OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	荷電粒子多体系におけるリアプノフ指数と巨視現象に関する理論的研究
Author(s)	上島, 豊
Citation	大阪大学, 1997, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.11501/3129078
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

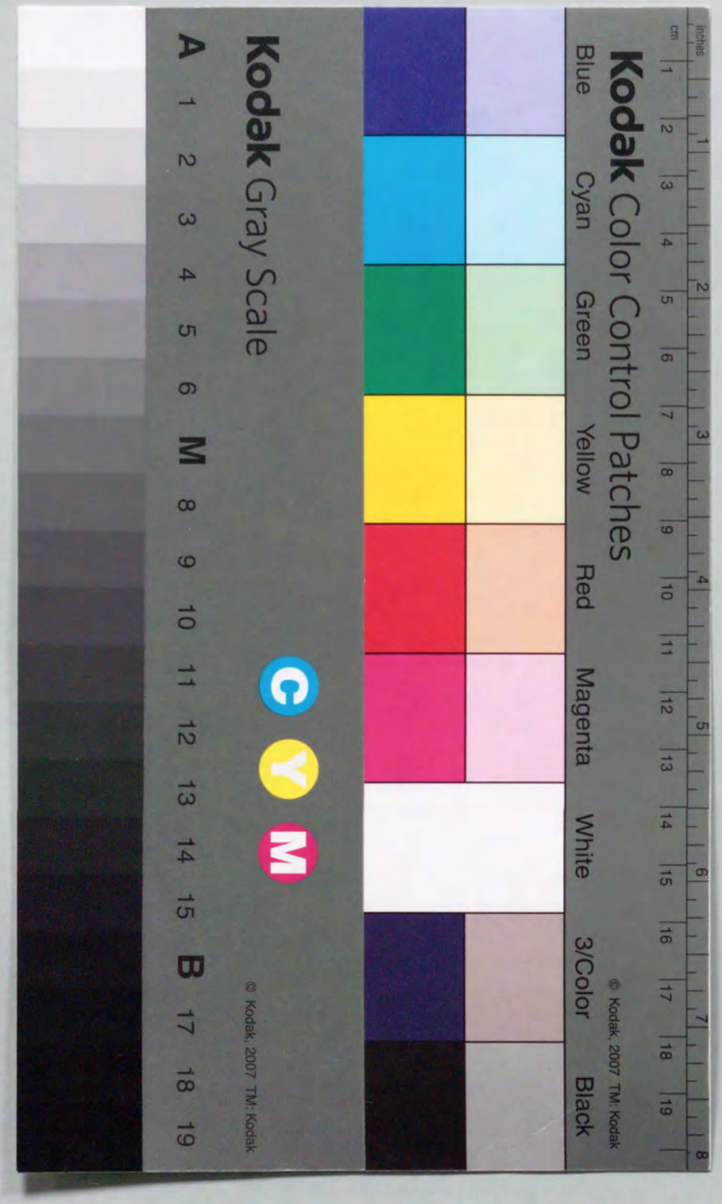
https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

荷電粒子多体系におけるリアプノフ指数と巨視現象に関する理論的研究

平成９年１月

上島　豊



荷電粒子多体系におけるリアプノフ指数と巨視現象に関する理論的研究

平成９年１月

上　島　　豊

内容梗概

本論文は、著者が大阪大学大学院工学研究科電磁エネルギー工学専攻博士課程において行った荷電粒子多体系におけるリアプノフ指数と巨視現象に関する理論的研究成果をまとめたものである。

最近、６Ｎ次元（Ｎ個の粒子からなる系の各粒子の３次元運動量と３次元座標）位相空間の軌道不安定性と巨視現象との関係について興味が持たれている。この位相空間上の軌道不安定性が、統計力学における非可逆過程を決定していると考えられている。従来の統計力学的手法では、強い非平衡系に適用することが非常に困難であり、そのような系の振る舞いを予測することは非常に難しい。しかし、軌道不安定性の指標であるリアプノフ指数は力学量なので、強い非平衡系においてもその量を定義することが可能である。したがって、軌道不安定性と巨視的物理量の関係を明らかにすることにより、強い非平衡系の巨視現象の理解が深まることが期待される。

本論文は、力学特性量（リアプノフ指数）と巨視的物理量との関係に関する理論的研究をまとめたものである。著者は、相互作用が長距離に及ぶため本質的に多体問題である荷電粒子多体系を研究対象として選らび、高精度高速強結合プラズマ粒子シミュレーションコード"SCOPE"を使用し、荷電粒子多体系の力学過程を観測した。粒子数が非常に大きいシミュレーションにより、粒子の力学過程が問題となる極めてミクロな剪断流非平衡系のダイナミクスを調べた。また、巨視的には同一状態で微視的に初期値が微少に異なる２つの系のシミュレーションを行うことにより、古典１成分プラズマのリアプノフ指数を求め、そのクーロン結合定数依存性が希薄プラズマ、強結合プラズマ（液相）、固体プラズマの各状態で異なること、リアプノフ指数と拡散係数の関係などについて明らかにした。また、希薄プラズマに対してリアプノフ指数を第一原理にもとずいて理論モデルを構築し、リアプノフ指数とマクロな誘電応答関数とが関係していることを明らかにした。以下、各章ごとに主要な結果を総括する。

本論文は、６章から構成されており、以下に、本論文の構成と概要について述べる。

第１章は、緒論であり、リアプノフ指数と巨視的物理量との関係に関する研究の歴史的経緯や現在の研究状況を述べた。さらに、この研究領域の将来展望とその可能性、また、その中での本論文の位置づけも述べた。

第２章では、本研究における研究対象である荷電粒子多体系の一般的性質について記し、プラズマを特徴づける無次元量を定義した。また、荷電粒子多体系の粒子シ

ミュレーションで使用した高密度プラズマ粒子コード"SCOPE"について説明し、そのコードがクーロン相互作用の長距離性と粒子間相関を正しく取り扱えていることを示した。

第３章は、レーザー核融合で生成される極めて強い非平衡状態のプラズマのミクロレベルでの巨視現象の粒子シミュレーションを行ない、粒子のミクロな状態が直接的に巨視現象に及ぼす影響を考察した。本論文では、その対象を剪断流不安定性に絞り、流体力学的な不安定性が粒子レベルでも生じ、この現象が粒子の軌道不安定性とつながりがあることを示唆した。

第４章では、エルゴード論的観点から、軌道不安定性と統計力学の成立条件の関係について述べ、その指標であるリアプノフ指数とその瞬時値である局所リアプノフ指数の定義を記した。また、粒子シミュレーションにおけるリアプノフ指数と局所リアプノフ指数の観測方法を述べた。粒子コード"SCOPE"を用いてリアプノフ指数を計測するために必要な摂動の大きさと粒子数について数値誤差の観点から検討を行った。最後に、粒子シミュレーションにより荷電粒子多体系の局所リアプノフ指数を観測し、その特徴について述べた。

第５章では、粒子シミュレーションの大規模パラメーターランにより荷電粒子多体系のリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性を調べ、その結果について考察した。古典１成分プラズマの結果について、それぞれの領域のクーロン結合定数依存性を説明できる理論モデルを構築した。また、希薄な１成分プラズマの領域では、第一原理に基づいてリアプノフ指数を解析的に求める公式を構築し、その結果と粒子シミュレーションの結果を比較した。さらに、その関係を一般化することで、リアプノフ指数と誘電応答関数とが関係していることを明らかにした。

第６章は、結論であり、本研究の結果をまとめて総括を行なった。

目次

第１章　緒論
§1-1 はじめに ---- 1
§1-2 位相空間上の軌道の不安定性 -FPU問題と３体問題- ---- 2
§1-3 リアプノフ指数と強度非平衡系 ---- 3
§1-4 本論文の目的と構成 ---- 4
参考文献 ---- 5

第２章　３次元高密度プラズマ粒子シミュレーション ---- 8
§2-1 はじめに ---- 8
§2-2 プラズマと無次元量 ---- 10
§2-3 高密度プラズマの量子効果と粒子シミュレーション ---- 15
§2-4 ３次元高密度プラズマ粒子コード"SCOPE" ---- 18
§2-5 SCOPEの初期値作成と正当性 ---- 27
§2-6 まとめ ---- 30
参考文献 ---- 31

第３章　１成分高密度プラズマ中の微視的剪断流不安定性 ---- 33
§3-1 はじめに ---- 33
§3-2 剪断流不安定性の線形解析 ---- 35
§3-2-1 有限遷移幅の剪断流不安定性の線形成長率 ---- 35
§3-2-2 速度遷移幅の時間変化を準静的に扱った擾乱の線形成長 ---- 37
3-3　微視的剪断流の輸送過程の粒子シミュレーション ---- 41
§3-3-1 速度自己相関関数の観測 ---- 41
§3-3-2 自己拡散係数の評価 ---- 42
§3-3-3 シミュレーションの条件 ---- 44
§3-3-4 システムエネルギーの変換過程 ---- 45
§3-3-5 流体力学手法による輸送係数の評価 ---- 47
§3-3-6 主流速度の熱への緩和過程 ---- 48

§3-3-7 シミュレーションの初期値に関する鋭敏性 ---------- 50
§3-4 微視的剪断流不安定性の粒子シミュレーション ---------- 51
§3-4-1 線形成長 ---------- 51
§3-4-2 非線形成長 ---------- 53
§3-5 まとめ ---------- 58
Appendix 3-A. 1成分プラズマ流体の線形方程式 ---------- 59
Appendix 3-B. 非粘性・圧縮流体の線形成長率 ---------- 62
Appendix 3-C. 粘性・非圧縮流体の線形成長率 ---------- 63
参考文献 ---------- 65

第4章 荷電粒子多体系におけるリアプノフ指数の粒子シミュレーション --- 66
§4-1 はじめに ---------- 66
§4-2 6N次元位相空間上の軌道不安定性 ---------- 68
§4-2-1 統計力学の成立条件と軌道不安定性 ---------- 68
§4-2-2 軌道不安定性の特性指数"リアプノフ指数" ---------- 71
§4-2-3 統計力学の限界とリアプノフ指数 ---------- 74
§4-3 軌道不安定性の"リアプノフ指数"の数値計算方法 ---------- 75
§4-4 リアプノフ指数の粒子数依存性と数値計算における計算誤差 -------- 78
§4-5 近接した2つの軌道の発散 ---------- 83
§4-6 局所リアプノフ指数 ---------- 87
§4-7 まとめ ---------- 93
Appendix 4-A. 運動量変位と位置座標変位の大きさ比 ---------- 94
参考文献 ---------- 95

第5章 リアプノフ指数と熱力学量との関係 ---------- 96
§5-1 はじめに ---------- 96
§5-2 荷電粒子多体系のリアプノフ指数 ---------- 98
§5-3 リアプノフ指数のクーロン結合定数依存性に関する考察 ---------- 103
§5-4 衝突周波数、および拡散係数とリアプノフ指数の関係 ---------- 109
§5-5 1成分希薄プラズマにおけるリアプノフ指数と誘電応答関数の関係 112
§5-6 まとめ ---------- 119

Appendix 5-A. 希薄プラズマにおける衝突周波数と拡散係数 ---------- 120
Appendix 5-B. ストカスティックな微分方程式に対するVan Kanpenの
摂動展開方法 ---------- 126
Appendix 5-C. 式(5.30)のc_{122}の積分について ---------- 129
参考文献 ---------- 132

第6章 結論 ---------- 134

謝辞 ---------- 137

業績目録 ---------- 138

第1章　緒論

§1-1　はじめに

最近、多粒子系の6N次元位相空間（N個の粒子からなる系の各粒子の3次元運動量、3次元座標からなる位相空間）の軌道不安定性と巨視的物理量との関係について興味が持たれている[1～15]。一般的に多粒子系では、6N次元位相空間の軌道が不安定であるために、可逆な大自由度系を非可逆な少自由度系（熱力学的な系）として扱うことができるようになる。そして、この位相空間上の軌道不安定性が、マクロな非可逆過程の性質を決定づけていると考えられている。したがって、このようなミクロな力学量とマクロな統計力学量との関係は、力学と統計力学の本質に迫る問題であり、その関係を解明することは重要な研究課題である。下の図は、本論文の研究の位置づけを模式的に表したもので、以下の節で詳しく述べる。

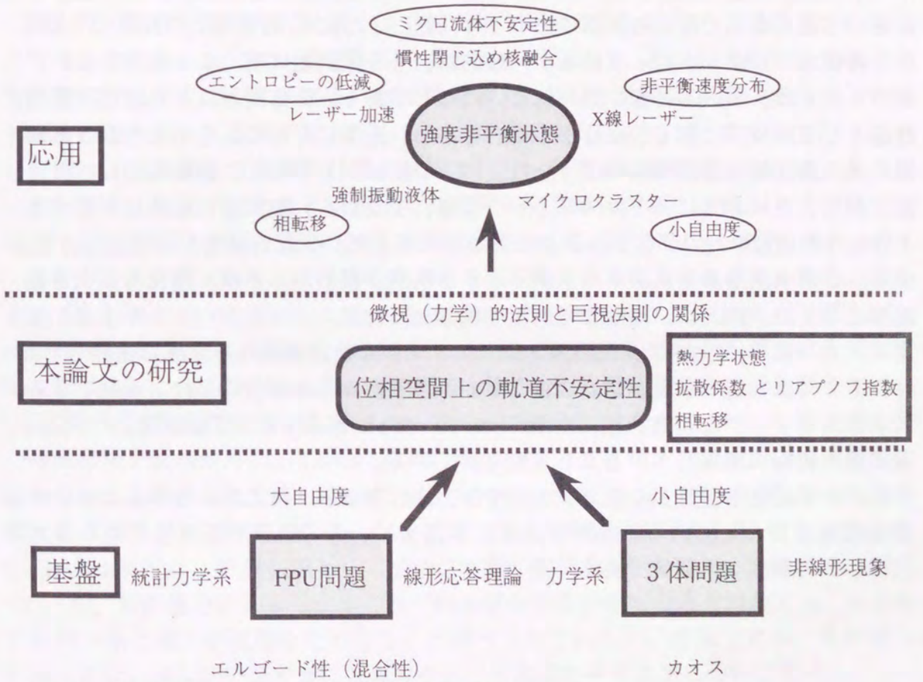


Fig.1-1　本論文の研究の位置づけを模式的に表した図。

§1-2　位相空間上の軌道の不安定性 -FPU問題と３体問題-

位相空間上の軌道の不安定性に関する研究は、エルゴード仮説[16, 17]などの現在の統計物理の基礎と深く結びついている歴史的問題である。そして、その問題は、コンピューターを使った研究が現代物理学にインパクトを与えた最初の問題（いわゆるFermi-Pasta-Ulam（FPU）問題[18～21]）になったことは有名な話である。FPU問題とは、次のような問題である。連成調和振動子（完全可積分系）に摂動として小さな非線形性を加えた連成非線形振動子において再帰現象が起こる、言い換えれば、エネルギーの等分配が起こらないことが観測された。すなわち、FPU問題は、多くの人々の予想に反して、完全可積分系に摂動として小さな非線形性を加えた系において、エネルギーの等分配が起こらないことを提起した。それから多くの研究者が、この衝撃的な結果に対して研究[22,23]を続け、非可積分系は、その非線形度の大きさによって、位相空間上の軌道が安定な運動をするエネルギーの等分配が生じない系（近似的可積分な系）と軌道が不安定な運動をしてエネルギーの等分配が生じる系に分けられることが明らかになった。

一方、統計物理（熱力学系）が対象としないような少数自由度系、すなわち力学系において最も有名で歴史的問題である３体問題[21, 23]は位相空間上の軌道の不安定性と密接なつながりを持っている。一般的に、「３体問題は解くことができない」ということは、ずいぶん昔に知られていたことであり、３体問題は２体問題の摂動問題として近似的に解くしかなかった。しかし、近年になって、このような３体問題には、周期解や準周期解のような性質のよい解ばかりでなく、摂動論的には扱うことができない非常にストカスティックな解、すなわち、初期値に鋭敏に影響する不安定な軌道[24～27]が含まれることがわかってきた。少数自由度の決定論的方程式から、このような非常にストカスティックな軌道が現れることは、研究者に大きな衝撃を与えた。例えば、現在まで原因不明であったアステロイドベルトや土星、木星リングの間隙[28, 29]は、このストカスティックな軌道が現れる位置に相当しており、そこでは安定な軌道が描けないことが原因であることが分かった。現在、このストカスティックな運動状態はカオス[26, 30～33]と呼ばれて、位相空間上の軌道不安定性と密接に関係していることが知られている。

このように位相空間上の軌道不安定性は、統計力学系、および、力学系において重要な役割を果たしていることが分かる。本論文は、この軌道不安定性の新たな可能性について模索した研究である。

§1-3　リアプノフ指数と強度非平衡系

最近、分子動力学の手法を用いてマイクロクラスター[34]やミクロスケールの非定常流れ[35, 36]や強制振動コロイド[37, 38]の分子動力学シミュレーションが盛んに行われている。そのような系の巨視現象の法則を発見することは非常に難しい問題である。なぜなら、従来の統計力学的手法はこのような強度非平衡系に適用することが非常に困難なためである。そして、極めて強い非平衡状態でのミクロ輸送過程の解明は、新しいエネルギー源として有望視されているレーザー核融合[39, 40]や産業、理工学上大きな革命を起こす可能性のあるX線レーザー[41]、レーザー加速[42, 43]などの進展に不可欠である。このようなミクロ輸送過程は、それ自体重要な問題であるとともに力学過程と巨視現象との関係を理解するための興味深い問題でもある。

一般的に、軌道不安定性が十分大きい場合統計力学的な扱いが可能となる。また、軌道不安定性はこのような性質だけではなく、更に大きな潜在能力を秘めている。まず、第一に軌道不安定性の指標であるリアプノフ指数[31, 32]は力学量であるので、従来の統計力学的手法の限界（局所熱平衡など）を越えてその量を定義することができる。また、局所リアプノフ指数[31, 33]は、さらに微視的な力学量であり、軌道不安定性の構造や平均から大きくはずれる稀な現象についての力学情報を含む重要な特性量である。第二に、軌道不安定性が大きい系では、初期値を粗視化量が非平衡状態に対応するように選ぶと、有限の時間で粗視化量が平衡状態（粗視化した確率密度の最大値）へ緩和する。すなわち、軌道不安定性の強さ、すなわちリアプノフ指数は、ある意味で非平衡状態から平衡状態への緩和の速さ意味するのである。したがって、軌道不安定性と巨視現象の関係を明らかにすることにより、従来の統計力学的手法が適用困難な系における巨視現象の理解が深まることが期待される。

現在、リアプノフ指数と巨視的な緩和量である輸送係数に大きな相関があることが予想され、リアプノフ指数とマクロな統計量の関係を見出すために熱心な研究が続けられている[1～15]。これまでの研究で、リアプノフ指数に対する多くの公式が提案されている。例えば、Chaudhuri [2]は、外力が加えられている非線形振動子についてリアプノフ指数の公式を見出し、リアプノフ指数とポテンシャルの２階空間微分の時間相関を関係づけた。Krylov [3] は、剛体球系でリアプノフ指数が衝突周波数に比例することを見出した。GaspardとNicolis[4]は、２次元のローレンツ気体の拡散係数と正のリアプノフ指数、Kolmogorovエントロピーを関係づけた。Seki [5], Nishihara [9], Barnett [10] は、拡散係数とリアプノフ指数の関係を提示した。これら多くの研究は[1～8]、短距離力によって決定されている系か少数自由度の系を対象とし、長距離力を持つ系は扱いが困難なためほとんど調べられていない。本論文では、長距離力を持ち非常に興味深い非平衡巨視現象が生じる荷電粒子多体系について調べた。

§1-4 本論文の目的と構成

本論文は、力学特性量（リアプノフ指数）と巨視的物理量との関係に関する理論的研究をまとめたものである。著者は、その相互作用が長距離に及ぶため、本質的に多体問題である荷電粒子多体系を研究対象として選らび、荷電粒子多体系の力学過程を観測するために、高精度高速強結合プラズマ粒子コードによるシミュレーションを行う。本論文の目的は、シミュレーションを通して粒子の力学過程が問題となる極めてミクロな剪断流非平衡系のダイナミクスを調べ、また、古典１成分プラズマの希薄プラズマ、強結合プラズマ（液相）、固体プラズマの各状態におけるリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性やリアプノフ指数と拡散係数や誘電応答関数の関係などについて明らかにすることである。以下、各章の構成と概要について説明する。

第２章では、本研究における研究対象である荷電粒子多体系の一般的性質について記し、プラズマを特徴づける無次元量を定義する。また、本研究の荷電粒子多体系の粒子シミュレーションで使用した高密度プラズマ粒子コード"SCOPE"[46~50] について説明し、さらに、そのコードの正当性を評価する。

第３章は、レーザー慣性核融合で生成される極めて強い非平衡状態のプラズマのミクロレベルの巨視現象の粒子シミュレーションに関する研究であり、粒子のミクロな状態が直接的に巨視現象に影響する問題について考察する。本章では、その対象を剪断流不安定性に絞り、粒子レベルの流体力学的な不安定性の特徴とこの現象と粒子の軌道不安定性とつながりについて考察する。

第４章では、エルゴード論的観点から、軌道不安定性と統計力学の成立条件の関係について述べ、その指標であるリアプノフ指数とその瞬時値である局所リアプノフ指数の定義と観測方法を示す。また、粒子シミュレーションにより荷電粒子多体系の局所リアプノフ指数を観測し、その特徴について調べる。

第５章では、粒子シミュレーションの大規模パラメーターランにより荷電粒子多体系のリアプノフ指数を計測し、そのクーロン結合定数依存性を明らかにする。また、その結果を説明するために理論的考察をする。希薄な１成分プラズマの領域において、第一原理に基づいてリアプノフ指数を解析的に求める公式を導き出し、その結果と粒子シミュレーションの結果を比較する。さらに、その関係を一般化することで、リアプノフ指数と誘電応答関数とが関係あることを明らかする。

第６章は、結論であり、本論文の結果をまとめて総括を行なう。

参考文献

1. M.Pettini and M.Landolfi, Phys.Rev.A **41**,768 (1990).
2. S. Chandhuri, G. Gangopadhyay and D. S. Ray. Phys.Rev.E. **47**, 311 (1993).
3. N.S.Krylov, *Works on the Fundations of Statistical Physics,* (Prinsceton University, Princeton, New Jersey 1979).
4. P.Gaspard and G.Nicolis, Phys.Rev.Lett. **65**, 1693 (1990).
5. K. Seki et al. Physica. A. **209**, 369 (1994).
6. H.A.Posch and W.G.Hoover, Phys.Rev.A. **38**, 473 (1988).
7. D.J.Evans et al. Phys.Rev.A. **42**, 5990 (1990).
8. C.Amitrano and R.S.Berry, Phys.Rev.Lett. **68**,729 (1992).
9. K. Nishihara et al., Instantaneous Phase-Space Lyapunov Expansion Rates in Strongly Coupled Plasmas, in the Oji International Seminar, Tomakomai, Japan, June 27-July 1, 1994.
10. D. M. Barnett, Lyapunov Exponents of Many Body Systems, Doctor Thesis, The University of Texas at Austin (1995).
11. D. M. Barnett et al. Phys.Rev.Lett. **76**, 1812 (1996).
12. Y.Ueshima, K.Nishihara and H.Furukawa, *Laser Interaction and Related Plasma Phenomena* -12th International Conference-, p.447 (1996), edited by S.Nakai and G.H.Miley, (AIP conference proceedings, New York ,Vol.369).
13. Y.Ueshima, K.Nishihara and H.Furukawa, Proc. of 24th European Conferrence on Laser Interaction with Matters, June 3-7 , 1996, Madrid. (in press).
14. Y. Ueshima et al. to be published in Phys.Rev.E.
15. Y. Ueshima et al. submitted to Phys.Rev.Lett. in May, 1996
16. 北原　和夫、講習会テキスト「カオス」、（日本物理学会、1993）.
17. 伊藤　浩之、数理科学別冊「揺らぎ・カオス・フラクタル」、（サイエンス社、1994）.
18. E.Fermi, J.Pasta and S.Ulam, Los Alamos Scientific Report LA-1940 (1955).
19. J.Ford, J.Math.Phys. **4**, 1293 (1961).
20. E.A.Jackson, J.Math.Phys. **4**, 581 (1963).
21. 下條　隆嗣、「カオス力学入門」、（近代科学社、1992）.
22. F.M.Izrailev, A.I.Khisaamutdinov and B.V.Chiricov, Rept. INF 252, Novosibirsk (1968).

