研究会報告

ハミルトン系における遅い運動

名古屋大学理学部物理R研 小西哲郎
tkonishi@allegro.phys.nagoya-u.ac.jp
http://jegog.phys.nagoya-u.ac.jp/~tkonishi/research/

研究会「複雑な多谷ポテンシャルエネルギー面上で
生起する動力学的諸問題」講演概要

1 はじめに

古典統計力学が成立することの説明の一つとして、自由度の大きな孤立系を十分長時間放置すると、巨視的には時間的に変わらない「熱平衡」とよばれる状態に落ち着く、という言い方がある。統計力学は広い範囲で良く成り立っている事が知られているので、その背後の仮定もそれなりの妥当性があると思われる。また、本研究会の主題でもある化学反応の理論でも、伝統的な理論では遷移状態である種の等分配的な事が起きていることが仮定されている。

系の (微視的な) 運動が周期的であるならば、系は巨視的にみて一つの状態に落ち着くことは無いと思われる。系が可積分あるいはそれに近い場合には、系の運動が周期的あるいは準周期的になり、初期条件に近い状態に (ある意味) すぐ戻って来てしまい、巨視的に見て一つの状態へ漸近しない、と言う現象も知られている。[FPU65] したがって、熱平衡状態が力学的に成立するということは系のカオス的運動によって実現されていると考えられる。

巨視的な孤立系で起きる非周期的な, すなわちカオス的運動は、多自由度のハミルトン系のカオスそのものである。ところで、ハミルトン系の挙動としては、「遅い運動」が良く知られている。

たとえば、系が熱的に運動している場合、我々は、系に微弱な擾乱を加えてもそれが速やかに消失してまた熱平衡状態へ復帰することを期待する。が、ハミルトン系では時間相関が速やかに (ある特徴的な時定数を持った、$\exp(-\gamma t)$ のような指数型の減衰として) は消失せず、むしろ、特徴的な時定数を持たない $t^{-\beta}$ のようなべき型の相関になる場合があることが良く知られている。[Kar83, CS84, AKH+89, Aiz84]

また、多自由度ハミルトン系がエネルギー面上をくまなく動くことが出来ることの「見て来たような説明」として使われる「アーノルド拡散」は、その速さが極めて遅いことが知られている。[Arn64]

また、アーノルド拡散と良く似た理論として、可積分なハミルトン系に弱い摂動を加えた系で、保存量が極めて長時間狭い範囲に留まることが知られている。(Nekhoroshev 不等式)[Nek77]

さらに、本講演では詳しく触れないが、系の自由度がたとえば回転と並進のように「速い運動」と「遅い運動」の２種類に分かれる場合、それらの間のエネルギー交換も極めて遅い事が知られている。[Bol95, Jea03, BF96, SS99]

このように、「統計力学の素」として多自由度ハミルトン系に期待されている振舞いと、非線形動力学で親しんでいる多自由度ハミルトン系の振舞いにはギャップがある。本講演では、そのギャップの実体に迫るべく解説を行い

たい。[1]

まずはじめに、名前だけは有名な「アーノルド拡散」の実体を精密な数値計算で解析する試みを紹介する。次に、べき型の時間相関が有限時間で消失する現象について延べる。

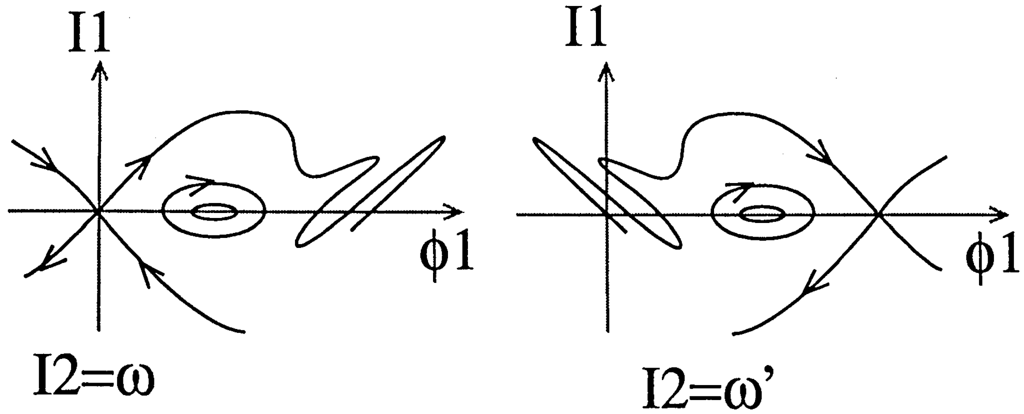
2 "Arnold 拡散"

Arnold 拡散とは、Arnold[Arn64] が,2.5 自由度系 (2自由度+周期外力) で示した、作用変数がゆっくりと変化する現象である。2自由度ハミルトン系ではKAMトーラスが残っていると例えカオスが起きても系が取り得る状態は有限の範囲内でしかないが、系が多自由度であることによって、相互作用によって保存量が広範囲に動き得る例となっている。

系は振り子と振動子を結合させて外力を加えたもので、ハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2}(I_1^2 + I_2^2) + \varepsilon(\cos\varphi_1 - 1)\left[1 + \mu(\sin\varphi_2 + \cos t)\right]$$

という形である。



2.1 定理の主張

$0 < A < B$ とする。$\forall\varepsilon > 0$ に対して $\exists\mu_0 > 0$ があって、$0 < \mu < \mu_0$ ならば、二つの領域 $I_2 < A$ と $B < I_2$ を結ぶ軌道が存在する。

