motions in hamiltonian systems with many degrees of freedom. Technical report, In preparation, 1998.

- [YO94] H. Yoshida Y. Ohnuki. 岩波講座・現代の物理学・力学. 岩波書店, 1994.
- [Yos90] Haruo Yoshida. Construction of higher order symplectic integrators. *Phys. Lett. A*, 150(5-7):262 – 268, 1990.
- [Yos96] K. Yoshimura. Stability of normal mode oscillations of one-dimensional anharmonic lattices. *Phys. Rev. E*, 54:5766–5773, Nov 1996.
- [ZK65] N. J. Zabusky and M. D. Kruskal. Interaction of "solitons" in a collisionless plasma and the recurrence of initial states. *Phys. Rev. Lett.*, 15:240–243, Aug 1965.