23. G.M.ザフラフスキー　著、三島　信彦、斉藤　徹也、新藤　茂　訳、
「カオスー古典および量子力学系ー」、（現代工学社、1989）.
24. D.Ruelle and F.Takens, Comm.Math.Phys. **20**, 167 (1971).
25. M.J.Feigenbaum, J.Stat.Phys. **19**, 25 (1978).
26. P.Berge, Y.Pomeau and Ch.Vidal　著、相澤　洋二　訳、
「カオスのなかの秩序」、（産業図書、1992）.
27. 谷川　清隆、数理科学６月「古典力学の輝き」、（サイエンス社、1995）.
28. R.M.May, Nature, **261**, 459, (1976).
29. T.Geherels, Phys. Today, 38 (2), **32** (1985).
30. T.Y.Li and J.A.York, Am.Math.Monthly **82**, 985 (1975).
31. A.J.Lichtenberg and M.A.Lieberman, *Regular and Stochastic Motion, Applied Mathematical Science* Vol.**38**, (Springer-Verlag, New York 1983).
32. S.ウィギンス　著、丹羽　敏雄　監訳、「非線形の力学系とカオス」、
（シュプリンガー・フェアラーク東京、1992）.
33. 森　肇、蔵本　由紀、「散逸構造とカオス」、（岩波書店、1994）.
34. T.L.Beek, D.M.Leitner and R.S.Berry, J.Chem.Phys. **89**, 1681 (1988).
35. D. C. Rapaport and E. Clementi, Phys.Rev.Lett. **57**, 695 (1986).
36. J. Koplik, et al. Phys.Rev.Lett. **60**, 1282 (1988).
37. B.J.Ackerson and N.A.Clark, Phys. Rev. Lett. **46**, 123 (1981).
38. W.Xue and G.S.Grest, Phys. Rev. Lett. **64**, 419 (1990).
39. James J.Douderstadt and Gregory A. Moses, *Inertial Confinement Fusion*, (John Wiley & Sons, 1982).
40. 核融合研究　第６８巻別冊、(プラズマ・核融合学会誌, 1992).
41. N.H.Burnett and P.B.Corkum, J.Opt.Soc.Am.B **6**, 1195 (1989).
42. T.Tajima and J.M.Dawson, Phys.Rev.Lett. **43**, 267 (1979).
43. P.Sprangle, E.Esarey, A.Ting and G.Joyce, Appl.Phyys.Lett. **53**, 2146 (1988).
44. 徳満　昌之、「１成分ミクロ３次元粒子コードの開発と
超高密度プラズマ中のシアーフローシミュレーション」、
（大阪大学大学院基礎工学研究科修士論文、1992）.
45. 上島　豊、「高密度プラズマ中における
ケルビン・ヘルムホルツ不安定性の３次元粒子シミュレーション」、
（大阪大学大学院工学研究科修士論文、1994）.
46. K.Nishihara, H.Furukawa, M.Kawaguchi and Y.Abe, *Japanese Supercomputing*, (Springer-Verlag, New York, 1988).
47. H. Furukawa and K. Nishihara, Phys.Rev.A. **42**, 3532 (1990).

48. K. Nishihara, Kakuyugo Kenkyu **66**, 253 (1991).
49. 古河裕之、「レーザー生成高温･高密度プラズマに関する理論的研究」、
（大阪大学大学院工学研究科博士論文、1991）.
50. 安井秀一、「３次元強結合プラズマ粒子コードの高精度化と
高密度プラズマの非線形電気電導度に関する研究」、
(大阪大学大学院工学研究科修士論文、1991).

第２章
３次元高密度プラズマ粒子シミュレーション

§2-1　はじめに

荷電粒子多体系（例えば、プラズマ）は、その相互作用が典型的な長距離力（距離の逆２乗に比例したクーロン力）であるため、粒子の運動が多くの粒子との相互作用により決定される多体系である[1]。また、プラズマの空間的不均一やプラズマ中の電流は、電磁場を励起するだけでなく、外部電磁場と結合し、自己無撞着な場を形成して多様な電磁現象を起こす原因となっている。

プラズマの大きな特徴の１つは、電気的な相互作用を遮蔽する能力があることである。この遮蔽能力の存在のため実効的な相互作用長（遮蔽長）が決定される。この遮蔽長はデバイ長として知られており、次のように評価される。

$$\lambda_{De} \equiv \sqrt{\frac{T}{4\pi n_e e^2}} = 6.9\left[\frac{T}{1eV}\right]^{\frac{1}{2}}\left[\frac{n_e}{1cm^{-3}}\right]^{-\frac{1}{2}} cm. \qquad (2.1)$$

ここで、T、n_e、eは、それぞれエネルギー単位での温度、数密度、電荷素量であり、下付きの添字eは、電子に対する量であることを意味している。このデバイ長を半径とする球を考えると、その球内の電子の数は、次のように表される。

$$N_{De} = \frac{4\pi}{3}\left(n_e\lambda_{De}\right)^3. \qquad (2.2)$$

この量が、直接粒子ー粒子間で相互作用する数、すなわち集団的に振る舞う粒子群の大きさの目安になる。それゆえ、N_{De}が十分大きいプラズマにおいては、集団運動が重要になる。そして、この粒子群の集団的な振動周波数は、プラズマ周波数と呼ばれ、密度だけの関数になる。

$$\omega_{pe} \equiv \sqrt{\frac{4\pi n_e e^2}{m_e}} = 9.0\times10^3\left[\frac{n_e}{1cm^{-3}}\right]^{\frac{1}{2}} s^{-1}. \qquad (2.3)$$

ここで、m_eは、粒子の質量を表している。デバイ長より長く、プラズマ周波数より遅い現象では、希薄なプラズマは集団的振る舞いをする理想的な準中性気体と見なすことができる。しかし、高密度プラズマでは、集団運動の特徴的な距離や周波数以外に、個々の粒子間の衝突が頻繁になってくるので、その特徴的な距離（平均自由行程）や周波数（衝突周波数）も重要になってくる。このような高密度状態では、さらに量子効果が重要になってくる場合もある。この高密度プラズマの特徴については、次節で詳しく述べることにする。以下に、本章の構成を述べておく。

第２節では、荷電粒子多体系の特徴的な無次元量であるクーロン結合定数と電子縮退度を定義し、その物理的な意味を説明する。

第３節では、量子力学的効果が無視できない高密度プラズマの粒子シミュレーションの方法について説明する。

第４節では、荷電粒子多体系の粒子シミュレーションで使用した高精度高速強結合プラズマ粒子コード"SCOPE"について説明する。

第５節では、"SCOPE"の正当性を示す。

§2-2　プラズマと無次元量

プラズマの特徴を系統的に見通しの良い形で整理するために、いくつかの無次元量[2～4]を導入する。電子・イオンの２成分プラズマでは、一般的に質量比R、イオンの価数Zの他に次の２つの無次元量によって状態が決定される。そのひとつは、クーロン結合定数Γと呼ばれ、イオン球半径 a_i の距離でのポテンシャルエネルギー Z^2e^2/a_i とイオンの平均的な運動エネルギー T との比である。もう一方は、電子縮退度θと呼ばれ、電子のフェルミエネルギー ε_f と電子の平均的な運動エネルギー Tとの比である。クーロン結合定数は、イオン間の相関の強さを表すものであり、次式で定義される

$$\Gamma \equiv \frac{Z^2e^2}{a_i T}, \quad \frac{4}{3}\pi a_i^3 \equiv \frac{1}{n_i}. \tag{2.4}$$

また、(2.1)に $n_i = n_e/Z$, $T = m_e\left(\lambda_{De}\omega_{pe}\right)^2$, $\omega_{pe}^2 = 4\pi n_e e^2/m_e$ の関係式を順に代入して整理すると、クーロン結合定数は次のようにも書くことができる。

$$\Gamma = \frac{Z^{\frac{5}{3}}N_{De}^{-\frac{2}{3}}}{3}. \tag{2.5}$$

式(2.5)から、クーロン結合定数は $N_{De}^{-\frac{2}{3}}$ に比例することが分かる。これらのことから、イオン間の相関の強さとデバイ遮蔽効果、すなわちプラズマの集団運動とは密接に結びついていることがわかる。

Γ<<1 のプラズマでは、粒子間のクーロン相互作用エネルギーが粒子の運動エネルギーに比べて十分小さいので、個々の粒子間のクーロン相互作用が無視できる。また、この時 N_{De}>>1 、つまり、デバイ球内に多くの粒子があることになり、デバイ長で実効的にクーロン力が遮蔽され、いわゆる理想プラズマとなる。逆に Γ>1 のプラズマでは、デバイ球内にほとんど電子がないため、デバイ遮蔽の効果がなくなり、イオン間の相関が強くなることになる。このようなプラズマを強結合プラズマとよぶ。電荷素量の値を代入して温度、密度についてまとめると次のような関係が得られる。

$$\Gamma = 5.0Z^2\left[\frac{n_i}{10^{22}\mathrm{cm}^{-3}}\right]^{\frac{1}{3}}\left[\frac{T}{1\mathrm{eV}}\right]^{-1}. \tag{2.6}$$

この式から、Zが1の時、1eVのプラズマを考えると結合定数が1程度になるためには、密度は $10^{20}\mathrm{cm}^{-3}$ ぐらいなければならないことが分かる。一般に高密度プラズマは、強結合プラズマになる。例えば、Fig.2-1からΓ～10の状態は、十分に高密度（固体密度の100～1000倍）であれば温度が高い状態（10eV程度）、すなわち、完全電離プラズマ状態において達成されることを示している。

電子縮退度は電子の分布関数のフェルミ縮退状態を表すパラメータであり、次式で定義される。

$$\theta \equiv \frac{T}{\varepsilon_f} \quad , \quad \varepsilon_f \equiv \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(3\pi^2 n_e\right)^{\frac{2}{3}} = 1.7Z^{\frac{2}{3}}\left[\frac{n_i}{10^{22}\mathrm{cm}^{-3}}\right]^{\frac{2}{3}}\mathrm{eV}. \tag{2.7}$$

ここで、ħは、プランク定数hを 2π で割った量である。また、ε_f は零温度でのフェルミエネルギーであり、単位体積で許される量子状態の低いエネルギー準位から順に電子を埋めていった場合に、最後の電子がもつエネルギーに相当する。ところで、量子力学的な効果として代表的な量であるド・ブロイ波長[5]は、電子の代表的な温度を用いて次のように書くことができる。

$$\lambda_{de} \equiv \frac{h}{\sqrt{m_e T}} = 1.5a_i\left[\frac{n_i}{10^{22}\mathrm{cm}^{-3}}\right]^{\frac{1}{3}}\left[\frac{T}{1\mathrm{eV}}\right]^{-\frac{1}{2}} = 1.5a_e Z^{\frac{1}{3}}\left[\frac{n_i}{10^{22}\mathrm{cm}^{-3}}\right]^{\frac{1}{3}}\left[\frac{T}{1\mathrm{eV}}\right]^{-\frac{1}{2}}. \tag{2.8}$$

1eV、$10^{22}\mathrm{cm}^{-3}$ のプラズマを考えるとド・ブロイ波長が a_i 程度になることが分かる。すなわち、この温度密度領域での近接相互作用において量子力学的な効果が現れてくるので、プラズマの運動の正確な描像を得るためには、量子力学的な効果を考慮しなければならないことが分かる。また、この結果を使って電子縮退度を書き直すと、次のような関係が得られる。

$$\theta = 1.3\left(\frac{a_i}{\lambda_{de}}\right)^2 Z^{-\frac{2}{3}} = 0.59Z^{-\frac{2}{3}}\left[\frac{n_i}{10^{22}\mathrm{cm}^{-3}}\right]^{-\frac{2}{3}}\left[\frac{T}{1\mathrm{eV}}\right]. \tag{2.9}$$

すなわち、Zが1の時、1eVのプラズマを考えると電子縮退度が1程度になるのは、密度は $10^{21}\mathrm{cm}^{-3}$、すなわち固体密度ぐらいであることが分かる。一般に高密度プラズマは、電子縮退プラズマになる。Fig.2-1は、十分に高密度（固体密度の100～1000倍）であれば、温度が高い状態（10eV程度）、すなわち、完全電離プラズマ状態でθ～

0.01程度になることを示している。

以上をまとめると、密度・温度とクーロン結合定数・電子縮退度の関係は、次のグラフや式を満たすことになる。

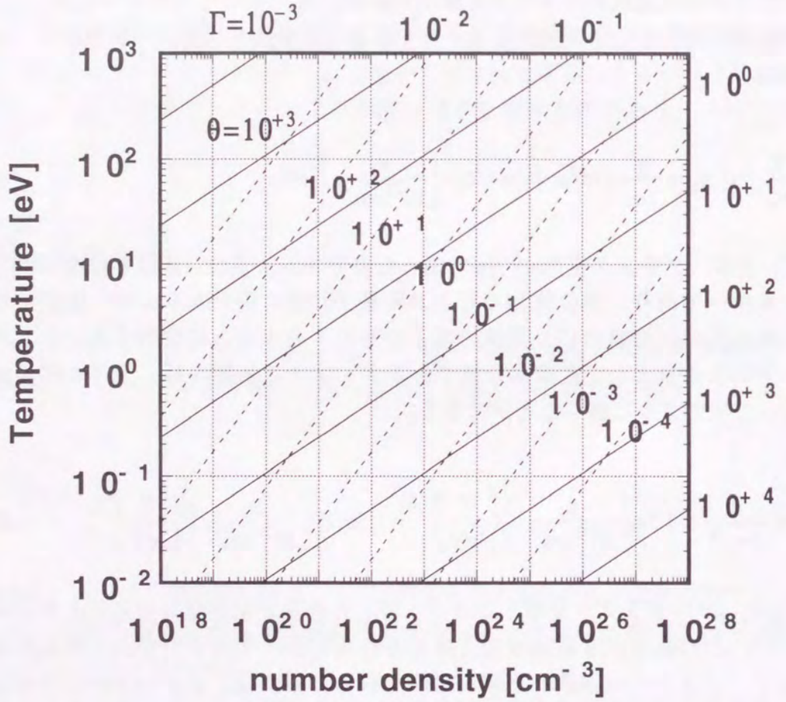


Fig.2-1　温度・密度とクーロン結合定数・電子縮退度の関係。実線は、クーロン結合定数が一定の状態を示しており、それぞれのクーロン結合定数の大きさは、グラフの外側に記している。破線は、電子縮退度が一定の状態を示しており、それぞれの電子縮退度の大きさは、グラフの中央部に記している。左上方が理想プラズマ、右上方が量子論的プラズマ、右下方が量子論的強結合プラズマ、左下方が古典的強結合プラズマの領域である。

$$\Gamma = 5.0Z^2\left[\frac{n_i}{10^{22}\mathrm{cm}^{-3}}\right]^{\frac{1}{3}}\left[\frac{T}{1\mathrm{eV}}\right]^{-1} = \frac{3.0Z^{\frac{4}{3}}}{\theta}\left[\frac{n_i}{10^{22}\mathrm{cm}^{-3}}\right]^{-\frac{1}{3}} = \frac{3.9Z^{\frac{5}{3}}}{\sqrt{\theta}}\left[\frac{T}{1\mathrm{eV}}\right]^{-\frac{1}{2}},$$

$$\theta = 0.59Z^{-\frac{2}{3}}\left[\frac{n_i}{10^{22}\mathrm{cm}^{-3}}\right]^{-\frac{2}{3}}\left[\frac{T}{1\mathrm{eV}}\right] = \frac{3.0Z^{\frac{4}{3}}}{\Gamma}\left[\frac{n_i}{10^{22}\mathrm{cm}^{-3}}\right]^{-\frac{1}{3}} = \frac{15Z^{\frac{10}{3}}}{\Gamma^2}\left[\frac{T}{1\mathrm{eV}}\right]^{-1},$$

$$\left[\frac{n_i}{10^{22}\mathrm{cm}^{-3}}\right] = \frac{27Z^4}{(\Gamma\theta)^3} = \frac{Z^{-6}\Gamma^3}{125}\left[\frac{T}{1\mathrm{eV}}\right]^3 = \frac{0.45Z}{\theta^{\frac{3}{2}}}\left[\frac{T}{1\mathrm{eV}}\right]^{\frac{3}{2}},$$

$$\left[\frac{T}{1\mathrm{eV}}\right] = \frac{15Z^{\frac{10}{3}}}{\Gamma^2\theta} = \frac{1.7Z^{\frac{2}{3}}}{\theta}\left[\frac{n_i}{10^{22}\mathrm{cm}^{-3}}\right]^{\frac{2}{3}} = \frac{5.0Z^2}{\Gamma}\left[\frac{n_i}{10^{22}\mathrm{cm}^{-3}}\right]^{\frac{1}{3}}.$$

また、クーロン結合定数や電子縮退度以外でも、よく使われる（しかし、クーロン結合定数や電子縮退度と独立ではない）無次元量がある。クーロン結合定数と電子縮退度の積を使って新たに定義された無次元量r_sは、高密度プラズマでよく使われる。この無次元量は、電子についての半径aをボアー半径a_B[5]で割った量であり、熱エネルギーがフェルミエネルギーより十分小さい縮退した電子系における電子のクーロン結合定数に対応する。

$$r_s \equiv \frac{a_e}{a_B} = 1.8Z^{-\frac{5}{3}}\Gamma\theta = 5.4Z^{-\frac{1}{3}}\left[\frac{n_i}{10^{22}\mathrm{cm}^{-3}}\right]^{-\frac{1}{3}}, \quad a_B \equiv \frac{\hbar^2}{m_e e^2}. \tag{2.10}$$

この式から、Zが1の時、$10^{23}\mathrm{cm}^{-3}$のプラズマを考えるとボアー半径a_Bと電子についての半径a_eが同じ大きさになることが分かる。

クーロン結合定数と電子縮退度の２乗根の積を使って新たに定義された無次元量は、希薄なプラズマのクーロン対数の評価に使われる。この無次元量は、ド・ブロイ長と古典的な粒子の最接近距離であるランダウ長$\lambda_L \equiv e^2/T = a\Gamma$の比、別の言い方をすると量子力学的不確定性からくる散乱角の不確定の大きさ$\Delta\varphi$と古典的ラザフォード散乱（小角度散乱）の散乱角の大きさφについての比であり、荷電粒子の小角度散乱が古典的に扱えるか、量子論的に扱わなければならないかを決定する量[5]である。

$$s_e \equiv \frac{\lambda_L}{\lambda_{de}/2\pi} = \frac{\varphi}{\Delta\varphi} = \frac{Z^2e^2}{\hbar\sqrt{\frac{T}{m}}} = 1.4Z^2\sqrt{\frac{m}{m_e}\Gamma^2\theta} = 5.3Z^{\frac{11}{3}}\sqrt{\frac{m}{m_e}}\left[\frac{T}{1\mathrm{eV}}\right]^{-\frac{1}{2}}. \tag{2.11}$$

この式から、Zが1の時、イオンは50keV以上の温度のプラズマの小角度散乱（クーロン対数）の評価は、量子論的に扱わなければならないことが分かる。ちなみに、電子の場合は、25eV以上の温度のプラズマは、量子論的に扱わなければならないが、クーロン対数は、古典的に扱っても量子論的に扱ってもオーダーは同じであるので定性的な議論では、特にこだわる必要はない。

§2-3　高密度プラズマの量子効果と粒子シミュレーション

本研究では、２つのタイプ（古典的な荷電粒子系と量子効果のある荷電粒子系）の粒子シミュレーションを実行した。１つは、粒子を古典的な点電荷と考える１成分プラズマシミュレーションである。このシミュレーションは、実際の荷電中性が破れた１成分のプラズマだけでなく、電子が完全縮退して（電子縮退度が0）、電子が一様な中和電荷として扱うことができる高密度プラズマとも対応している（この場合、電子は一様であり、イオンを遮蔽するようには運動しない）。この１成分プラズマでは、もちろん、完全縮退した電子のダイナミクスは追うことはできないが、高密度プラズマのイオンに関与する物性（粘性、質量拡散）などを評価する良いモデルとして、多くの理論的解析や粒子シミュレーションに用いられている[2, 6～10]。そして、モンテカルロシミュレーションや分子動力学シミュレーションなどでクーロン結合定数が170を越えた辺りで相転移を起こし、結晶化することが予想されている[2, 6～10]。最近では、実験により１成分結晶プラズマが確認されている[11]。