註：$I_2 < A$ から $B < I_2$ へはすぐに移動できる訳ではなく、φ_1 が1まわりする間に $\Delta I_2 \sim \exp(-1/\sqrt{\varepsilon})$ 程度の変化を次々と繰り返していくことになる (transition chain)

「どんなに小さな ε でも」と言うところが大事。

ここで注意すべき事は、作用変数 I_2 のずれが ε に対して極めて小さい

$$\Delta I_2 \propto \exp(-1/\sqrt{\varepsilon}) \qquad (1)$$

[1] 解説自体が「遅い運動」かも。。。

という形をしていることである。すなわち、εが小さいときにはΔI_2は「ものすごく小さい」ことになる。アーノルド拡散が遅い、と言われるのはこのことである。

この結果はArnoldによって摂動論的に評価されたものである。この特異なε依存性から、素朴な数値計算ではアーノルド拡散が(小さすぎて)捉え切れない可能性がある。また、実際にどの程度の大きさのεで(1)型の遅いずれが見られるのかはわからない。さらに、「アーノルド拡散」が起きているとき、実際にどのような過程が生じているのかも分かっていない。

講演では、高精度の数値計算を用いてこのアーノルド拡散を再現することで、多自由度系での緩和の素過程とも考えられるアーノルド拡散が実際はどのような運動なのか、その謎に迫ろうと思う。

3 異常拡散(anomalous diffusion)とその終わり

熱運動は多自由度ハミルトン系で生ずるカオスの1種である。

ところで、熱運動とは、各自由度が空間的および時間的に相関を失っている状態であり、ベキ型の時間相関があるとは、時間相関がどんなに時間が経っても失われないことなので、この両者は相容れない。

この矛盾はいかにして解消されるのであろうか?

熱運動をしているとき、系の各自由度はブラウン運動的(拡散的)に運動する。一方、長時間相関を持っているとき、異常拡散と言う現象がよくみられる:

$$(x(t)-x(0))^2 \propto t^{\alpha}\ ,\alpha \neq 1 \tag{2}$$

($\alpha=1$が通常の拡散的運動である。)

結合型standard map

$$\begin{aligned}
&(x_i,p_i)\mapsto(x_i',p_i')\ ,i=1,2,\cdots,N\\
&\quad p_i'=p_i+\frac{K}{2\pi}\left(\sin 2\pi(x_{i+1}-x_i)-\sin 2\pi(x_i-x_{i-1})\right)\\
&\quad x_i=x_i+p_i'
\end{aligned}$$

も(2)型の異常拡散を示す。ところが、長時間続くはずの異常拡散が有限の時間で終ってしまい、通常の拡散過程に移行してしまう。[KK89]

ベキ型の時間相関と異常拡散は、通常は、相空間の自己相似的階層構造に系がトラップされて運動していることによる、と解釈される。

ところが、系の相空間の自己相似構造は完全な単一のツリー状ではなく、同一のツリーがいくつも並んでいる様な構造をしている。そして、異常拡散から通常の拡散に移行する時間は、まさにこの一つのツリーから別のツリーへと移るくらいのタイムスケールに対応している。すなわち、別のツリーに移ることで前の記憶を忘れてしまうのである。こうして系の長時間相関が失われて系は熱運動へと移行して行くものと思われる。

References

[Aiz84] Y. Aizawa. Symbolic dynamics approach to the two-dimensional chaos in area-preserving maps. *Prog. Theor. Phys.*, Vol. 71, pp. 1419 – 1421, 1984.

[AKH+89] Y. Aizawa, Y. Kikuchi, T. Harayama, K. Yamamoto, M. Ota, and K. Tanaka. Stagnant motions in Hamiltonian systems. *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, Vol. 98, pp. 36 – 82, 1989.

[Arn64] V.I. Arnold. Instability of dynamical systems with several degrees of freedom. *Sov. Math. Dokl.*, Vol. 5, p. 581, 1964.

[BF96] G. Benettin and F. Fassò. fast rotations of the rigid body: a study of Hamiltonian perturbation theory, Part I. *Nonlinearity*, Vol. 9, pp. 137–186, 1996.

[Bol95] L. Boltzmann. *Nature*, Vol. 51, p. 413, 1895.

[CS84] B.V. Chirikov and D. L. Shepelyansky. Correlation properties of dynamical chaos in Hamiltonian diffusion. *Physica*, Vol. 13D, pp. 395–400, 1984.

[FPU65] E. Fermi, J. R. Pasta, and S. Ulam. Studies of non linear problems. In E. Segré, editor, *Collected works of Enrico Fermi 2*, p. 978. Univ. of Chicago Press, Chicago, 1965.

[Jea03] J. H. Jeans. *Phil. Mag.*, Vol. 6, p. 279, 1903.

[Kar83] C.F.F. Karney. Long time correlations in the stochastic regime. *Physica*, Vol. 8D, pp. 360–380, 1983.

[KK89] K. Kaneko and T. Konishi. Diffusion in Hamiltonian dynamical systems with many degrees of freedom. *Phys. Rev.*, Vol. A 40, p. 6130, 1989.

[Nek77] N.N. Nekhoroshev. An exponential estimate for the stability time of Hamiltonian systems close to integrable ones. *Russ. Math. Surv.*, Vol. 32, pp. 1–65, 1977.

[SS99] 首藤啓, 斎藤真司. 内部自由度をもつハミルトン系の遅い緩和の起源. 物性研究, Vol. 73, pp. 63–83, 1999.