もう一方の量子効果のある荷電粒子系は、電子縮退度が１程度、もしくは、１より小さい系のことであり、前段落に述べた特殊な極限を除いて通常の粒子コードでは扱うことができない。このような状態の粒子シミュレーションを実行するためには、何らかの方法で量子効果を考慮しなければならない。大きく分けて２つの方法が考えられる。１つは、量子効果の源である電子の運動を何らかの方法（量子超網鎖近似など)で統計的に処理して、電子をまとったイオンの実効的なポテンシャルを求めて、そのポテンシャルを使ってイオンの平均的なダイナミクスのみを粒子シミュレーションで計算する[12]。この方法では、統計処理をするモデルの適用範囲内では、量子効果の大小にかわらず粒子シミュレーションは実行できる。しかし電磁場のない電荷中性状態でのイオンのダイナミクス（粘性散逸や拡散現象）は記述できるが、プラズマ特有の電磁場との相互作用や電子のダイナミクスを記述できない。もう１つの方法は、電子ー電子、電子ーイオン間の２体の相互作用自体に量子効果を導入する方法である[13～16]。例えば、トンネル効果とパウリの排他効果などを古典的なポテンシャルに繰り込むことで、粒子シミュレーションに実効的に量子効果が加味されることになる。この方法では、プラズマ特有の電磁場との相互作用や電子のダイナミクスを記述できる利点はあるものの、量子力学的効果を古典的なポテンシャルに繰り込むという無理をしているため粒子シミュレーションの適用範囲は小さい領域に限られる。本研究では、後者の方法をとり、トンネル効果とパウリの排他効果を古典的なポテンシャルに繰り込んだC.Deutschによって提唱された準量子論的ポテンシャル[14～16]を使って量子効果を考慮した粒子シミュレーションを実行する。準量子論的ポテンシャルとは、粒子の量子力学的効果の重要となる距離であるド・

ブロイ波長に対応する半径（$\lambda_d/2\pi$）の関数としてトンネル効果とパウリの排他効果を次のように繰り込んだポテンシャルである。

$$e\phi_{\alpha\beta} \equiv \frac{q_\alpha q_\beta}{r} - \frac{q_\alpha q_\beta}{r}\exp\left(-\frac{r}{\lambda_{d\alpha\beta}/2\pi}\right) + \delta_{\alpha\beta}\ln(2)T\exp\left\{-\frac{r^2}{\pi\ln(2)\left(\lambda_{d\alpha\beta}/2\pi\right)^2}\right\}. \qquad (2.12)$$

ここで、$\lambda_{d\alpha\beta} \equiv \frac{h}{\sqrt{2\mu_{\alpha\beta}T}}$ ，$\mu_{\alpha\beta} \equiv \frac{m_\alpha m_\beta}{m_\alpha + m_\beta}$,

そして、q、rは、それぞれ電荷、２粒子間の距離であり、下付きの添字α、βは、粒子種（イオンまたは電子）を表している。$\delta_{\alpha\beta}$は、パウリの排他効果の有無を表しており、同種粒子の場合は１、異種粒子の場合は０の値をとる。右辺の第１項目は、古典的なクーロンポテンシャル、第２項目は、量子効果であるトンネル効果によってポテンシャル壁の透過率が増大することからくる寄与を表している。第３項目は、パウリの排他効果による粒子の実効的な反発を表している。ただし、このポテンシャルはド・ブロイ半径（$\lambda_d/2\pi$）が粒子球半径より十分小さい時に有効であるが、強い縮退状態は記述できない。ちなみに、ド・ブロイ半径は、電子縮退度と次のような関係があり、

$$\theta = \frac{1.3}{(2\pi)^2}\left(\frac{2\pi a_i}{\lambda_{de}}\right)^2 Z^{-\frac{2}{3}}. \qquad (2.13)$$

ド・ブロイ半径とイオン球半径とが等しくなるときの電子縮退度は0.033である。したがって、この近似モデルは、電子縮退度がおよそ0.1以上の範囲で有効であると考えることができる。また、それぞれの項の大小関係をわかりやすくするために無次元量で規格化すると、準量子論的ポテンシャルは次のように書くことができる。

$$\frac{e\phi_{\alpha\beta}}{T} \equiv \Gamma\frac{\tilde{q}_\alpha\tilde{q}_\beta}{\tilde{r}}\left\{1-\exp\left(-5.5Z^{\frac{1}{3}}\sqrt{\theta}\,\tilde{r}\right)\right\} + 0.7\delta_{\alpha\beta}\exp\left\{-14Z^{\frac{2}{3}}\theta\tilde{r}^2\right\},$$
$$\tilde{r} \equiv \frac{r}{a_i} \quad , \quad \tilde{q} \equiv \frac{q}{Ze}. \qquad (2.14)$$

この式から、距離が0での規格化されたポテンシャルは、発散しないで

$5.5\tilde{q}_\alpha\tilde{q}_\beta Z^{\frac{1}{3}}\Gamma\sqrt{\theta} + 0.7\delta_{\alpha\beta}$の値をとることが分かる。$\Gamma\sqrt{\theta}$が十分小さい場合、温度密度によらず0.7Tがポテンシャルの最大値である。

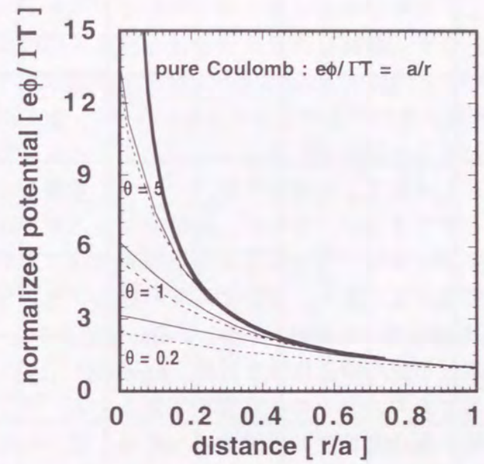


Fig.2-2　準量子論的ポテンシャルの距離依存性。横軸は、平均粒子半径で規格化した２粒子間の粒子間距離であり、縦軸は、クーロン結合定数と熱エネルギーで規格化した２粒子間の相互作用ポテンシャルエネルギーである（純粋なクーロンポテンシャルで距離aでのポテンシャルが常に１になる規格化）。図の太い実線は、純粋なクーロンポテンシャルを、細い実線と破線は、それぞれ電子縮退度が等しい場合の同種粒子間と異種粒子間での準量子論的ポテンシャルを表している。ただし、実線は、クーロン結合定数が1の時のものを書いた。クーロン結合定数が小さくなればなるほど、実線は破線からはずれて大きくなってくる。

Fig.2-2が示すように、電子縮退度が小さくなるにつれて原点近傍でのポテンシャルの低減化が見られ、熱速度の数倍の速度を持つ粒子は、正面衝突で粒子の中心をすり抜けることができるようになる。これは、量子力学的なトンネル効果を現したものである。また、パウリの排他効果のため、常に、破線より実線の方がポテンシャルは高くなっている。

§2-4　3次元高密度プラズマ粒子コード"SCOPE"

プラズマは、その相互作用の長距離性のため本質的に多体問題であり、粒子（ミクロ）と電場や磁場（マクロ）が密接に結びつき、非常に複雑な状態が実現される興味深い系である。しかし、それがゆえにプラズマの粒子シミュレーションは、克服すべき困難な点がある。まず、強結合プラズマでは近接粒子間の相互作用を無視できないので、プラズマのダイナミクスを明らかにするためには、理想プラズマのように近接粒子との相互作用を無視する粒子シミュレーション（PIC法）[17, 18]は適当ではない。また、中性粒子系と異なり、クーロンポテンシャルは距離に逆比例する遠距離力をもつので、遠くの粒子との相互作用についても考慮しなければ、正確なダイナミクスを得ることができない。さらに、強結合プラズマでは、粒子相関が強く遠くまで届くので粒子シミュレーションで有為な情報を得るためには、数百～数千個に及ぶ粒子数が必要である。また、空間的に非一様なプラズマを扱うには、数万～十数万個に及ぶ粒子数が必要であるが。しかし、これは現在のスーパーコンピューターをもってしても直接粒子間の相互作用を計算（Ewald法）[19]するには、非常に長い時間を要する粒子数であり、全くの非現実的問題となる。そこで、近接および遠隔のクーロン相互作用を高速高精度に計算するために、近くの粒子同士の相互作用は粒子ー粒子間で、遠くの粒子との相互作用は粒子ー格子間で計算するParticle-Particle Particle-Mesh法（PPPM法）[20]を使ったコード"SCOPE"[21～24]を用いて3次元粒子シミュレーションを行う。

PPPM法では、2種類の3次元空間格子が使われる。Fig.2-3は、その2次元イメージであり、2種類の空間格子を実線と破線で、シミュレーションの基本セルを太い実線で、また、粒子を白丸と黒丸で表している。実線と破線の空間格子は、それぞれPP格子、PM格子と呼ぶことにする。それらの2種類の格子の役割の説明は後でする。全ての粒子は、各々対応するPP格子に登録される。すなわち、全ての粒子は、格子の番地を持っていて、その番地登録は、シミュレーションステップ毎に更新される。PPPM法では、粒子の位置は格子の大きさで規格化されているので、粒子は、位置の整数部をとることにより簡単に格子へ番地登録される。これもPPPM法の利点の一つである。

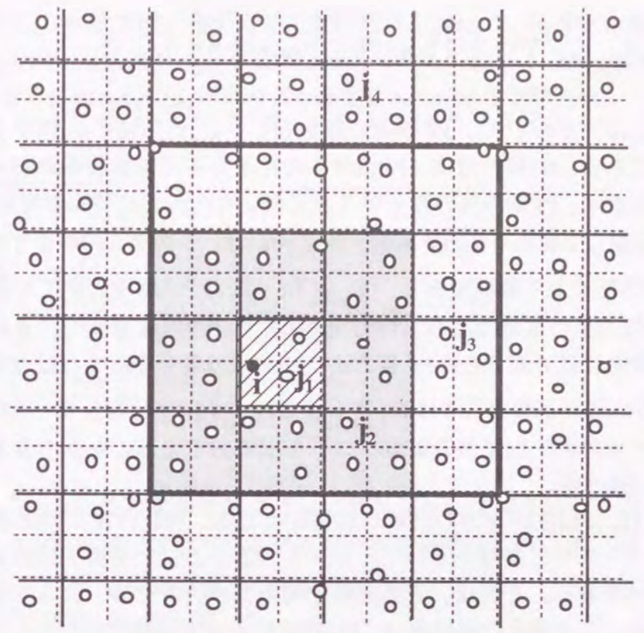


Fig.2-3　2次元メッシュと粒子位置（白丸と黒丸で示している。）の模式図。薄い実線と破線は、それぞれ、粗い(PP) メッシュと細かい(PM)メッシュを示している。濃い実線は、2次元の単位システムを表している。斜線と灰色の領域は、i粒子（黒丸）の力の計算をするときに用いるPP領域である。周期境界条件を採用しているので、例えば、j4は、j2と等価な粒子である。

PPPM法は、システムの全ての粒子の間に働く力を近接粒子と遠隔粒子に対して二つの異なった手法(PP 法とPM 法)を用いて計算している。PP 法では、i粒子に働く力を、その粒子の位置する格子（斜線の格子）とその最近接の26個の格子（灰色の格子）のなかに位置する粒子（j1やj2）からの力を直接足し挙げることで計算する。この27個の格子の領域をPP領域という。灰色の格子の外側にある粒子（j3やj4）からの力は、次に述べるPM法によって計算される。PM 法は、理想プラズマの粒子シミュレーションで使われているPIC法[1]と同じものである。すなわち、粒子の電荷を格子点へ割り付け、得られた格子点での電荷密度を使って、差分化したポアソン方程式を解いて格子点での電場を求める。その格子点での電場から粒子に掛かる力を内挿して求める。i粒子に働く力は、形式的に次のように書くことができる。

$$\mathbf{F}_i = -e_i \sum_{j\in PP\ region} \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial \mathbf{q}_i} + e_i \left[\sum_{l,m,n} \left\{ \mathbf{E}_{l,m,n}(\mathbf{q}_i) - \mathbf{E}'_{l,m,n}(\mathbf{q}_i) \right\} \right]. \tag{2.15}$$

ここで$\mathbf{q}_i$、$\mathbf{q}_j$は、それぞれi、j粒子の位置を表し、ϕ_{ij}は、j粒子がi粒子上につくるポテンシャルである。最初の項は、PP領域中の粒子からの直接粒子ー粒子間力を表している。第2項は、PP領域外の粒子が3次元格子点(l,m,n)につくる電場からi粒子にかかる力を補間して求めたものである。$\mathbf{E}_{l,m,n}(\mathbf{q}_i)$は、システム内の全ての粒子によってつくられたi粒子上の電場であり、$\mathbf{E}'_{l,m,n}(\mathbf{q}_i)$は、PP領域中の全ての粒子によってつくられたi粒子上の電場である。PP法とPM法でのPP領域電荷の二重加算を防ぐためには、原理的には2通りのPM計算方法（PP領域の電荷密度または電場の除去）が考えられるが、周期境界条件では$\mathbf{E}'_{l,m,n}(\mathbf{q}_i)$を$\mathbf{E}_{l,m,n}(\mathbf{q}_i)$から取り除く方法が、全粒子でのフーリエ変換が1回で済み計算コストを引くおさえることができる。この手法の詳細は後に述べる。

PPPM法では、PM法から力の計算に誤差が生じる。PM（PIC）法の特徴は、理想（無衝突）プラズマを超粒子でシミュレートするために近接粒子間の力を過小評価していることである。それは、近接実粒子間の力の計算では、大きな誤差を作り出す原因になる。この誤差の絶対値は、PM格子によって規格化された2粒子間の距離によって決定される。我々は、オリジナルのPPPM法 [20]を以下のように改良した。"SCOPE"[20～23]では、PP格子につけ加えてPM法の精度を上げるためにより小さい格子、PM格子を使用し、格子点への電荷の割り付けと格子点電場から粒子上の電場への補間に3次のスプライン関数を使った。差分式での誤差を低減させるために、ポアソン方程式には4次の差分方程式を採用した。さらに、式(2.15)に書いたようにPP領域の電荷の二重加算を防ぐためPP領域からの電場$\mathbf{E}'_{l,m,n}(\mathbf{q}_i)$の除去を行った。3次のスプライン関数と4次の差分スキームを使うことで、誤差はPM格子によって規格化された2粒子間の距離の逆数の4乗に比例することが知られている[4, 22, 24]。このようにして、PM法にPM格子の導入が要求されるのである。一方、PP格子の大きさΔは、直接粒子ー粒子間力を計算する粒子数を決定しており、粒子相関の距離（強結合プラズマでは、イオン球半径の数倍）よりも大きくとることが望ましい。本研究では、PM格子の大きさのΔ_fは、PP格子の半分にした。その時、PM法で扱う最接近粒子のPM格子によって規格化された粒子間距離は、2より大きくなる。この細かいPM格子を導入することによって、粒子に働く力の誤差の2乗平均（RMS）は0.02%より小さくなる。この誤差は、Ewald法 [19]（周期境界条件で全ての粒子間の力をPP法、すなわち粒子ー粒子間で計算する方法。）との比較によって計測した。

前に述べたように、PP領域の粒子からの電場$\mathbf{E}'_{l,m,n}(\mathbf{q}_i)$は、$\mathbf{E}_{l,m,n}(\mathbf{q}_i)$から差し引かれるべきである。PM法では、格子点での電荷密度を用いて、ポアソン差分方程式を解いて格子点での電場を求める。4次の差分スキームでは、(l', m' ,n')格子点での電荷密度$\rho_{l',m',n'}$は、(l, m,n)格子点に次のような電場$\mathbf{E}(l,m,n)$を誘起する。

$$\mathbf{E}(l,m,n) = -i\frac{2\pi\Delta_f \rho_{l',m',n'}}{L'M'N'} \times \sum_{k_l=0}^{L'-1}\sum_{k_m=0}^{M'-1}\sum_{k_n=0}^{N'-1} \frac{e^{i2\pi\left(\frac{k_l}{L'}(l-l')+\frac{k_m}{M'}(m-m')+\frac{k_n}{N'}(n-n')\right)}}{\sin^2\frac{\pi k_l}{L'}\left(3+\sin^2\frac{\pi k_l}{L'}\right)+\sin^2\frac{\pi k_m}{M'}\left(3+\sin^2\frac{\pi k_m}{M'}\right)+\sin^2\frac{\pi k_n}{N'}\left(3+\sin^2\frac{\pi k_n}{N'}\right)} \times \frac{1}{3}\left\{\sin\frac{\pi k_l}{L'}\cos\frac{\pi k_l}{L'}\sin\frac{\pi k_m}{M'}\cos\frac{\pi k_m}{M'}\sin\frac{\pi k_n}{N'}\cos\frac{\pi k_n}{N'}\right\}. \tag{2.16}$$

$\mathbf{E}'_{l,m,n}(\mathbf{q}_i)$は、PP領域内の電荷密度によって誘起された電場なので、PP領域内の電荷密度のすべてが足し挙げられるべきである。原理的には、L'、M' 、N' は、無限大でなければならないが、数値計算上の収束状態から十分大きいと見なせるようにPP領域の大きさの256^3倍にして計算した。

実際に粒子シミュレーションを行うためには、上記のPPPM法で求めた粒子の加速度αを使って、運動方程式を解くことが必要である。"SCOPE"[21～24]では、粒子の位置と速度の定義する時間を$\Delta t/2$（Δtは、シミュレーションの時間刻み幅）ずらして定義して、この運動方程式をleapfrog法で解いた。leapfrog法とは、Fig.2-4 のような時間発展差分法である。

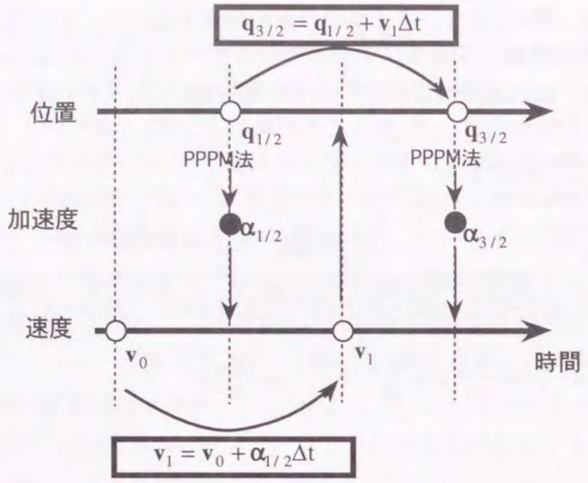


Fig.2-4　leapfrog法の模式図。白丸が、leapfrog法で定義される粒子の位置と速度であり、黒丸が、その時間の粒子位置座標からPPPM法によって求められた加速度を表す。ここで、添字は、Δtを１ステップと考えた時間ステップ数を表す。

具体的には、$\mathbf{v}_0$、$\mathbf{q}_{1/2}$を初期値として与え、$\mathbf{q}_{1/2}$からPPPM法により加速度$\alpha_{1/2}$を求めて$\mathbf{v}_1$を計算し、得られた$\mathbf{v}_1$を使って$\mathbf{q}_{3/2}$を計算するのである。このようにleapfrog法は、位置と速度の定義時間をずらしているため時間微分が中心対象差分となるので、新しい時刻の位置と速度を求める時に直前の位置と速度しか必要としないにも関わらず、時間に対して２次のオーダーの精度が保証されている。しかしながら、leapfrog法では、位置と速度の定義時間がずれているため同時刻の情報を得る場合には、何らかの補間をしなければならない。例えば、速度$\mathbf{v}_0$と同時刻の位置$\mathbf{q}_0$を求める場合、粒子の速度$\mathbf{v}_0$と位置$\mathbf{q}_{1/2}$だけからでは、時間に対して２次のオーダーの精度をもつ位置$\mathbf{q}_0$を求めることはできない。位置$\mathbf{q}_{1/2}$での粒子間の力から得られる加速度$\alpha_{1/2}$を使うことで、時間に対して２次のオーダーの精度をもつΔt/2遅らせた位置$\mathbf{q}_0$を求めることができる。

$$\mathbf{q}_0 = \mathbf{q}_{1/2} - \frac{\Delta t}{2}\mathbf{v}_0 - \frac{\Delta t^2}{8}\alpha_{1/2} \tag{2.17}$$

この時、加速度$\alpha_{1/2}$は、本来$\alpha_{1/4}$であるべきだが、時間に対して２次のオーダーの精度では、それらに差はない。同様にして、粒子の速度$\mathbf{v}_0$と位置$\mathbf{q}_0$からΔt/2進めた

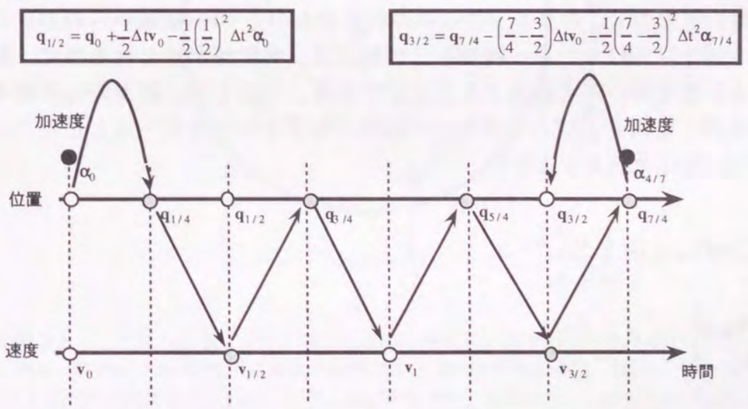
位置$\mathbf{q}_{1/2}$は、次のようにして求めることができる。

$$\mathbf{q}_{1/2} = \mathbf{q}_0 + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{v}_0 + \frac{\Delta t^2}{8}\alpha_0 \tag{2.18}$$

シミュレーションの中では、粒子の加速度を計算すると同時にΔt/2遅らせた粒子の位置座標を計算して、常に速度と同時刻の位置のデータを持つようにしている。

"SCOPE"では、通常、プラズマの集団現象を追いかけるために、$\Delta t \sim \frac{1}{20}\omega_p^{-1}$程度の時間刻み幅を使用している。しかし、電子ーイオンの２成分プラズマ、薄いプラズマは、非常に近くに他の粒子が存在することがあるので（１成分強結合プラズマは、排除体積が十分大きいのでこのようなことは起こらない。）、Δtの間に受ける力が大きく変化し、この時間刻み幅では、粒子の軌道を正しく計算できなくなる。"SCOPE"では、このような場合、そのような粒子の軌道を正しく計算するために、その粒子とその周囲の粒子を一つのグループにして、そのグループのみ時間刻み幅をより細かくして計算する手法（局所可変時間ステップ法）[22, 24]を使っている。例えば、ある粒子グループについての時間発展を行うときは、その粒子グループ内の粒子の位置と速度は、Fig.2-5(a)、(b)のようにして更新される。この時、このグループ以外の粒子からの力やPM領域からの力は、細かい時間刻みの間一定と扱う。時間刻み幅の縮小率が偶数と奇数で異なるので、時間刻み幅を$\Delta_f t = \Delta t/2$にした(a)場合と$\Delta_f t = \Delta t/3$にした(b)場合ついて説明する。

(a) $\Delta_f t = \Delta t/2$



(b) $\Delta_f t = \Delta t / 3$

$$q_{1/3} = q_0 + \frac{1}{6}\Delta t v_0 + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{6}\right)^2 \Delta t^2 \alpha_0$$

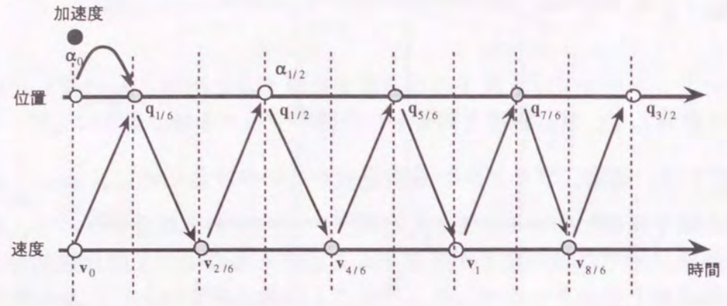


Fig.2-5　局所可変時間ステップ法において時間刻み幅を細かくした場合の時間発展の模式図。(a)は$\Delta_f t = \Delta t / 2$、(b)は$\Delta_f t = \Delta t / 3$の場合を示す。白丸が、$\Delta t$の時間刻みでleapfrog法＋２次精度の時間前進と後退で定義される粒子の位置と速度と速度と同時刻の位置であり、灰色の丸が、時間刻みを$\Delta_f t$にしたときに、対象となる粒子グループのみに定義される位置と速度である。ここで、添字は、本来の時間刻みΔtを１ステップと考えた時間ステップ数を表す。初期と最終の位置座標は、前段落で述べた時間後退の手法を使っている。

局所可変時間ステップ法において、時間刻みを細かくする粒子グループ、および、時間刻み幅$\Delta_f t$は、次のようにして評価している。時間刻み幅を小さくしたときの誤差は、leapfrog法や２次精度の時間前進と後退などの差分上生じる誤差と細かい時間刻みの間一定の力（このグループ以外の粒子からの力やPM領域からの力）と扱うことによる誤差に分けられる。純粋な２体問題は、解析解が得られるので、解析解と差分による数値解の差を評価することができる。このとき、細かい時間刻みの粒子ペアの速度、位置およびこのグループ以外の粒子からの力を一定としたことによる速度の誤差率は次のようになる。

$$\left|\frac{\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_{1\mathrm{anal}}}{\mathbf{v}_1}\right| = \Delta_f t^3 \frac{1}{12}\frac{\alpha_0^2}{q_0 v_0},$$
$$\left|\frac{\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_{1\mathrm{anal}}}{\mathbf{q}_1}\right| = \Delta_f t^3 \frac{1}{24}\frac{\alpha_0 v_0}{q_0^2}, \qquad (2.19)$$
$$\left|\frac{\mathbf{v}_{2\mathrm{off}} - \mathbf{v}_2}{\mathbf{v}_0}\right| = \Delta t^2 2\frac{\alpha_0}{q_0}.$$

ここで、添字のanalとoffは、それぞれ解析解および粒子からの力を一定にした場合の量を表す。また、ここでは、全て重心系で考えており、q_0とv_0は、それぞれ、粒子間距離と速度差の大きさである。まず、許容できる最大誤差εから、第３式から粒子グループを決定する半径q_0を次のようにして決める。

$$q_c = \Delta t^2 2\frac{\alpha_0}{\varepsilon}. \qquad (2.20)$$

粒子グループは、本来3 Δt/2時間ステップ（$\Delta_f t$で時刻を進める時間）に半径q_0内に入る全て粒子であるべきである。そのことを近似的に考慮するために、3 Δt/2時間後の粒子位置をΔtの時間刻み幅で予想してΔtのどちらか一方でも半径Δt内にはいる粒子全てを粒子グループとして考えることにしている。Fig.2-6のように模式的に書くと、i粒子とペアを組む粒子グループに入るのは、j1、j2、j3、j4である。

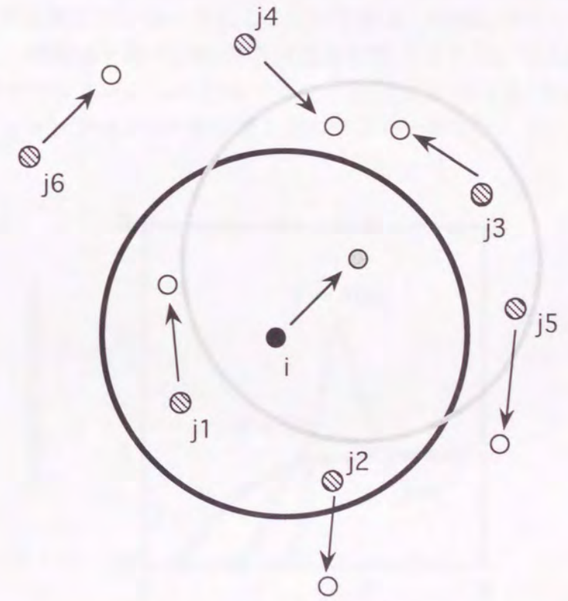


Fig.2-6　i粒子とペアを組む粒子グループの決定方法の模式図。太い実線の円および、黒丸、斜線の丸は、それぞれ、時刻t=0の時のi粒子に対する粒子グループ決定半径および、i粒子とその近傍の粒子（j1～j6）である。太い灰色の円、白丸、灰色丸は、それぞれ、時刻t=3/2 Δtの時のi粒子に対する粒子グループ決定半径および、i粒子とその近傍の粒子（j1～j6）である。

次に、上で決められた粒子グループ内のすべての粒子ペアに対して、時間刻み幅 $\Delta_f t$ を次のようにして決める、グループ内粒子ペアの中の最小値を採用し、Fig.2-5の方法で時間発展させる。

$$\Delta_f t = \min\left\{ \frac{12\varepsilon q_0 v_0}{\alpha_0^{\,2}} , \frac{12\varepsilon q_{3/2} v_{3/2}}{\alpha_{3/2}^{\,2}} , \frac{24\varepsilon q_0}{\alpha_0 v_0} , \frac{24\varepsilon q_{3/2}}{\alpha_{3/2} v_{3/2}} \right\}. \qquad (2.21)$$

すなわち、時刻0、$3\Delta t/2$のそれぞれの位置及び速度の誤差がεを越えないように決めるのである。

このような局所可変時間ステップ法による粒子の追跡方法は、局所的に高密度な場合や非常に速度の大きい粒子が生成するような、強度非平衡状態のシミュレーションの計算時間を節約することにもなる。実際、第３章の剪断流（強度非平衡状態）の大規模粒子シミュレーションでは、この能力を十分生かすことで、短い計算時間で正確にシミュレーションすることができた。

§2-5　SCOPEの初期値作成と正当性

物理的に妥当な初期値から粒子シミュレーションを始めるために、熱平衡状態の粒子の位置と速度を作らなければならない。特に、強結合プラズマの粒子シミュレーションでは粒子相関が大きいので、いかに物理的に妥当な初期値を使うかがシミュレーションに大きく影響する。熱平衡状態に近い仮の初期値を人工的につくり、その初期値から粒子シミュレーションを時間発展させることによってより熱平衡状態に近づけて物理的に妥当な初期値を作る。最終的な初期値を作るためのシミュレーション時間は、運動量と動経分布関数が十分定常と見なせる程度、すなわち、衝突周波数の数倍から十数倍計算すればよい。仮の初期値は、粒子を最密六方格子の格子点に配置し、速度をエネルギー空間でのマックスウェル分布を各群の粒子数が同じになるように６群に分けて、それぞれの群に対して正２０面体の面心方向に与える。この配置は、温度ゼロ極限のエネルギーの最低状態であり、この状態に速度を与えて、シミュレーションの時間発展を行うことは、結晶から融解しながら平衡状態に達する過程を模擬していると考えることができる。4000シミュレーションステップ（$200\omega_p^{-1}$）後、運動量と動経分布関数は定常状態になった。運動量分布関数は、熱平衡状態を示すマックスウェル分布であり、動経分布関数は、Fig.2-7のようにモンテカルロシミュレーション[6～8]の値を極めて良い一致を示した。

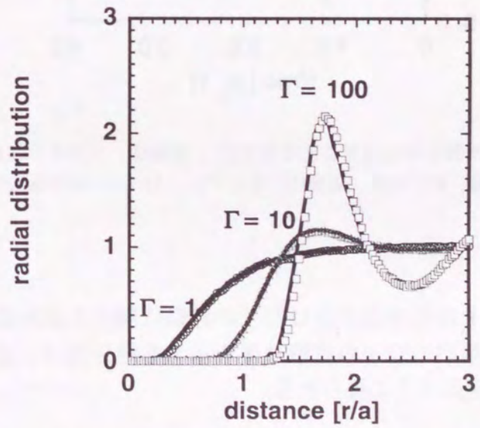


Fig.2-7　SCOPEによって計算された動経分布関数。横軸は、粒子球半径によって規格化された粒子間距離である。丸、三角、四角は、それぞれ、Γ=1,10,100のSCOPEによるシミュレーションの結果を表し、実線は、モンテカルロシミュレーション[6-8] の結果を表す。

これらの結果は、十分熱平衡に近い初期値が得られたということだけでなく、シミュレーションコードが十分適正に動作することを保証するものでもある。

粒子シミュレーションの最大の特徴は、これらのような静的な量だけでなく動的な量を観測できる点である。粒子の衝突現象と直接つながりを持つ動的な量である速度自己相関を計測した。Fig.2-8に見られるように速度自己相関関数は、薄いプラズマでは、一様に指数関数的に減衰していくが、強結合プラズマでは、減衰の途中で何度か極大値を持つ[2～4]。この振る舞いは、衝突散逸過程とプラズマの集団協調現象の競合状態を示し、強結合プラズマ独特の現象である。

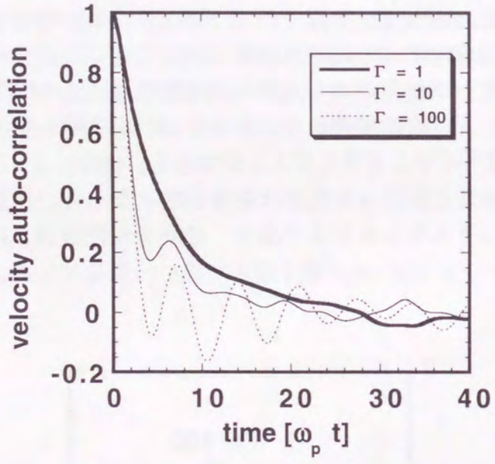


Fig.2-8　SCOPEによって計算された速度自己相関関数。横軸は、プラズマ振動数によって規格化された時間である。太い実線、細い実線、破線は、それぞれ、Γ=1,10,100のSCOPEによるシミュレーションの結果を表す。

速度自己相関関数は、その周波数成分は粒子の移動に関する線形応答関数とつながりがある。周波数ゼロ極限の粒子の拡散速度を示す拡散係数は、速度自己相関関数の長時間積分を使って次のように得られる。

$$D = \frac{1}{3}\int_0^\infty \langle \mathbf{v}(0)\cdot\mathbf{v}(t)\rangle dt . \qquad (2.22)$$

ここで $\mathbf{v}$は、粒子の速度を表し、"<>" は、アンサンブル平均を意味している。ちなみに、衝突周波数νと平均自由行程ℓは、拡散係数と次のような関係がある。

$$\nu = \frac{T}{3mD} \quad , \quad \ell = \frac{3D}{v_{th}} = \frac{v_{th}}{\nu} \quad , \left(v_{th} \equiv \sqrt{\frac{T}{m}} \right). \qquad (2.23)$$

§2-6　まとめ

本章では、粒子シミュレーションで使用した高密度プラズマ粒子コード"SCOPE"について説明し、さらにその正当性を示した。以下に、各節ごとの内容と結論についてまとめる。

第２節では、本論文における研究対象である荷電粒子多体系の一般的性質について記し、特徴的な無次元量としてクーロン結合定数Γと電子縮退度θを導入した。

第３節では、量子力学的効果が無視できない高密度プラズマの粒子シミュレーションを実行する時に採用したC.Deutschが提唱した半量子論的（量子力学的なトンネル効果とパウリの排他効果を考慮した）２体ポテンシャルについて説明した。

第４節では、荷電粒子多体系の粒子シミュレーションで使用した高精度高速強結合プラズマ粒子コード"SCOPE"について説明した。特に、クーロン力を近接粒子間は粒子ー粒子間で力を直接計算し、離れた粒子間は粒子ー格子間の相互作用として扱う高精度高速計算手法（PPPM法）と近接粒子の相互作用を高精度で計算する局所可変時間ステップ法について、その原理と計算精度を述べた。

第５節では、"SCOPE"がクーロン相互作用の長距離性と粒子間相関を正しく取り扱えていることを動径分布関数と速度自己相関関数を計測することにより確認した。

参考文献

1. S. Ichimaru, *Basic Principles of Plasma Physics, A Statistical Approach*, (W. A. BENJAMIN, INC. Publishers, Massachu setts, 1973).
2. S.Ichimaru et al., *Statistical Physics of Dense Plasmas: thermodynamics, transport coefficients and dymanic correlations*, (North-Holland Physics Publishing, Amsterdam 1987).
3. S.Tanaka and Setuo Ichimaru, Phys.Rev. A **34**, 4163 (1986) .
4. 古河裕之 、「レーザー生成高温･高密度プラズマに関する理論的研究」、（大阪大学大学院工学研究科博士論文、1991）.
5. L.D.Landau and E.M.Lifshitz, *Quantum Mechanics*, (Pergamon Press, 1992) .
6. S. G. Brush, H. L. Sahlin and E.Teller. J.Chem.Phys. **45**, 2102 (1966).
7. J. P. Hansen, Phys.Rev. A. **8**, 3096 (1973).
8. W.L.Slattery et al. Phys.Rev.A. **26**, 2255 (1982).
9. 徳満　昌之、「１成分ミクロ３次元粒子コードの開発と超高密度プラズマ中のシアーフローシミュレーション」、（大阪大学大学院基礎工学研究科修士論文、1992）.
10. 上島　豊、「高密度プラズマ中におけるケルビン・ヘルムホルツ不安定性の３次元粒子シミュレーション」、（大阪大学大学院工学研究科修士論文、1994）.
11. S.Takeno, *Dynamical Problems in Soliton Systems*, (Springer-Verlag, Berlin, 1985).
12. S.Kambayashi and J.Chihara, Phys. Rev. E. **50**, 1317 (1994).
13. T.Dunn and A.A.Broyles, Phys. Rev. **157**, 156 (1967).
14. C.Deutsch, Phys.Lett. **60**A, 317 (1977).
15. J.P.Hansen and I.R.McDonald, Phys.Rev.A **23**, 2041 (1981).
16. C.Deutsch, M.M.Gombert and H.Minoo, Phys. Lett. **66**A, 381 (1987).
17. C.K.Birdsall, and A.B.Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulation*, (McGraw-Hill, New York, 1985).
18. 田中貫、山本良一、「計算物理と計算化学」、(海文堂, 1988).
19. P.P.Ewald, Ann.Phys. **64**, 253 (1921).
20. R.W.Hockney and J.W.Eastwood, *Computer Simulation using Particles*, (McGraw-Hill, New York, 1981).
21. K.Nishihara, H.Furukawa, M.Kawaguchi and Y.Abe, *Japanese Supercomputing*, (Springer-Verlag, New York, 1988).
22. K. Nishihara, Kakuyugo Kenkyu **66**, 253 (1991).

23. H. Furukawa and K. Nishihara, Phys.Rev.A **42**, 3532 (1990).
24. 安井秀一、「３次元強結合プラズマ粒子コードの高精度化と高密度プラズマの非線形電気電導度に関する研究」、(大阪大学大学院工学研究科修士論文、1991).

第３章
１成分高密度プラズマ中の微視的剪断流不安定性

§3-1 はじめに

慣性閉じ込め核融合[1, 2]の現在の実験[3]では、固体密度の６００倍、数千万度の温度が達成されており、このような条件下のプラズマは、粒子間の相関が強く、理想プラズマとして扱うことができない。このようなプラズマは液体的描像を示し、強結合プラズマ[4]と呼ばれている。慣性閉じ込め核融合では、温度の比較的低い（電子がフェルミ縮退した）高密度プラズマが燃料とプッシャーとの境界面付近で生じる。この領域では、スタグネーション・フェーズに密度の低い燃料が密度の高いプッシャーを支えることになるのでレーリー・テーラー不安定性が起こる[5, 6]。レーリー・テーラー不安定性とは、軽い流体で重い流体を支えようとするときに生じる不安定性であり、わずかな不均一性があると、重い流体は下に沈もうとし軽い流体は上に浮かぼうとする。スタグネーション・フェーズの後半になってレーリー・テーラー不安定性の非線形成長が進むと境界面の変形が増大してくる。それに伴って、境界面の両側で超音速の剪断流が生じ、ケルビン・ヘルムホルツ不安定性（剪断流不安定性）[6～9]が起こる。ケルビン・ヘルムホルツ不安定性とは、この様に流体が境界に平行な相対運動をすることにより生じる不安定性である。

この流体的に不安定な領域での燃料とプッシャーとのミキシングの量や、粘性による流体運動エネルギーから熱エネルギーへの変換率は、燃料の燃焼率に大きな影響を及ぼす。例えば、粒子の拡散係数や流体的ミキシングが非常に大きい場合は燃料のほとんどが燃焼しないことになる。また逆に、粘性係数が十分大きく流体の運動エネルギーが効率良く熱エネルギーへ変換されると燃料の燃焼効率の向上に寄与することになる。

高密度プラズマは中性流体や理想プラズマとは異なり、イオン間に（熱エネルギーと比較して）非常に大きなクーロンエネルギーを蓄積している。その結果、高密度プラズマは、中性流体や理想プラズマに対して静的にも動的にも大きく性質が変わる可能性がある。実イオンシミュレーションは、ミクロスコピックで複雑な系における動的な現象の解析に極めて有効である。高密度プラズマでは、流体現象がミクロなスケール（平均イオン間距離の数十倍）で生じる[10～13]。このようなスケールでは、粒子の離散性に起因する揺らぎが流体運動に関して有限の大きさを持つよう

になる。このようなスケールにおいて系が流体力学的に不安定になると、単純に流体力学的な効果のみで現象が決定されるとは限らない。通常、流体系では、離散性を起源とする揺らぎは存在しないと考えている。したがって、流体力学では、粒子の揺らぎによって不安定性が成長することは考えていない。しかし、現実の系では、粒子の揺らぎによって不安定性が成長する可能性がある。ここに、流体力学的な不安定性を実イオンシミュレーションによって解析を行う意義と必要性がある。このようなスケールで高密度プラズマ中での流体力学的不安定性を調べた例は過去になく、このようなアプローチは重要であると考えることができる。流体運動を実イオンシミュレーションによって解析するためには、多数の粒子と大きな時間ステップ数が必要であり、使用する粒子コードには高精度高速スキームが必要とされる。本研究では、高密度プラズマ中におけるミクロスケールのケルビン・ヘルムホルツ不安定性を評価するために、第２章で述べた高精度高速スキーム（PPPM法）を使った実イオン１成分プラズマ粒子シミュレーションを行った。以下に、本章の構成と概要を述べておく。

第２節では、１成分プラズマ流体の流体方程式を線形化して、有限速度遷移幅をもつ剪断流に対してケルビン・ヘルムホルツ不安定性の線形成長率を示す。また、遷移幅が粘性によって時間的に大きくなっていく場合における不安定性の線形成長過程を準静的仮定を使って評価する。

第３節では、分子動力学的手法により高密度１成分プラズマ中の速度自己相関関数、平均2乗変位を観測し、熱力学的平衡状態での輸送係数を評価する。次に、熱エネルギーに比べて大きな流れのエネルギーを持つ速度の剪断流の粒子シミュレーションを行ない、1成分高密度プラズマの緩和過程と輸送過程について議論する。その結果を使って緩和時間、輸送係数の大きさを評価する。また、粒子の初期値のアンサンブルの差異に対する不安定性の成長の鋭敏性に関して考察する。

第４節では、不安定境界面に微少な擾乱を人工的に入れた初期値を使って粒子シミュレーションを行う。ミクロスケールのケルビン・ヘルムホルツ不安定性の線形成長、非線形成長、渦生成とそれに伴うポテンシャル井戸の構造について観測し、その結果について考察する。

§3-2　１成分プラズマ流体の剪断流不安定性の線形解析

§3-2-1　有限遷移幅の剪断流不安定性の線形成長率

この節では、１成分プラズマ流体の有限遷移幅を持つ剪断流におけるケルビン・ヘルムホルツ不安定性の線形成長率について考察する。Xは主流の方向、Yは剪断流の勾配の方向である２次元流を考える。Fig.3-1のように主流速度のY方向の空間プロファイルが誤差関数型、$V_x(y)=\frac{2V_{x0}}{\sqrt{\pi}}\int_0^{q(y)}e^{-s^2}ds$である剪断流を考える。Fig.3-1のプロファイルは、実際の剪断流において形成される主流速度のプロファイルに非常に近いものである（初期に接線方向の速度の不連続があるとき、粘性によって遷移幅が広がる場合の解析解である）。この主流速度プロファイルにおいて線形固有方程式を解析的に解くことはできないので数値計算により固有値を求める。Appendix 3-Aに１成分プラズマ流体の基礎方程式とその線形固有方程式について記した。また、以下の節では、主流速度の遷移幅L_Dは、$q(L_D)=1$で定義した。

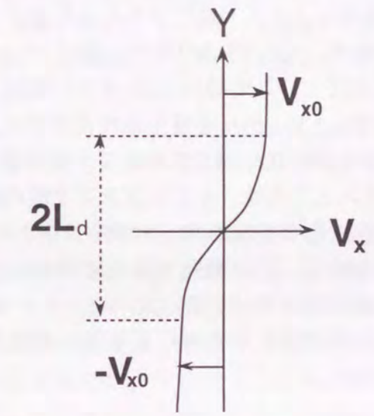


Fig.3-1　粘性流体で初期に接線方向の速度の不連続があるときの主流速度V_xのY軸方向断面の空間プロファイル。縦軸方向は剪断流の方向（Y軸）、縦軸方向は、主流速度の大きさを示している。L_dは、遷移幅を表す。

１成分プラズマ（OCP）流体では、静電場が関与することにより系を決定する重要な無次元パラメーターが存在する。それは、遷移幅とデバイ長の比で表され、遷移幅がデバイ長に比べてどの程度の長さを持つかを示す指標になる。また、１成分プ

ラズマ流体では、中性流体の流体マッハ数に対応する無次元量としての主流速度とプラズマ波の位相速度との比がある。この量をこの節ではOCP-マッハ数と呼ぶことにする。プラズマ波の位相速度とOCP-マッハ数の定義式は次の通りである。

$$C_p(k_x)^2 \equiv \frac{\gamma P_0}{mn_0} + \frac{4\pi n_0 e^2}{mk_x^2}, \quad M_p(k_x) \equiv \frac{v_{xo}}{C_p}. \tag{3.1}$$

プラズマ波の位相速度は、形式的には圧縮性流体の音速に対応するものであるが、波数に対する分散性を持っているところが大きな違いである。もし、OCP-マッハ数が圧縮性流体のマッハ数と物理的にも対応しているならば、完全に安定化する波数とOCP-マッハ数の間に中性圧縮性流体における遷移幅と不安定性の線形成長率の関係（Appendix 3-BのFig.3-B-1）があるはずである。この小節では、1成分プラズマ流体の不安定性の線形成長率を数値計算で求め、OCP-マッハ数がケルビン・ヘルムホルツ不安定性にどのような影響を及ぼすのかを調べた。具体的には、第4節の粒子シミュレーションの結果と比較するために、流体の主流速度を熱速度の2倍に固定して、遷移領域の幅をデバイ長の1、2、5、10倍にして成長率の波数依存性を調べた。Fig.3-2は、主流速度と遷移幅によって規格化された線形成長率の波数依存性であり、遷移幅をデバイ長にした場合、K_xL_dが0.5の所で、幅をデバイ長の2倍にした場合、K_xL_dが0.7の所で完全に安定化し、この時のOCP-マッハ数は、0.84、0.64になることがわかる。Appendix 3-BのFig.3-B-1から中性圧縮性流体がK_xL_dが0.5、0.7で安定化するマッハ数は、およそ0.8～0.85、0.6～0.7であることが分かり、非常に良い対応関係がある。また、K_xL_dが小さいところは、イオンプラズマ波の位相速度の分散性のため中性圧縮性流体のマッハ数に比べてOCP-マッハ数が非常に小さくなる。この結果、全ての線種が重なる、すなわち、広い範囲で非圧縮性流体に似た振る舞いをすることになる。また、遷移領域の幅がデバイ長に比べて小さくなるとOCP-マッハ数は中性圧縮性流体のマッハ数とほぼ等しくなるため中性圧縮性流体と同じように不安定性は低減化（安定化）される。

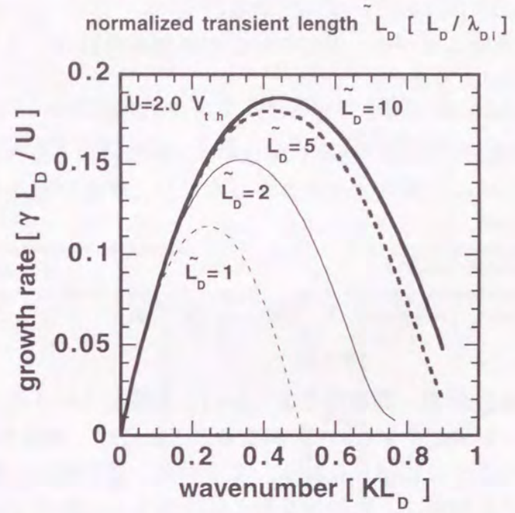


Fig.3-2　1成分プラズマ流体の主流速度が有限遷移幅を持つ場合のケルビン・ヘルムホルツ不安定性の線形成長率の波数依存性。縦軸と横軸は、それぞれ、主流速度と遷移幅 で規格化された成長率と擾乱の波数である。また、線種は、遷移領域の幅とデバイ長 の比を示している。

§3-2-2　速度遷移幅の時間変化を準静的に扱った擾乱の線形成長

粘性が存在するとき、一般的に流体の0次の構造は定常状態にならない（開放系での散逸構造を形成する場合は別である）。例えば、線形成長過程の間に遷移幅が10倍近くも変化する場合などは、前節の議論でもわかるように多くの高波数の擾乱が安定化されていく。逆に非常に低波数の擾乱は、成長率は小さいがほとんど安定化されずに初期の成長率のまま線形成長を続けることになる。このような場合、低波数の擾乱、高波数の擾乱、中間の波数の擾乱のどの波数が時間平均的にみて最も成長するかを評価することは重要である。ここで、0次の非定常過程を簡単に扱うためにいくつかの仮定を設ける。

★初期の速度プロファイルはステップ状と考え、粘性は遷移幅を広げる効果のみで各時間の成長率は非粘性非圧縮極限の線形成長率を使う。（粘性非圧縮極限の線形成長率をAppendix 3-CのFig.3-C-1に示しておく。）
★0次は、時間発展するが、1次（擾乱）への寄与は無視できる。すなわち、時間発

展のオーダーが2次以上のオーダーである。
★1次の線形成長過程は単一モードについてのみ解析を行う。よって、モードカップリングの効果は入らない。

初期に接線方向速度の一様な不連続があるとき、粘性により形成される速度遷移領域の空間プロファイルは、次式で表される（ただし、密度や温度の変化を無視できると考える必要がある。）。

$$\frac{\partial}{\partial t}V_x = \nu\frac{\partial^2}{\partial y^2}V_x \quad \Rightarrow \quad q = \frac{y}{\sqrt{4\nu t}}, \quad V_x = V_{x0}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^q e^{-s^2}ds. \tag{3.2}$$

このとき、νは動粘性係数。遷移幅を$q(L_D)=1$と定義しているので、遷移幅の時間的な広がりは$L_d(t)=a\sqrt{4\nu t}$, a=0.8315 になる。このとき、成長率が0になるまでにかかる時間は、次のように見積もられる。すなわち、遷移幅の効果により安定化が期待されるのに要する時間は、動粘性係数に反比例し、波数の２乗に反比例することがわかる。

$$t_{cut}(K) = \frac{1}{4a^2\nu k^2}. \tag{3.3}$$

時間と擾乱の波数は、以下の式の展開を簡単に表記するため次のように規格化しておく。

$$\tilde{t} = \frac{t}{t_{cut}}, \quad \tilde{k} = kL_D \rightarrow \tilde{t} = \tilde{k}^2. \tag{3.4}$$

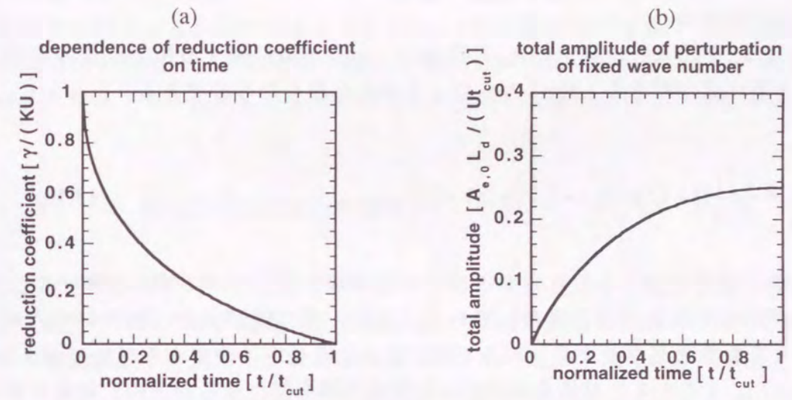
主流速度が有限遷移幅を持つ非粘性非圧縮性流体の線形成長率（Fig.3-2の一番外側の線とほぼ等しい）はよい近似で次式で表される。

$$\frac{\gamma L_D}{V_{x0}} = \frac{\tilde{k}}{2}\left(\tilde{k}^2 - 3\tilde{k} + 2\right). \tag{3.5}$$

式(3.5)の両辺を$\tilde{k}$で割ると、擾乱のある波数に関する線形成長率の減衰係数（無限小遷移幅からの）の時間依存性を表す式ができる。Fig.3-3(a) は、その式を表したものである。

$$\frac{\gamma}{kV_{x0}} = \frac{1}{2}\left(\tilde{t} - 3\sqrt{\tilde{t}} + 2\right). \tag{3.6}$$

Fig.3-3(a)から粘性による遷移幅増大による不安定性の安定化効果は、完全に安定化する時間の約15％の時間で成長率を半減させることがわかる。



Figs.3-3 (a)、擾乱のある波数に関する線形成長率の減衰係数（無限小遷移幅からの）の時間依存性。(b)、ある波数に関する積分成長の時間依存性。全て横軸は、t_{cut}で規格化された時間を表す。

式(3.6)を時刻に関してt_sからt_eまで積分すると、時刻t_sからt_eまでの時間に擾乱がどれくらい成長するか与える。

$$A_{t_s,t_e} \equiv \int_{t_s}^{t_e}\gamma\, dt = \frac{kV_{x0}t_{cut}}{2}\left\{\frac{1}{2}\left(\tilde{t}_e^{\,2} - \tilde{t}_s^{\,2}\right) - 2\left(\tilde{t}_e^{\,\frac{3}{2}} - \tilde{t}_s^{\,\frac{3}{2}}\right) + 2\left(\tilde{t}_e - \tilde{t}_s\right)\right\}. \tag{3.7}$$

式(3.7)にt_s=0、t_e=t_{cut}を代入すると、ある波数に関する総積分成長を表す式ができる。

$$A_{cut,0} = 0.09\frac{V_{x0}}{\nu k}. \tag{3.8}$$

安定化するまでの積算成長は、動粘性係数と波数に反比例し、主流速度の大きさに比例することがわかる。すなわち、長波長の擾乱は、成長率自体は小さいが安定化するまでの時間が長いので、積算成長としては大きくなるのである。式(3.7)にt_s=0を代入し、両辺KUt_{cut}で割ると、ある波数に関する積分成長の時間依存性を表す式がで

きる。Fig.3-3(b) は、その式を図で表したものである。

$$\frac{A_{0,t_e}}{kV_{x0}t_{cut}} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\tilde{t}_e^{\,2} - 2\tilde{t}_e^{\,\frac{3}{2}} + 2\tilde{t}_e\right). \tag{3.9}$$

Fig.3-3(b)から完全に安定化する時間の約15%の時間で積分成長の約50%の成長をしていることがわかる。

式(3.7)に$t_e=t_{cut}$を代入し、両辺KUt_{cut}で割ると、ある波数に関する積分成長の初期時間依存性を表す式ができる。Fig.3-3(c) は、その式を表したものである。

$$\frac{A_{cut,t_e}}{kV_{x0}t_{cut}} = \frac{1}{2}\left\{\frac{1}{2}\left(1-\tilde{t}_s^{\,2}\right) - 2\left(1-\tilde{t}_s^{\,\frac{3}{2}}\right) + 2\left(1-\tilde{t}_s\right)\right\}. \tag{3.10}$$

Fig.3-3(c)から擾乱のはいる前からあらかじめ遷移幅を持っている場合は極めて大きな安定化が期待できることを表わしている。実際、遷移幅が小さいときレイノルズ数は十分大きな数と見なせなく、ここでの評価より成長率は減少する（Appendix 3-CのFig.3-C-1）。すなわち、粘性も実効的に初期遷移幅を持たせるのと同じ効果を持っている。また、遷移幅が小さいときには、遷移幅の時間変化が大きく準静的に取り扱えないことは注意しておく必要がある。

(c)

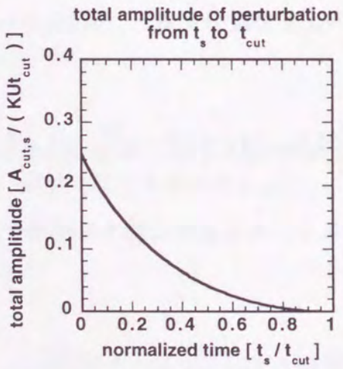


Fig.3-3(c)　ある波数に関する積分成長の初期時間（初期遷移幅）依存性。全て横軸は、t_{cut}で規格化された時間を表す。

§3-3　微視的剪断流の輸送過程の粒子シミュレーション

この節では、"SCOPE"を使って、高密度プラズマの微視的輸送過程のシミュレーションを行い、分子動力学的手法により高密度1成分プラズマ中の速度自己相関関数、平均2乗変位を観測し、熱力学的平衡状態での輸送係数を評価する。次に、熱エネルギーに比べて大きな流れのエネルギーを持つ速度（人工的には擾乱は入れない。）の剪断流の粒子シミュレーションを行ない、1成分高密度プラズマの緩和過程と輸送過程について観測し、緩和時間、輸送係数の大きさを評価する。また、粒子の初期値のアンサンブルの差異に対する不安定性の成長の鋭敏性に関して考察する。

§3-3-1　速度自己相関関数の観測

高密度1成分プラズマの粒子シミュレーションを行い、分子動力学的手法により高密度1成分プラズマ中の速度自己相関関数、平均2乗変位を観測し、熱力学的平衡状態での拡散係数を評価する。シミュレーション条件は以下の通りである。

クーロン結合係数(Γ)	１０
粒子数	４６７２０個（マックスウェル分布）
時間刻み	０．０４６６$\omega_{pi}^{-1}t$
境界条件	全方向周期境界条件
ボックスサイズ	Lx=Ly=４Lz=５０５λ_{Di}=９２a_i
PP格子	１６×１６×４
PM格子	３２×３２×８

速度自己相関関数Ｚ（ｔ）は、

$$Z(t) = \frac{\langle \mathbf{v}_i(t) \bullet \mathbf{v}_i(0) \rangle}{\langle |\mathbf{v}_i(0)|^2 \rangle}. \tag{3.11}$$

と定義される。Γ=10での速度自己相関関数は、一度極大値をとり、時間と共に零に漸近していくことが知られている。また、遠距離相互作用するプラズマ特有の特性時間としてイオンプラズマ振動周期が挙げられる。この振動は、集団協調現象の存在を示しており、その時間では相関が相対的に強くなる。シミュレーションの結果、Fig.3-4は、この特性を反映してイオンプラズマ振動周期の基本周期、２倍周期、３

倍周期の時間において速度自己相関関数が極大点、もしくは、プラトーをもつことがわかる。

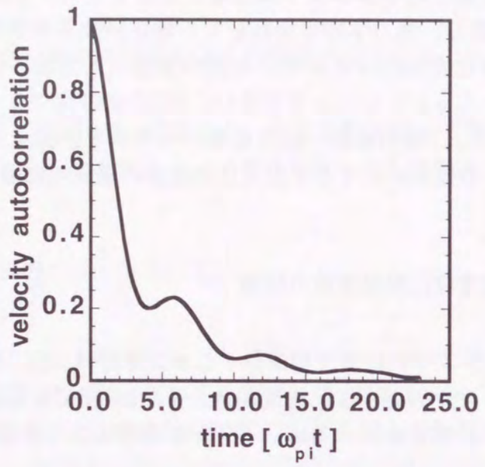


Fig.3-4　Γ=10で速度自己相関。横軸は、プラズマ振動数で規格化された時間を表す。

§3-3-2　　自己拡散係数の評価

一般的にある力学量X(t)とそれに伴う流れX'(t)の間には次の関係が成立する。

$$\lim_{t\to\infty}\frac{1}{2t}\left\langle\left|X(t)-X(0)\right|^2\right\rangle=\int_0^\infty\left\langle X'(t)\cdot X'(0)\right\rangle dt. \tag{3.12}$$

また、久保の線形応答理論によれば、系が平衡から余り離れていないとき輸送係数は、揺らぎX(t)に伴う流れX'(t)の時間相関関数の積分に比例した量として表わされる。拡散係数の場合は、X(t)が粒子の位置であり、X'(t)が粒子の速度、比例係数が1/3である。クーロン結合定数が１０の時の速度自己相関関数をFig.3-4に示す。求められた速度自己相関関数から拡散係数を評価すると、次のようになる。

$$\frac{D_i}{\omega_{pi}a_i^{\,2}}=0.13\pm1.5\times10^{-2}. \tag{3.13}$$

さらに、Fig.3-5に示す粒子の平均２乗変位によって評価すると、よりよい精度で拡散係数が求められ、ほぼ同じ値となった。

$$\frac{D_i}{\omega_{pi}a_i^{\,2}}=0.125\pm8.3\times10^{-3}. \tag{3.14}$$

初等輸送理論によれば拡散係数と平均自由行程ℓは、イオンの熱速度V_{Ti}, イオン-イオン衝突周波数ν_{ii}もちいて、

$$D_i=\frac{v_{Ti}^2}{3\nu_{ii}},\qquad \ell=\frac{v_{Ti}}{\nu_{ii}}. \tag{3.15}$$

と表される。これらの関係式から平均自由行程を求めることができ、Γ=10での平均自由行程は$\ell=2.1a_i$と評価できる。

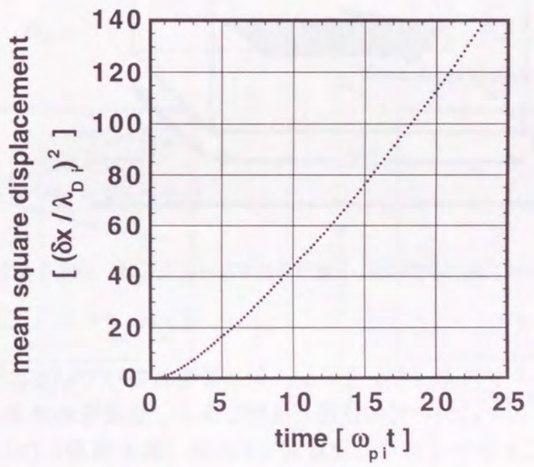


Fig.3-5　Γ=10での粒子の平均２乗変位。横軸は、プラズマ振動数で規格化された時間を表す。縦軸は、デバイ長によって規格化されている。

§3-3-3　シミュレーションの条件

熱エネルギーに比べて大きな流れのエネルギーを持つ速度（人工的には擾乱は入れない）の剪断流の粒子シミュレーションを以下の条件で行った。

流体量観測格子	３２×３２（X､Y方向はPM格子と同じ、Ｚ方向は平均する）
最大主流速度	$V_{x0}=2V_{th}$
速度プロファイル	Y=0においてステップ的に変化（Fig.3-6参照）

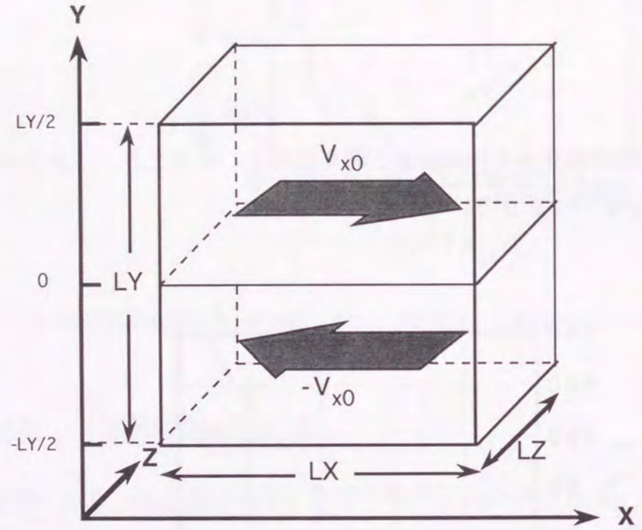


Fig.3-6　シミュレーションBOXの概略図。x軸方向のグレーの矢印は、主流を表す。

本研究では粒子コードによってシミュレーションを行なっているので直接得られる情報は、すべてのイオンについての位置と速度である。必要な物理量の空間分布は、空間的に固定されたメッシュにその物理量をCIC法（線形補間）[10, 11]を使って割り振ることにより求めている。この方法は粒子の位置とメッシュの位置の相対距離により線形補間で割り振る方法である。また、流れは、基本的に２次元流であるので、以下の観測では、常にZ方向については平均してX-Y平面の構造のみを考える。

§3-3-4　システムエネルギーの変換過程

シミュレーションはNVE（粒子数、体積、全エネルギー）一定のシミュレーションであるので、常に、流れのエネルギーと内部エネルギーと荷電中性の破れから生じるポテンシャルエネルギーの和は一定となる。Fig.3-7に、流れのエネルギー、熱エネルギー、粒子間のポテンシャルエネルギーの初期値に対する差の３つの成分に分けて、それぞれのエネルギー密度の時間発展を示した。温度の空間分布の時間発展をFig.3-8に、粒子の平均運動エネルギーの空間分布の時間発展をFig.3-9に示す。Fig.3-8とFig.3-9をみると、温度のあがっているところで粒子の全運動エネルギーが急激に減少しているのがわかる。温度が1.7倍になっているところで、粒子の運動エネルギーが1.5～1.6 T/2 も減少している。すなわち、1.5～1.6 T/2のエネルギーが粒子の運動エネルギーから粒子間のポテンシャルエネルギーに変換されたことになる。熱速度程度の巨視的な速度差を持つ高密度プラズマの非平衡過程では、このように熱エネルギーと巨視的な運動エネルギーと場のエネルギーの変動量が全て同じオーダーになる。特に、過剰内部エネルギーは理想気体では存在しない量で、高密度プラズマ独特のエネルギーであり、このような系のダイナミクスは、理想気体に比べて極めて複雑な競合過程によって決定されることになる。

Fig.3-7

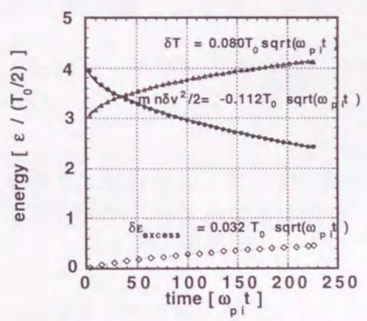


Fig.3-8

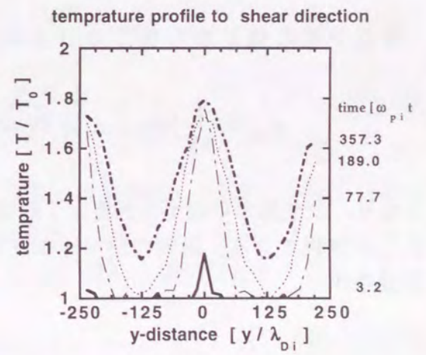


Fig.3-7　システムの熱エネルギー（△）、流体運動エネルギー（●）、過剰内部エネルギー（◇）の時間変化。横軸は、プラズマ振動数で規格化された時間を表し、縦軸は、熱平衡下での１自由度当たりの熱エネルギーによって規格化されている。

Fig.3-8　流体温度の空間プロファイル。横軸は、デバイ長によって規格化された 境界面からの相対位置を表してる。線種は、それぞれ、異なる時間を表している。

Fig.3-9

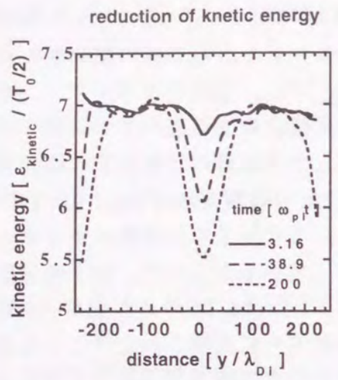


Fig.3-10

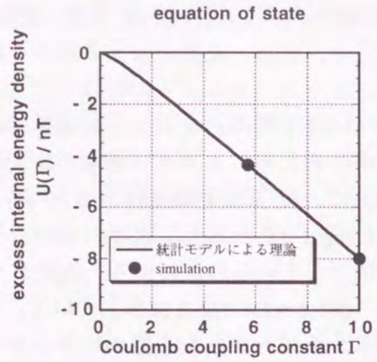


Fig.3-9　粒子の全運動エネルギーの空間プロファイル。横軸は、デバイ長によって規格化された 境界面からの相対位置を表してる。線種は、それぞれ、異なる時間を表している。

Fig.3-10　内部エネルギー密度のクーロン結合定数依存性、すなわち、状態方程式。横軸は、クーロン結合定数を表す。縦軸は、数密度と温度の積で規格化された内部エネルギー密度線を表す。 実線は、統計理論[4]の期待値を表し、黒丸はシミュレーションの結果を示す。

荷電中性の破れから生じるポテンシャルエネルギー密度は、最大地点で、

$$\varepsilon_{pot} = \frac{1}{\Delta V}\int e(n_i - n_e)\phi \, dV = 0.07 n_e T. \tag{3.16}$$

となり、全空間で平均すると更に１桁以上小さくなる。よって、この項はエネルギー的には無視できる。過剰内部エネルギー密度は、動径分布関数を使って次式により定義される。

$$\frac{\varepsilon_{excess}(\Gamma)}{nT} = \frac{n}{2}\int_0^\infty e\phi(r)\{g(r,\Gamma) - 1\}4\pi r^2 dr. \tag{3.17}$$

また、統計理論モデルでは次式により評価できる[4]。

$$\frac{\varepsilon_{excess}(\Gamma)}{nT} = -0.8974\Gamma + 0.9504\Gamma^{\frac{1}{4}} + 0.1896\Gamma^{-\frac{1}{4}} - 0.8148. \tag{3.18}$$

Fig.3-10 からシミュレーションから求めた過剰内部エネルギー密度の実測値と、統計理論モデルの値が良い一致を示すことが分かる。この結果は、この非平衡シミュレーションの正しさを保証するものでもある。

§3-3-5　流体力学手法による輸送係数の評価

擾乱が全く存在しない場合、ケルビン・ヘルムホルツ不安定性は成長せずに拡散過程のみがダイナミクスを支配する。粒子シミュレーションでは、完全に揺らぎを取り除くことは原理的にできないので、できる限り一様な初期値を用いた。ケルビン・ヘルムホルツ不安定性が成長しない場合、明らかに主流方向には速度及び数密度プロファイルは常に一様と見なせる、また、主流と垂直方向の速度が無視できれば、流体力学の方程式は拡散方程式に帰着される。実際のシミュレーションでも主流と垂直方向の速度や密度勾配は拡散過程に比べると無視できるほどのものであった。接触面で速度が不連続に変化している初期状態で、動粘性係数をν、拡散係数をＤとおいて拡散方程式を解析的に解くと、速度及び初期に下半面にあった粒子の数密度プロファイルの時間発展を記述できる。

$$\frac{\partial}{\partial t}V_x = \nu\frac{\partial^2}{\partial y^2}V_x \;\Rightarrow\; q = \frac{y}{\sqrt{4\nu t}},\quad V_x = V_{x0}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^q e^{-s^2}ds. \tag{3.19}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}n = D\frac{\partial^2}{\partial y^2}n \;\Rightarrow\; q = \frac{y}{\sqrt{4Dt}},\quad n = \frac{n_0}{2} - \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^q e^{-s^2}ds. \tag{3.20}$$

シミュレーションでは、初期に下半面にあった粒子の数密度n、速度v_xの空間分布の時間変化は実測できる。シミュレーションの結果をν、Dをフィッティング・パラメーターとして上記の解析解でフィッティングすると実効的な動粘性係数と拡散係数が評価できる。

主流速度が熱速度に比べて十分小さい場合のシミュレーションにおける動粘性係数は、統計理論モデル[4]の期待値と良く一致していた。しかし、主流速度が熱速度の２倍のシミュレーションでは、その約1.3倍の値を示した。この差異が生じる原因は、シアー領域が粘性により温度が高くなっているため、粘性係数自体が温度上昇により値が変化した為と思われる。統計理論モデルによれば、粘性係数は温度が上昇すれば、大きくなる傾向を持っている。そして、シミュレーションの最大温度（Γ）での動粘性係数は、２倍にも達する。

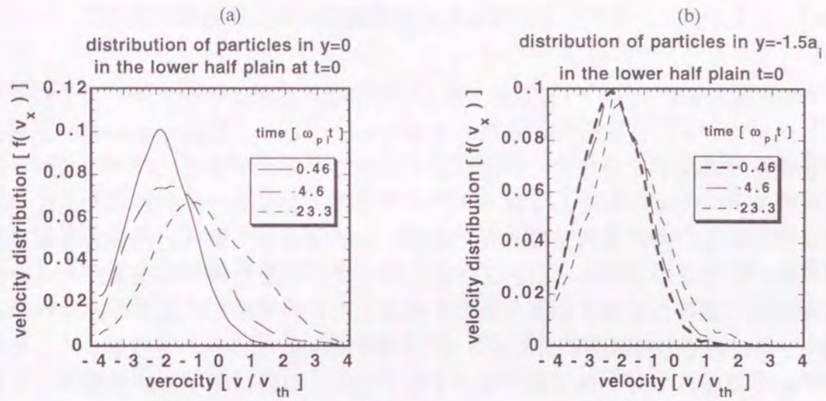
$$T_0 \Rightarrow \frac{\nu(\Gamma = 10)}{a^2\omega_p} = 0.1 \ , \ T_{max} = 1.75T_0 \Rightarrow \frac{\nu(\Gamma = 5.7)}{a^2\omega_p} = 0.2. \qquad (3.21)$$

主流速度が熱速度の２倍のシミュレーションにおける拡散係数は、§3-3-2節において求めた自己拡散係数の約1.8 倍を示した。この原因も、粘性散逸によりシアー領域の温度が高くなり、粘性係数と同様、自己拡散係数も温度上昇により値が大きくなった為と思われる。確かに、シアー境界面において温度が上昇したときに平均２乗変位法により拡散係数を評価すると、２倍程度の拡散係数値の増大が見られた。

§3-3-6　主流速度の熱への緩和過程

シミュレーションのパラメーター領域とシステムサイズで、どの程度の粘性散逸現象が起こるかは、前小節の流体力学的議論で予測ができる。しかし、シアーの境界での熱速度程度の主流速度の熱化（緩和）現象は流体力学的議論で予測ができない。どの程度の時間で流体力学的な扱いができるのか、すなわち熱力学的に準静的な扱いができるのかを明らかにするために、初期の時間にシアー境界付近の速度の分布関数の時間発展を観測した。Fig.3-11(a)は、初期に境界の下半面にいた粒子における境界から±1.5a_iの位置の速度分布関数である。Fig.3-11(b)は、初期に境界の下半面にいた粒子における境界から-1.5a_i～-4.5a_iの位置の速度分布関数である。Fig.3-11(c)は、全粒子における境界から±1.5a_iの位置の速度分布関数である。Fig.3-11 (a)から境界では反対方向の速度方向へ急速に分布関数が広がることが観測される。動画で個々の粒子の動きを観測すると境界を越えて上面へ拡散した粒子は、速やかに反対方向に加速され周りの場に引きずられるように上面の粒子と同化していく。高密度プラズマは、粒子間の相関が強いため気体的ではなく液体的描像を示すのである。

Fig.3-11 (b)から明らかなように、境界から平均イオン間距離程度しか離れていないところであっても、この観測時間程度ではほとんど分布関数は変化しない。すなわち、この時間では熱緩和が起こっている領域が極めて小さいことを示している。それゆえ、この程度の時間での熱化現象や不安定性の成長などは明らかに流体力学的な扱いができない。



Figs.3-11　境界近傍の速度分布関数の時間変化。(a)、初期に境界の下半面にいた粒子における境界から±1.5a_iの位置の速度分布関数の時間変化。(b) 、初期に境界の下半面にいた粒子における境界から-1.5a_i～-4.5a_iの位置の速度分布関数の時間変化。横軸は、熱速度で規格化された粒子の速度を表す。

Fig.3-11 (c)よりプラズマ振動周期の時間で急速な緩和のあとゆっくりとマックスウェル・ボルツマン分布へ近付き$23\omega_{pi}^{-1}t$程度の時間で完全に熱的に平衡状態に達していることがわかる。この時間でFig.3-4で示したように、速度自己相関関数が緩やかに0に収束している。高密度プラズマでは理想プラズマとも中性粒子系とも異なり衝突による緩和と集団的な場との相互作用による緩和が競合していることがわかる。

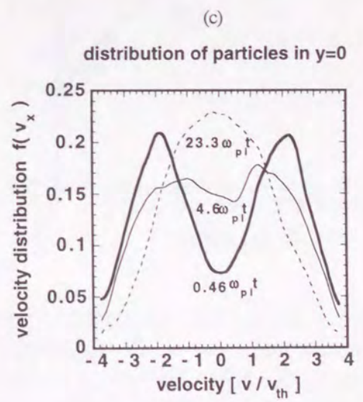


Fig.3-11　(c)、全粒子における境界から±1.5a_iの位置の速度分布関数の時間変化。横軸は、熱速度で規格化された粒子の速度を表す。

§3-3-7　シミュレーションの初期値に関する鋭敏性

次節でも議論するが、粒子の初期値（熱力学的には同じアンサンブル）によってケルビン・ヘルムホルツ不安定性が成長する場合と、ほとんど成長しない場合が現れた。不安定性が成長する場合は、不連続面に対して平行な主流速度のエネルギーが垂直方向のエネルギーに転換して逆カスケード過程により小さな渦から大きな渦を形成する。しかし、不安定性がほとんど成長しない場合は、単に粘性による運動量の拡散現象が起こるのみであった。この結果は、マクロな流体力学現象がミクロな粒子の初期値の揺らぎに強く影響されたため生じたものである。通常の流体力学的不安定性では、粒子の離散性による揺らぎは考慮しない。しかし、実粒子シミュレーションのような極めてミクロスコッピックな系では、実際に粒子の離散性からくる揺らぎが大きく、流体現象に大きく影響してくる場合がある。ミクロスコッピックな系での自発的不安定現象の確率分布を評価するためには、不安定性の種となる揺らぎの時空間確率分布を正確に扱う必要がある。揺らぎの時空間確率分布は位相空間上の軌道不安定性とも密接に関係しているはずであり、非常に興味深い問題である。位相空間上の軌道不安定性と巨視的物理量の関係が十分明らかになっていない現状では、この関係を定量的に理解することは困難であるので、本章ではこの関係を示唆するだけにとどめる。次章で、この関係を理解するための基礎として荷電粒子系の位相空間上の軌道不安定性についての特徴を明らかにする。

3-4　微視的剪断流不安定性の粒子シミュレーション

§3-4-1　線形成長

シミュレーション条件は、§3-3-3の場合と同様である。前節で議論したように、マクロには同一でも、背景の揺らぎのみの自然擾乱（$\sim 10^{-3}\, V_{x0}$）が種となって、不安定性が成長する場合がある。Fig.3-12は、不安定性が成長するある初期値の場合において、それぞれの波数の自然擾乱がどのように成長、減衰していくかを示したものである。プロットは、粒子シミュレーションの結果を表し、線は、非圧縮性粘性流体シミュレーションの結果（粘性係数は、第2節で粒子シミュレーションから求めた実効的な値に設定している。）を表す。この図を見て分かるとおり、初期の時間（$t<50\omega_p$）の擾乱成長は、各モードともに流体シミュレーションより速く成長し、それ以降は流体シミュレーションと同様の成長を示している。また、擾乱の成長が止まる時間は、粒子シミュレーション、流体シミュレーションともに、遷移幅と擾乱の波数の積が1となる時刻であることが確認できた。

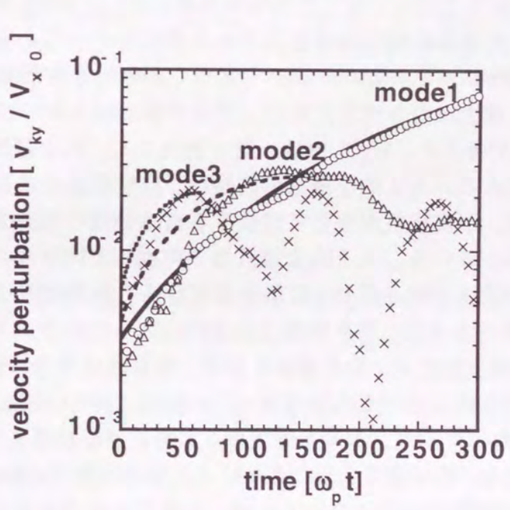


Fig.3-12　背景の揺らぎである自然擾乱のそれぞれの波数成分の時間変化。各プロットは、シミュレーションのシステムサイズでのmode1（○）、mode2（△）、mode3（×）の時間変化（プラズマ振動周期で平均している）を表す。また、それぞれの線は、粘性係数を等しくした2次元中性粘性流体シミュレーションの結果である。横軸は、プラズマ振動数で規格化された時間を表し、縦軸は、主流速度の大きさによって規格化されている。

このように、非常に微視的な剪断流における不安定性が粘性非圧縮性流体の振る舞いと似ていることは興味深い結果である。しかし、微視的な剪断流では粒子の離散性に起因する自然擾乱が存在し、その擾乱が成長するかしないか、すなわち、固有モードになるかどうかが問題となる。このような粒子の離散性に起因する擾乱の振る舞いは、粒子シミュレーションによって明らかにされるべき問題である。Fig.3-12の擾乱の成長過程が粘性非圧縮性流体の振る舞いと似ているのは、自然擾乱が流体力学的な固有モードになったためと考えられる。また、熱速度の2倍にもなる主流速度でも通常のプラズマ流体に見られるような安定化が起こらないのは、高密度プラズマ中におけるケルビン・ヘルムホルツ不安定性の固有関数が非圧縮性流体の固有関数に非常に近いためであると思われる。なぜなら、電子が背景に一様に存在するプラズマでは、イオン流体の圧縮性は荷電中性の破れを意味する。電荷分離を起こすために必要なエネルギーは中性流体の圧縮に比べて非常に大きなエネルギーが必要となる。したがって、フェルミ縮退した高密度プラズマは、実効的に非圧縮性流体に近い振る舞いをする。

次に自然擾乱より十分大きな人工的な擾乱$2.5\times10^{-2}\ V_{x0}$を加えたシミュレーションを行った。第3章の流体力学の不安定性の線形解析とFig.3-12の結果から、粘性により遷移幅が広がると短波長の擾乱は安定化される事が分かっているので、人工的な擾乱の波長は、シミュレーションボックスでとることのできる最大波長505λ_{Di}とした。また、擾乱を最大成長させるために、擾乱の形状はシャープな接触面を持つOCP流体の固有関数で与えた。Fig.3-13は、同一波長で人工的な擾乱と自然擾乱の成長を比較したものである。人工的な擾乱の成長は、自然擾乱の成長とほとんど相似である。この結果は、不安定性が生じて成長する自然擾乱の空間分布は固有関数に非常に近いことを示している。人工的な擾乱は平均振幅と同程度のプラズマ振動を伴い成長し、振幅が最大主流速度の0.07倍程度になると自然擾乱より成長が鈍り始める。これは、振幅が大きくなり非線形成長領域に入ったからである。また、初期の時間（$t<50\omega_p$）の擾乱成長は、自然擾乱と同様に粘性流体シミュレーションより速く成長し、プラズマ振動の振幅も大きくなっていることがわかる。これらの結果より、初期の時間（$t<50\omega_p$）では、流体不安定性とともに運動論的な不安定性も生じているものと考えられる。第3節で示したように、初期の時間（$t<50\omega_p$）の剪断流境界領域は、速度の分布関数は、2つのシフトマックスウェル分布から、熱平衡状態へ緩和していく。この時、剪断流境界領域において、2流体不安定性が生じているはずである。プラズマ振動の振幅が大きくなっているのは、この2流体不安定性が原因であると考えられる。

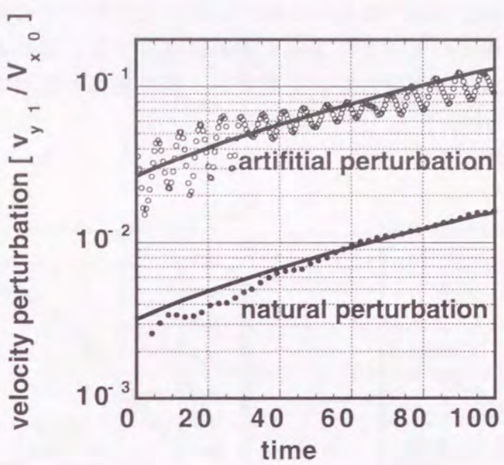


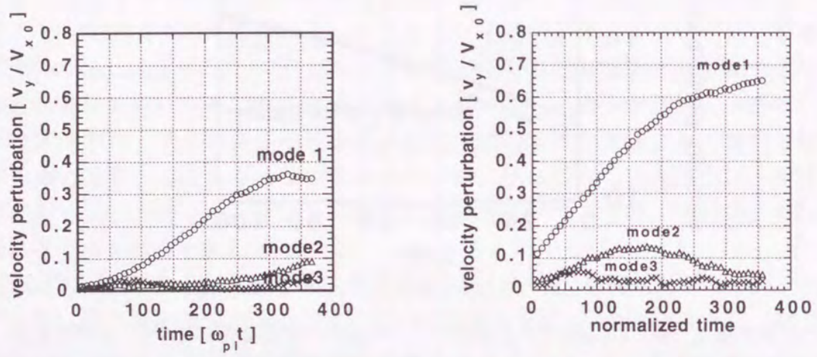
Fig.3-13　自然擾乱（●）のmode1と人工擾乱（○）のmode1の時間変化。ただし、自然擾乱は、プラズマ振動周期で平均している。また、それぞれの線は、粘性係数を等しくした2次元中性粘性流体シミュレーションの結果である。横軸は、プラズマ振動数で規格化された時間を表し、縦軸は、主流速度の大きさによって規格化されている。

§3-4-2　非線形成長

境界面での主流と垂直成分の擾乱が最大主流速度の0.07程度まで成長すると線形成長段階は終わり、そこからは非線形成長段階に入る。流体力学で知られているように線形成長によって生じた主流に対する垂直方向成分の速度が大きくなると剪断流に対して実効的に制動力となる剪断応力が発生する。非線形成長段階は、この制動力が無視できなくなる時点から始まる。この制動力によって、非線形成長は、今までの時間に関して指数関数的な成長から時間に関して比例した緩やかな成長になる。本研究の粒子シミュレーションにおいてもこれらの傾向は非常に類似している。Fig.3-14 (a)は境界面での初期擾乱の大きさが$2.5\times10^{-2}\ V_{x0}$の擾乱の成長過程の結果であり、Fig.3-14(b)は初期擾乱の大きさが$1.0\times10^{-1}\ V_{x0}$の結果である。時間に関して比例的に成長する非線形成長もやがて終わり、次に成長がほとんど止まる飽和領域に入る。Figs.3-14(a)と(b)を比べてみると、明らかに飽和領域に入る時刻と飽和領域での擾乱の大きさに違いが認められる。不安定性の成長率は、主流速度の遷移幅に鋭

敏に影響することは２節で述べた。非粘性流体では、十分時間が経過すると初期値に依存しない準安定構造が形成されるが、粘性流体では時間と共に遷移領域の幅が増大するため、初期の擾乱の大きさによって最終状態が大きく異なる。この初期依存性効果は、非粘性流体では見られない効果であり粘性流体の重要な性質の１つである。

(a)　　(b)



Figs.3-14　(a)は初期擾乱の大きさが2.5×10^{-2} V_{x0}の擾乱の時間変化。(b)は初期擾乱の大きさが1.0×10^{-1} V_{x0}の時間変化。各プロットは、シミュレーションのシステムサイズでのmode1（○）、mode2（△）、mode3（×）の時間変化（プラズマ振動周期で平均している）を表す。横軸は、プラズマ振動数で規格化された時間を表し、縦軸は、主流速度の大きさによって規格化されている。

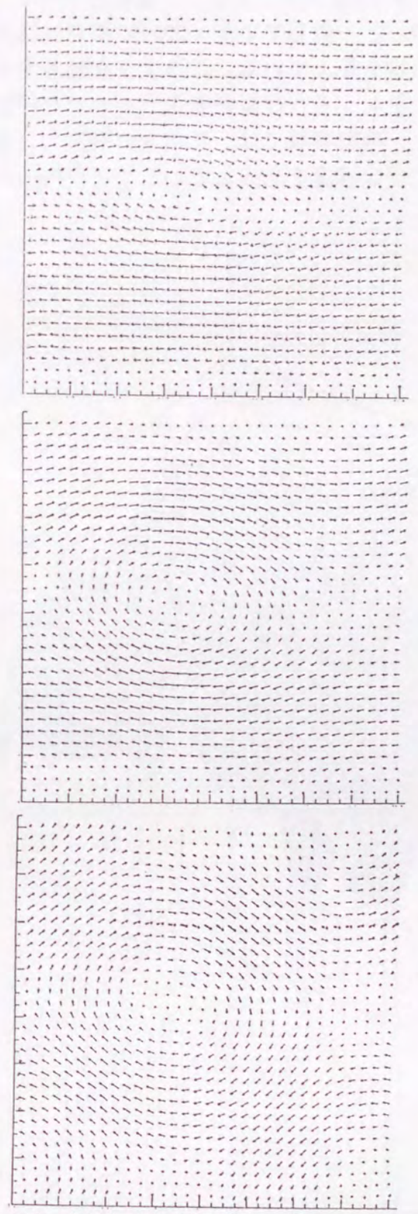
そして前節でも述べたように、流体力学的な揺らぎだけではなく常に存在する粒子の離散性が起源の揺らぎでも不安定性が成長するならば、任意の自然擾乱の初期値と最終状態の相関を調べることは一般的に非常に困難である。Figs.3-14(a)と(b)のシミュレーション結果は、自然擾乱より十分大きい人工擾乱を初期値にしているので、シミュレーションの結果は人工的な擾乱の成長と考えてよい。

シミュレーションの線形成長段階ではクーロンポテンシャルは非圧縮性効果には寄与したが、その効果はダイナミクスには陽に現われてこなかった。それゆえ、高密度プラズマは中性非圧縮性粘性流体と相似な振る舞いをしていた。非線形成長段階では、Figs.3-15(a)～(c)のように境界面に渦が成長し始め、その渦の成長に伴ってクーロンポテンシャル井戸が構造化することが明らかになった。また、不安定性の成長による微視的な渦の形成により粒子の移流の増大が確認された。この渦による移流の増大は、巨視的な拡散係数の増大、すなわち、乱流拡散につながるものである。

(a)

(b)

(c)



Figs.3-15　粒子コードによる渦の成長を示す速度ベクトル場。(a)、(b)、(c)は、それぞれ、時刻91、187、$332\omega_p t$の状態を示している。

ポテンシャルの空間形状をFig.3-16に示した。構造化されたクーロンポテンシャル井戸は、その中心が渦中心と一致していて、井戸の深さは$7k_BT$にもなっているのでダイナミクスに大きな影響を与えている。このような熱エネルギーに比して無視できない大きなクーロンポテンシャルは高密度プラズマでなければ外場なしでは安定には存在し得ない。また、飽和領域では、外向きの慣性力（遠心力）と内向きの電場の力がほぼ釣り合って安定構造を形成していることがFigs.3-17(a)～(c)とFigs.3-18(a)～(c)によってわかる。

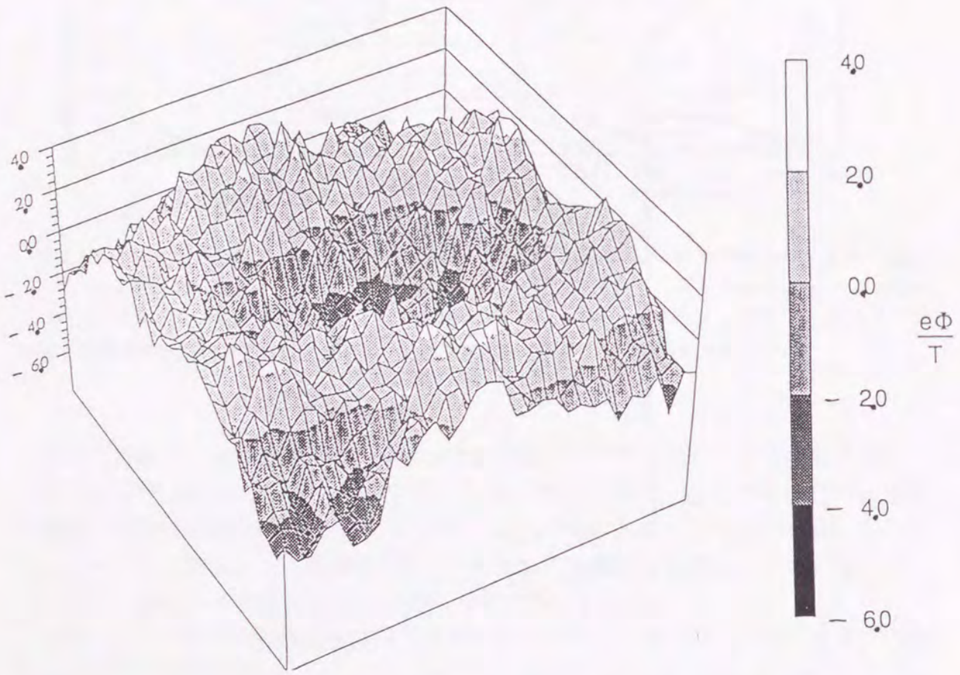
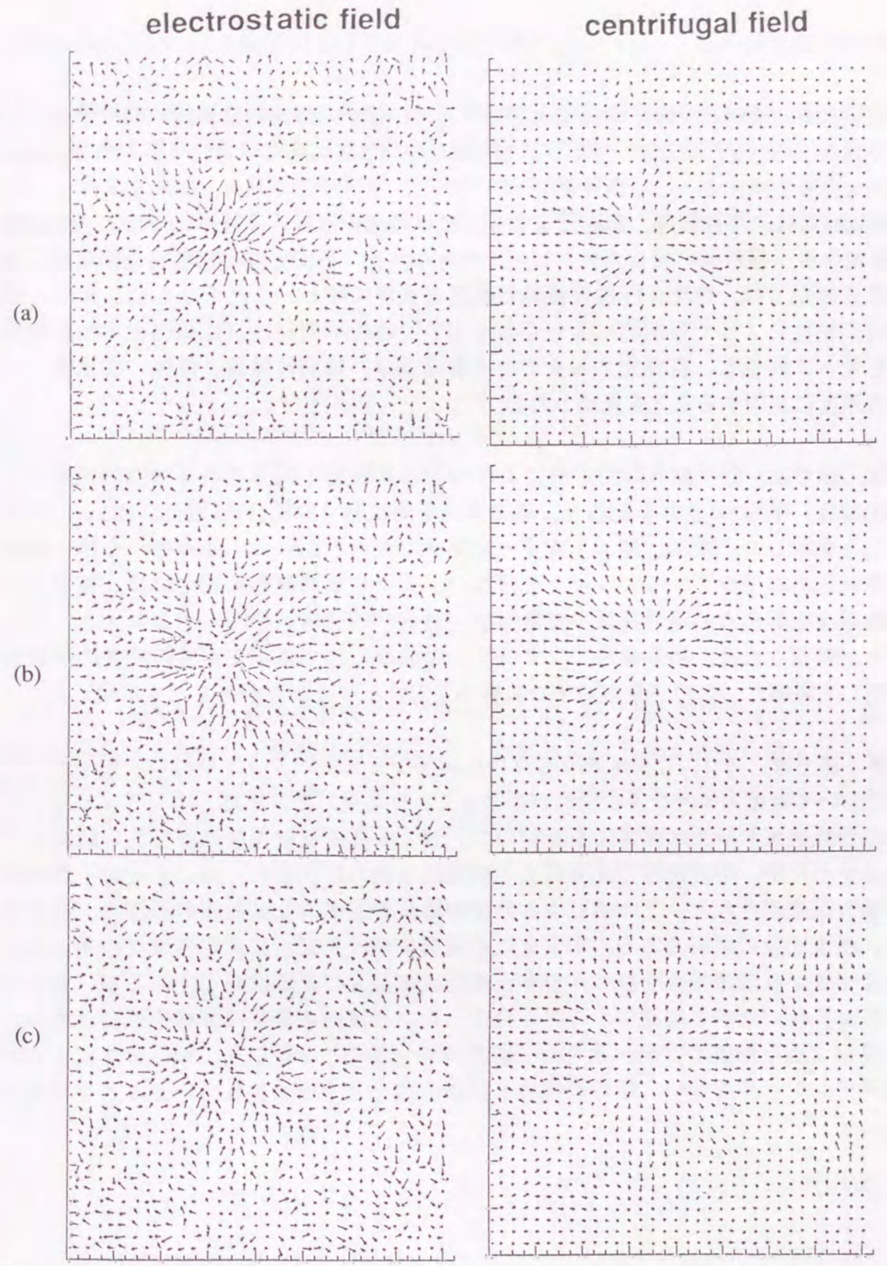


Fig.3-16　渦の成長とともに構造化されたポテンシャル井戸。時刻$256\omega_p t$の状態を示している。



Figs.3-17　渦の成長とともに大きくなる渦中心 から外側に向かう流体運動による遠心力。(a)、(b)、(c)は、それぞれ、時刻91、187、$332\omega_p t$の状態を示している。

Figs.3-18　渦の成長とともに大きくなる渦中心に向かう静電場。(a)、(b)、(c)は、それぞれ、時刻91、187、$332\omega_p t$の状態を示している。

§3-5　まとめ

本章では、強い非平衡状態の１成分プラズマの粒子レベルの巨視現象の粒子シミュレーションについて述べた。以下に、各節ごとの内容と結論についてまとめる。

第２節では、中性流体、１成分プラズマ流体の流体方程式を線形化して、有限速度遷移幅をもつ剪断流に対してケルビン・ヘルムホルツ不安定性の線形成長率を示し、長波長極限では、中性非圧縮性流体の線形成長率に等しいことを示した。また、遷移幅が粘性によって時間的に大きくなっていく時の不安定性の成長過程を準静的仮定を使って評価し、安定化するまでの積算成長は、動粘性係数と波数に反比例し、主流速度に比例することを見出した。

第３節では、分子動力学的手法によりΓ=10の高密度１成分プラズマ中の速度自己相関関数、平均2乗変位を観測し、熱力学的平衡状態での拡散係数Dが$0.125\omega_{pi}a_i^2$であることを示した。次に、熱エネルギーに比べて大きな流れのエネルギーを持つ速度の剪断流の粒子シミュレーションを行ない、ミクロな高速剪断流中では、境界近傍での温度上昇のため粘性係数や拡散係数が熱力学的平衡状態のものより大きくなることが観測された。初期値のアンサンブルの差異に対する不安定性の成長の鋭敏性に関して考察し、この現象が粒子の軌道不安定性とつながりがあるこも示唆した。

第４節では、ミクロな剪断流プラズマの粒子シミュレーションを行い、粒子スケールにおいて流体力学的な不安定性が生じることを発見した。また、本シミュレーションの剪断流スケールは非常に小さいので、粒子の乱流拡散現象は直接的に観測はできなかったが、不安定性の成長により微視的な渦の形成され、渦による粒子の移流の増大が確認された。この渦による移流の増大が巨視的な拡散係数の増大、すなわち、乱流拡散の原因である。不安定性の線形成長、及び、非線形性成長の速さは、主流速度が有限遷移幅を持つ中性非圧縮性流体のものとほぼ同じであるが、プラズマ振動を伴いながら発展することを見出した。長波長の擾乱は非線形成長が進み、大規模な渦を形成するが、その渦は通常のプラズマとは異なり、電荷分離による静電ポテンシャルを伴い、その静電場と流体の遠心力で保持されていることを発見した。

Appendix　3-A.　１成分プラズマ流体の線形方程式

イオン流体が理想気体の状態方程式に従うとし、静電場による力と粘性を考慮した流体方程式は以下の通りになる。ここで、簡単のためイオンの電荷をeとする。また、nはイオンの数密度、n_0は平均数密度（一様な電子の数密度）、v_iはi方向の速度、Pは圧力、ϕはポテンシャル、γは比熱比、η、ζは第１種、第２種粘性係数、eは電荷素量、mはイオンの質量を表す。

$$\frac{\partial n}{\partial t}+\frac{\partial (nv_i)}{\partial x_i}=0. \tag{3A.1}$$

$$\frac{\partial v_i}{\partial t}+v_k\frac{\partial v_i}{\partial x_k}=-\frac{1}{nm}\frac{\partial P}{\partial x_i}+\frac{1}{mn}\frac{\partial \sigma'_{ik}}{\partial x_k}+\frac{e}{m}\frac{\partial \phi}{\partial x_i}. \tag{3A.2}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t}+v_i\frac{\partial P}{\partial x_i}=\gamma P\frac{\partial v_i}{\partial x_i}+(\gamma-1)\sigma'_{ik}\frac{\partial v_i}{\partial x_i}. \tag{3A.3}$$

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial {x_i}^2}\right)=-4\pi e(n-n_0). \tag{3A.4}$$

$$\sigma'_{ik}=\eta\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k}+\frac{\partial v_k}{\partial x_i}-\frac{2}{3}\delta_{ik}\frac{\partial v_j}{\partial x_j}\right)+\varsigma\delta_{ik}\frac{\partial v_j}{\partial x_j}. \tag{3A.5}$$

式(3A.1)～(3A.5)は一般的な表式であり複雑なので、第２種粘性係数を0とし、第１種粘性係数を定数として簡略化を行う。第１種粘性係数を質量密度で割ったものを動粘性係数νと書くことにする。また、ケルビン・ヘルムホルツ不安定性は、基本的に２次元流であるので、方向はx、yの２つに限定する。

$$\frac{\partial n}{\partial t}+\frac{\partial nv_x}{\partial x}+\frac{\partial nv_y}{\partial y}=0. \tag{3A.6}$$

$$\frac{\partial v_x}{\partial t}+v_x\frac{\partial v_x}{\partial x}+v_y\frac{\partial v_x}{\partial y}=-\frac{1}{mn}\frac{\partial P}{\partial x}-\frac{e}{m}\frac{\partial \phi}{\partial x}+\nu\left\{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)v_x+\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2}\right\}. \tag{3A.7}$$

$$\frac{\partial v_y}{\partial t}+v_x\frac{\partial v_y}{\partial x}+v_y\frac{\partial v_y}{\partial y}=-\frac{1}{mn}\frac{\partial P}{\partial x}-\frac{e}{m}\frac{\partial \phi}{\partial y}+\nu\left\{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)v_y+\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2}\right\}. \tag{3A.8}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t}+v_x\frac{\partial P}{\partial x}+v_y\frac{\partial P}{\partial y}=-\gamma P\left(\frac{\partial v_x}{\partial x}+\frac{\partial v_y}{\partial y}\right)$$
$$+(\gamma-1)\frac{\nu}{mn}\left\{\frac{4}{3}\left(\frac{\partial v_x}{\partial x}-\frac{\partial v_y}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial v_x}{\partial y}+\frac{\partial v_y}{\partial x}\right)^2\right\}. \quad (3A.9)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\phi=-4\pi e^2(n-n_0). \quad (3A.10)$$

全ての物理量を0次と1次の項の和として展開し、0次のx方向偏微分を全て0にして0次に関する式を作る。

$$n=n_0+n_1、\ v_x=V_{x0}+v_{x1}、\ v_y=v_{y1}、$$
$$P=P_0+P_1、\ \phi=\phi_0+\phi_1. \quad (3A.11)$$

0次のx方向微分を全て0にして1次について次の式ができる。

$$\frac{\partial n_1}{\partial t}+v_{x0}\frac{\partial n_1}{\partial x}=-n_0\left\{\frac{\partial v_{x1}}{\partial x}+\frac{\partial v_{y1}}{\partial y}\right\}-v_{y0}\frac{\partial n_1}{\partial y}+v_{y1}\frac{\partial n_0}{\partial y}. \quad (3A.12)$$

$$\frac{\partial v_{x1}}{\partial t}+V_{x0}\frac{\partial v_{x1}}{\partial x}=-v_{y1}\frac{\partial V_{x0}}{\partial y}-\frac{1}{mn_0}\frac{\partial P_1}{\partial x}-\frac{e}{m}\frac{\partial\phi_1}{\partial x}$$
$$+\nu\left\{\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right\}v_{x1}+\frac{\nu}{3}\left\{\frac{\partial^2 v_{x1}}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 v_{y1}}{\partial x\partial y}\right\}. \quad (3A.13)$$

$$\frac{\partial v_{y1}}{\partial t}+v_{x0}\frac{\partial v_{y1}}{\partial y}=-\frac{1}{mn_0}\frac{\partial P_1}{\partial y}-\frac{e}{m}\frac{\partial\phi_1}{\partial y}$$
$$+\nu\left\{\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right\}v_{y1}+\frac{\nu}{3}\left\{\frac{\partial^2 v_{y1}}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 v_{x1}}{\partial x\partial y}\right\}. \quad (3A.14)$$

$$\frac{\partial P_1}{\partial t}+V_{x0}\frac{\partial P_1}{\partial x}=-V_{x0}\frac{\partial P_1}{\partial y}-\gamma P_0\left\{\frac{\partial v_{x1}}{\partial x}+\frac{\partial v_{y1_1}}{\partial y}\right\}$$
$$+2(\gamma-1)\frac{\nu}{mn_0}\left(\frac{\partial v_{x1}}{\partial y}+\frac{\partial v_{y1}}{\partial x}\right)\frac{\partial V_{x0}}{\partial y}. \quad (3A.15)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\phi_1=-4\pi e n_1. \quad (3A.16)$$

粘性を無視すると（$\nu=0$）、$\phi_1, n_1, P_1, v_{x1}, v_{y1}\propto\exp(ik_x x-i\omega t)\cdot f(y)$の形に書けるとすると、上式は、次のようにまとめることができる。

$$\left[\left\{k_x\left(\frac{dV_{x0}}{dy}\right)-D\frac{d}{dy}\right\}\frac{1}{D}\left(\frac{e}{m}\frac{d}{dy}-\frac{1}{mn_0}\frac{d}{dy}\frac{\gamma P}{n_0}\Delta\right)+\left\{\left(\frac{D^2}{n_0}+\frac{\gamma P_0 k_x{}^2}{n_0{}^2}\right)\Delta-\frac{e}{m}k_x{}^2\right\}\right]\phi_1=0. \quad (3A.17)$$

ここで、$D\equiv i(k_x V_{x0}-\omega)$、$\Delta\equiv\dfrac{\left(-k_x{}^2+\dfrac{d^2}{dy^2}\right)}{4\pi}$とした。

主流速度の空間プロファイルが、境界でステップ関数的に変化すると仮定すると、式(3A.17)の固有値は、解析的に求められる。境界の変位$\xi=V_{y1}/D$の連続性を使うと、固有値は、次のようになる。

$$\omega^2=k_x{}^2C_p{}^2\left(M_p{}^2-\sqrt{4M_p{}^2+1}+1\right). \quad (3A.18)$$

ここで、$C_p(k_x)^2\equiv\dfrac{\gamma P_0}{mn_0}+\dfrac{4\pi n_0 e^2}{mk_x{}^2}$、$M_p(k_x)\equiv\dfrac{V_{xo}}{C_p}$とした。

この固有値は、形式的には中性流体のものと同じである。それらが異なる点は、ここで使われている無次元量 M_p（中性流体のマッハ数に対応）が分散性の無い音速ではなく、分散性を持つプラズマ波の位相速度を使って定義されていることである。代表的な擾乱の波長がデバイ長より大きいとき（$k_x\lambda_D<1$）は、擾乱がつくる静電場が圧力勾配の力より大きくなる。 その時、M_pは、中性流体のマッハ数と比較して小さくなる。例えば、擾乱の波数が$k_x\lambda_D<<1$で、熱速度と同程度の剪断流の場合、M_pは、$k_x\lambda_D$と同じオーダーになり、マッハ数は、1程度になる。また、M_pが十分小さいとき、線形成長率は中性の非圧縮性流体の値$Im[\omega]=k_x V_{x0}$に近づく。

Appendix　3-B.　非粘性・圧縮流体の線形成長率[8]

圧縮性流体では、流体の特徴的な速度（主流速度の最大値V_{x0}）と音速C_sとの比で定義されるマッハ数Mが、系の特徴を決める重要な無次元パラメーターである。

$$M = \frac{v_{x0}}{C_s}. \tag{3B.1}$$

この節では、圧縮性流体の線形方程式の固有値、すなわち、不安定性の線形成長率を数値計算で求め、マッハ数がケルビン・ヘルムホルツ不安定性にどのような影響を及ぼすのかを調べた。線種は、それぞれマッハ数を表している。Fig.3-B-1は、主流速度と遷移幅によって規格化された線形成長率の波数依存性であり、圧縮流体のケルビン・ヘルムホルツ不安定性は、マッハ数が小さい極限では、非圧縮性流体の線形成長率に近づき、マッハ数が大きくなると線形成長率の低減化が見られるようになってくることが分かる。（新たな音波モードの発生により不安定になる波数も出現するが、それについては、参考文献[8]参照）。

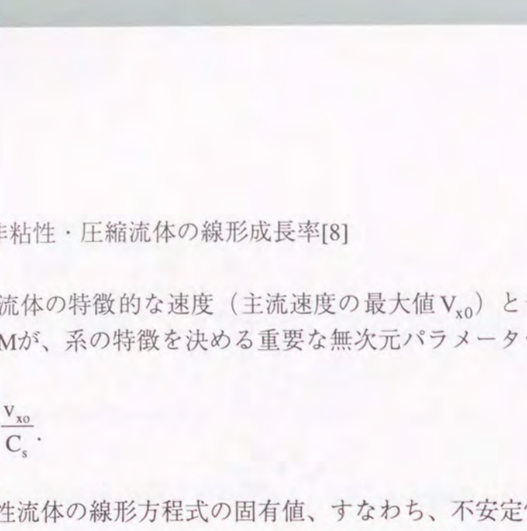


Fig.3-B-1　中性圧縮性流体の主流速度が有限遷移幅を持つ場合のケルビン・ヘルムホルツ不安定性の線形成長率の波数依存性。縦軸と横軸は、それぞれ、主流速度と遷移幅 で規格化された成長率と擾乱の波数 である。また、線種は、マッハ数を示している。

Appendix　3-C.　粘性・非圧縮流体の線形成長率

粘性流体では、レイノルズ数が系を決定する重要な無次元パラメーターである。レイノルズ数とは慣性力と粘性による摩擦力の比をとったものであり。ケルビン・ヘルムホルツ不安定性では、次のように定義する。ここで、ρ、η、V_{x0}、L_dはそれぞれ密度、粘性係数、主流速度、遷移幅である。

$$R \equiv \frac{\rho V_{x0} L_d}{\eta}. \tag{3C.1}$$

擾乱の波長と遷移幅の比、すなわち、遷移幅で規格化された擾乱の波数を一定にして考えると、レイノルズ数が小さくなると一般に安定した流れになり、線形成長率の低減化が見られるようになってくる。また、レイノルズ数が大きい極限では非粘性流体の被圧縮性極限の振舞いに近づく。ここで、注意しなければならないことは、上記の主張は、遷移幅が大きくなると擾乱がより不安定になると言う意味ではないと言うことである。この小節では、圧縮性流体の線形方程式の固有値、すなわち、不安定性の線形成長率を数値計算で求め、レイノルズ数がケルビン・ヘルムホルツ不安定性にどのような影響を及ぼすのかを調べた。Fig.3-C-1は、主流速度と遷移幅とで規格化した擾乱の波数に対する線形成長率である。線種は、それぞれレイノルズ数を表している。この図から小さい波数では、レイノルズ数が33付近でほぼ非粘性流体的な成長率になっていることがわかる。

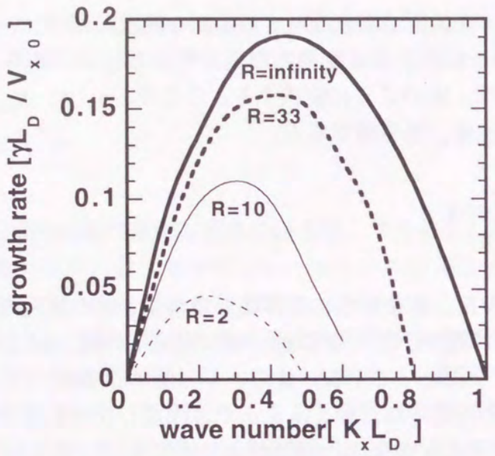


Fig.3-C-1　粘性非圧縮性流体の主流速度が有限遷移幅を持つ場合のケルビン・ヘルムホルツ不安定性の線形成長率の波数依存性。縦軸と横軸は、それぞれ、主流速度と遷移幅 で規格化された成長率と擾乱の波数 である。また、線種は、レイノルズ数を示している。

参考文献

1. James J.Douderstadt and Gregory A. Moses, *Inertial Confinement Fusion*, (John Wiley & Sons, 1982).
2. 核融合研究　第６８巻別冊、(プラズマ・核融合学会誌, 1992).
3. S. Nakai, Bull. Am. Phys. Soc., **34**, 2040 (1989)
4. S.Ichimaru et al., *Statistical Physics of Dense Plasmas: thermodynamics, transport coefficients and dymanic correlations*, (North-Holland Physics Publishing, Amsterdam 1987).
5. S.Chandrasekha, *Hydrodynamic and Hydoromagnetic Stability*, (Dover, New York, 1961).
6. H. Sakagami and K. Nishihara, Phys.Fluids. B. **2**, 2715 (1990).
7. W.Hoton, T.Tajima and T.Kamimura, Phys.Fluid, **30**, 3485 (1987).
8. 河村徹、「非一様爆縮に伴うケルビン･ヘルムホルツ不安定性の理論的研究」、(大阪大学大学院工学研究科修士論文, 1991).
9. T. Terasawa, et al. Phys.Rev.Lett. **68**, 2778 (1992).
10. 徳満　昌之、「１成分ミクロ３次元粒子コードの開発と超高密度プラズマ中のシアーフローシミュレーション」、（大阪大学大学院基礎工学研究科修士論文、1992）.
11. 上島　豊、「高密度プラズマ中における ケルビン・ヘルムホルツ不安定性の３次元粒子シミュレーション」、（大阪大学大学院工学研究科修士論文、1994）.
12. D. C. Rapaport and E. Clementi, Phys.Rev.Lett. **57**, 695 (1986).
13. J. Koplik, et al. Phys.Rev.Lett. **60**, 1282 (1988).

第4章
荷電粒子多体系におけるリアプノフ指数の粒子シミュレーション

§4-1 はじめに

第1章でも述べた通り、位相空間上の軌道の不安定性に関する研究は、エルゴード仮説や3体問題など、現在の統計物理の基礎と深く結びついている歴史的問題である。そして、FPU問題では、完全可積分系に非線形性を加えた系が無条件にエルゴードな系であり統計力学的な扱いができるとは限らないことが示され[1〜5]、3体問題では、周期解や準周期解のような性質のよい解ばかりでなく非常にストカスクティックな解[6〜16]（現在、カオスと呼ばれる運動状態）が含まれることが分っている。

このような統計力学と力学に関する重要な基礎問題において、位相空間上の軌道不安定性とそれらの問題の関係を理解することが重要である。軌道不安定性が十分大きいところで、統計力学的な扱いが可能となり、また、その時に3体問題においてストカスクティックな振る舞いが現れるのである。これらの問題は、定性的には自明であるが、現在でもその定量的な議論は十分にされていない。さらに、この軌道不安定性についての知識を深めることで、統計力学と力学との関係に新たなつながりが生まれることが期待される。本章では、位相空間上の軌道の不安定性の指標であるリアプノフ指数がエルゴード性や巨視現象とどのような関わりを持つ量であり、可能性を秘めているのかを説明し、粒子シミュレーションにより具体的にどのようにリアプノフ指数が計算されるのかを示す。以下に、本章の構成と概要を述べておく。

第2節では、 統計力学の成立条件の観点からみた位相空間上の軌道不安定性の性質について説明する。ハミルトン方程式を線形化することによって、軌道不安定性の強さの特性指数としての"リアプノフ指数"を定義する。最後に、統計力学の限界とリアプノフ指数の可能性について論じる。

第3節では、粒子シミュレーションにおけるリアプノフ指数の評価方法の問題点を

明らかにし、有効な数値計算方法であるリスケール法について説明する。また、その時に必要となる局所リアプノフ指数を定義する。

第4節では、リアプノフ指数の粒子数依存性と数値計算におけるSCOPEの計算誤差について、実際の粒子シミュレーションの結果から評価する。

第5節では、極めて近接した2セットの初期値から出発した軌道について、その分離距離が時間とともにどのように広がっていくかを粒子シミュレーションで直接観測し、その結果について考察する。

第6節では、リスケール法を使った粒子シミュレーションを行い、その結果得られた荷電粒子多体系の局所リアプノフ指数の特徴を示す。

§4-2　6N次元位相空間上の軌道不安定性

§4-2-1　統計力学の成立条件と軌道不安定性

”いかにして可逆な運動方程式に従う粒子集団が熱力学的振る舞いを示し、少数自由度系で記述されるのか？”は、統計力学史上最大の問題の一つであった。これに対して、エルゴード仮説を設けることで、直接的な回答を避ける形で、この問題は解消した[4, 6]。エルゴード仮説とは、ある物理量fに対して、系の観測量、すなわち長時間平均$\bar{f}$が、位相平均$\langle f\rangle$に等しいという仮定で、数学的には次のように書くことができる。

$$\bar{f} \equiv \lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\int_0^t f(x_\tau)d\tau = \int f(x)\rho(x)dx \equiv \langle f\rangle. \tag{4.1}$$

ここで、$\rho(x)$は、位相空間体積に比例した確率密度分布関数である。言い換えれば、＊1「任意の初期状態から出発した軌道は、長時間の間には、ほとんど全ての状態へ任意の精度で接近することができる。」ということである。つまり、初期状態は、単に時間軸の原点を決めているだけなので、長時間平均量は位相平均量に等しくなるのである。しかし、現実の系における巨視的な（粗視化した）観測量の振る舞いは、大自由度な系のエルゴード的な性質だけで説明できない。たとえば、位相空間において一般的に＊1の主張が一様に成立する時間は、現実での観測量の時間平均の時間長に比べて非常に長い。しかし、実際に短い観測時間で現実の系の粗視化観測量は、位相平均量とほぼ等しい。この粗視化観測量の収束性の速さを説明するには、エルゴード性よりもう少し強い拘束条件の仮説を課す必要がある。この条件は、混合性と呼ばれ、時間無限大の極限で物理量の相関が消滅するという条件であり、一種の緩和の性質を示している。この混合性は、数学的には次のように書くことができる。

$$\lim_{t_1,\,t_2\to\infty}\frac{1}{t_1 t_2}\int_0^{t_1}\int_0^{t_2} f(x_{\tau_1})g(x_{\tau_2})d\tau_1 d\tau_2 = \langle f\rangle\langle g\rangle. \tag{4.2}$$

ここで、gは任意の物理量である。この条件は、別の観点から見ると、軌道の位相空間の埋め尽くす仕方に関連していて、「軌道は、非常に短い時間で位相空間全体を粗く埋め尽くし、時間に比例してその粗さをほぼ一様に細かくしていく。」という性質に対応している。

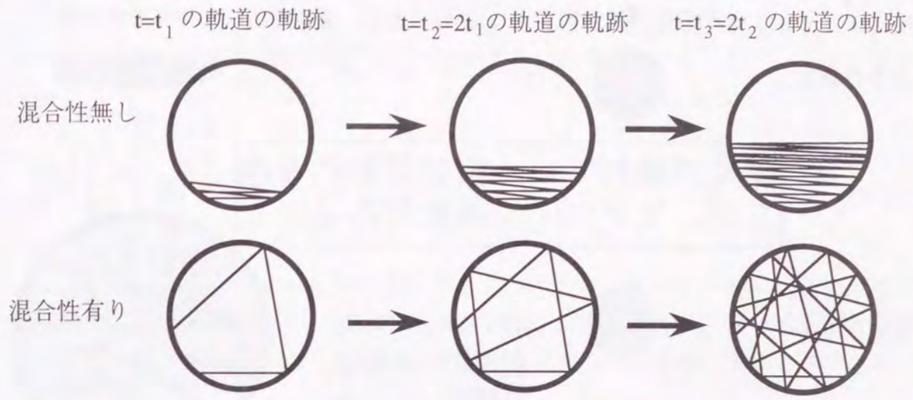


Fig.4-1　エルゴード的な系の軌道がどのように位相空間を埋め尽くすかを混合性のある場合とない場合の模式図。太い実線で書かれた丸は、対象となる位相空間の全領域を表しており、その中の細い実線は、軌道を表している。矢印は、時間の発展の方向を示している。

エルゴード的な系の場合、時間無限大の極限では、軌道の軌跡はほとんど位相空間を埋め尽くすが、系の混合性の有無によりその埋め尽くし方が大きく異なる。Fig.4-1 を見て分かるとおり、混合性が無い場合は、軌道が初期値の近傍の位相空間を繰り返し通過するため、軌道が位相空間全体に広がるのに時間がかかるため、粗視化量がエルゴード的に振る舞うように見えるのに非常に長い時間平均が必要となる。混合性が有る場合は、軌道はすばやく位相空間全体に広がり、その後、軌道は位相空間を時間とともにより細かく覆ってくるので、非常に短い時間平均で粗視化量がエルゴード的に振る舞うように見える。別の言い方をすると、Fig.4-2に示すように、局所的に存在した初期集団は、混合性がない場合、常にほとんどの軌道が近くに存在し続けるが、混合性が有る場合には、すぐに系全体に広がるので、粗視化された物理量では、極めて早く位相平均値に近づくのである。

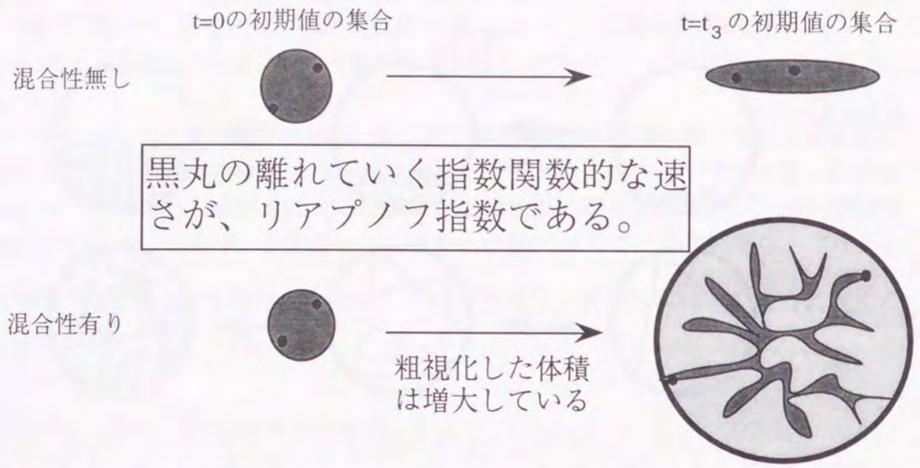


Fig.4-2　エルゴード的な系の軌道集団がどのように位相空間上を運動するかを混合性のある場合とない場合の模式図。濃い灰色で書かれた領域は、対象となる軌道集団を表しており、その中の２つの点は代表的な２つの軌道を表している。矢印は、時間の発展の方向を示している。保存系（ハミルトン系）では、Liouvilleの定理が成立するため濃い灰色で書かれた領域の体積はどちらの場合も保存する。

そして、この”位相空間上での軌道の混合性の成立”という条件が、最初の大きな問い”いかにして可逆な運動方程式に従う粒子集団が熱力学的振る舞いを示し、少数自由度で系の記述ができるのか？”の答えである。

この混合性は、位相空間上の軌道不安定性に起因するものである。軌道不安定性というのは、軌道の摂動の時間発展にたいする安定性に関する問題であり、位相空間上で二つの接近した独立な軌道が、時間がたつにつれて指数関数的に離れていくことである。この不安定性の指標は、リアプノフ指数[14～16]と呼ばれている。 また、この軌道不安定性は、輸送方程式における衝突積分の定式化のために使われる分子カオスの仮定を満たすための重要な条件である。すなわち、衝突前後で位相空間上の軌道が非常に不安定になるため、輸送方程式を定式化するときの時空間精度（衝突の相互作用時間と距離の有限性の無視）で現象を観測すると、衝突の前後の状態については、確率論的なことしか言えなくなるのである。

§4-2-2　軌道不安定性の特性指数"リアプノフ指数"

古典的な３次元のN粒子系は、3N個の運動量と座標の成分を持っている。$\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{\Lambda}$は、それぞれ、3N次元 運動量、座標と6N次元の位相空間代表点を表す。その時、粒子の運動は、ハミルトニアンHを使って次のように表される。

$$\dot{\mathbf{\Lambda}} \equiv \begin{pmatrix} \dot{\mathbf{p}} \\ \dot{\mathbf{q}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\dfrac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \\ \dfrac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \end{pmatrix} \equiv \mathbf{G}(\mathbf{\Lambda}), \quad H = \frac{1}{2}\Sigma\frac{\mathbf{p}^2}{m} + \Phi. \tag{4.3}$$

Φは、系内のポテンシャルエネルギーである。ここで、すべての粒子の質量が等しく、ポテンシャルエネルギーが座標だけの関数である（荷電粒子系であれば、磁場を考えない系）と仮定すると、式(4.3)の右辺は、次のように変形することができる。

$$-\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} = -\frac{\partial \Phi(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}}, \quad \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \Sigma\frac{\mathbf{p}}{m}. \tag{4.4}$$

リアプノフ指数は、6N次元の位相空間における軌道不安定性の指標として次のような手続きで定義される。まず、6N次元の位相空間上の軌道の摂動を考える。この摂動は、位相空間上の基準軌道$\mathbf{\Lambda}_r(t)$とその軌道と近接した変位軌道$\mathbf{\Lambda}_d(t)$の差で定義される変位とみなすことができる。すなわち、摂動$\boldsymbol{\delta}(t) \equiv \mathbf{\Lambda}_d(t) - \mathbf{\Lambda}_r(t)$は、次のように書くことができる。式(4.3)を線形化することによって摂動に関する運動方程式を得る。

$$\dot{\boldsymbol{\delta}} \equiv \begin{pmatrix} \dot{\delta\mathbf{p}} \\ \dot{\delta\mathbf{q}} \end{pmatrix} = \mathbf{T}(\mathbf{\Lambda})\boldsymbol{\delta}, \ \mathbf{T}(\mathbf{\Lambda}) \equiv \frac{\partial \mathbf{G}(\mathbf{\Lambda})}{\partial \mathbf{\Lambda}} = \begin{pmatrix} 0 & -\dfrac{\partial^2 \Phi(\mathbf{q}(t))}{\partial \mathbf{q}\partial \mathbf{q}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{4.5}$$

この式は、形式的に解くことができて、解は式(4.6)のような形になる。一般的には、リアプノフ指数λは基準軌道の初期値$\mathbf{\Lambda}(0)$と変位の方向$\mathbf{e}$の関数となる分離距離の平均指数発散で式(4.7)のように定義される。

$$\boldsymbol{\delta}(t) = \mathbf{X}(t)\boldsymbol{\delta}(0), \quad \mathbf{X}(t) \equiv \exp\left[\int_0^t d\tau \mathbf{T}(\mathbf{\Lambda}(\tau))\right]. \tag{4.6}$$

$$\lambda(\mathbf{\Lambda}(0),\mathbf{e}) \equiv \lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\ln\left[\frac{\|X(t)\mathbf{e}\|}{\|\mathbf{e}\|}\right],\ \mathbf{e}\equiv\frac{\boldsymbol{\delta}(0)}{\|\boldsymbol{\delta}(0)\|} \tag{4.7}$$

Fig.4-3は、軌道不安定性の指標であるリアプノフ指数がどのよう定義されるかについて模式的に書いたものである。

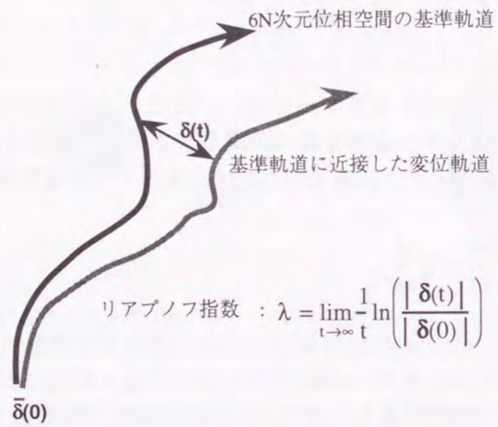


Fig.4-3　軌道不安定性の指標であるリアプノフ指数がどのよう定義されるかについて書いた模式的図。太い黒実線と灰実線は、それぞれ、6N次元位相空間上の基準軌道とそれに近接した変位軌道を示しており、δは、それら２つの軌道間の分離距離を表している。

例えば、FPU問題で考察された再帰性のある弱い非調和振動子を考えると、リアプノフ指数は、初期値（軌道）に強く依存したものとなる。しかし、もしリアプノフ指数が大きな正の数ならば軌道は十分不安定になり、系は混合性を持つことになるのでリアプノフ指数の基準軌道の初期値$\mathbf{\Lambda}(0)$依存性は失われ、変位の方向$\mathbf{e}$のみによって決定される。すなわち、系がエルゴード的になり、長時間平均と位相平均が等しくなるのである。一般的に変位の方向$\mathbf{e}$は、6N個の固有ベクトルの線形結合によって構成される[14, 15]。原理的には、リアプノフ指数は、$T(\mathbf{\Lambda})$に対する6N個の固有ベクトルに対応した6N個の固有値のあるひとつの値になる。しかしながら、初期の変位の方向$\mathbf{e}$をランダムに選べば、時間とともに最大リアプノフ指数の方向に対応する変位の方向$\mathbf{e}$が優勢になり、長時間後には、変位$\boldsymbol{\delta}(t)$は、最大リアプノフ指数の固有ベクトルになる。

次に、近接した２つの軌道の瞬間的な発散量を表す新しい物理量を導入する。

$$\lambda_{inst}(\mathbf{\Lambda}(t),\mathbf{e}) \equiv \frac{\left\|\dot{X}(t)\mathbf{e}\right\|}{\|X(t)\mathbf{e}\|}. \tag{4.8}$$

以下この量を、局所リアプノフ指数と呼ぶことにする。局所リアプノフ指数の時間変化は、位相空間上の軌道の混合性や微視的な過程の均一性について詳細な情報を含み、位相空間上の運動に関する非常に重要な量である。また、系がエルゴード的ならばこの局所リアプノフ指数を使ってリアプノフ指数は、次のように書くこともできる。

$$\lambda = <\lambda_{inst}> \equiv \lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\int_0^t dt\lambda_{inst}(\Lambda(t),\mathbf{e}). \tag{4.9}$$

すなわち、リアプノフ指数は、局所リアプノフ指数の長時間（＝位相）平均である。

§4-2-3　統計力学の限界とリアプノフ指数

エルゴード仮説などのいくつかの大きな仮定をおきながらも統計力学は、世の中の物理現象を説明し予言するための大きな武器であり続け、今まで数多くのことに適用され、これからも使われ続けるだろう。そして、統計力学の最大の功績の１つに非平衡状態から平衡状態への緩和を表す尺度となる輸送係数の決定問題がある。それは、Onsagerが”平均崩壊仮説”を設けることで現象論的に基礎づけ、久保により”局所平衡仮説”を設けることで粒子レベルの力学法則から具体的に輸送係数を導出する方法が確立された[17]。しかし、強い非平衡系では、このような仮説が破綻して統計力学的手法が使えなくなる。現在、この強い非平衡系の解析が様々な方法で試されているが、決め手となる方法は未だ無い状態である。

軌道不安定性は、統計力学的記述の可能性の是非を決定する能力を持つだけでなく、更に大きな潜在能力を秘めている。まず、第一にリアプノフ指数は、統計力学量でなく力学量であり、今までの統計力学的手法にあるような仮説の成立を必要とせず、定義できる点である。また、局所リアプノフ指数は、さらに微視的な力学量であり、軌道不安定性の構造や平均から大きくはずれる稀な現象についての力学情報を含む重要な特性量である。ところで、局所軌道不安定性が大きい系では、初期値を粗視化量が非平衡状態に対応するように選ぶと、有限の時間で粗視化量が平衡状態（粗視化した$\rho(x)$の最大値）へ緩和する。すなわち、軌道不安定性の強さ、すなわちリアプノフ指数は、ある意味で非平衡状態から平衡状態への緩和の速さ意味するのである。これらのことから、軌道不安定性の強さと巨視的な緩和量である輸送係数に

大きな相関があることが予想されるのだが、現在まで、これらの間の関係は、殆ど理解されていない。

我々は、リアプノフ指数が強い非平衡系の解析の武器となることに大きな期待をかけて、そのあいだの関係を見出すために以下の章の研究を行った。

§4-3　軌道不安定性の"リアプノフ指数"の数値計算方法

前章の式(4.7)で定義されたリアプノフ指数は、十分長い観測時間と十分小さな初期変位の大きさ（変位を基準軌道からの摂動と見なせる）をもつ基準ー摂動軌道の時間発展を用いて、次のように計算される。

$$\lambda = \lim_{t\to\infty}\lim_{|\Lambda_d(0)-\Lambda_r(0)|\to 0}\frac{1}{t}\ln\left(\frac{|\Lambda_d(t)-\Lambda_r(t)|}{|\Lambda_d(0)-\Lambda_r(0)|}\right)=\frac{1}{t}\ln\left(\frac{|\delta(t)|}{|\delta(0)|}\right). \tag{4.10}$$

後で示すが近接した２つの軌道は時間に対して指数関数的に離れていくので、ある程度時間がたつとこの指数的な発散のため近接した２つの軌道が完全に分離してしまい、変位が基準軌道上の摂動とは考えられなくなる、すなわち、変位の運動が非線形となり式(4.5)を満たさなくなる（＝変位の大きさが線形限界より大きくなる）。さらに、指数発散になるまで初期に遷移的な時間が存在するので、指数発散を観測できる部分が非常に限られ、長時間平均発散量であるリアプノフ指数を定量的に評価するためには、観測時間が短すぎる。初期の変位の大きさを小さくすれば、このような問題は原理的には解決するが、その場合数値計算の誤差が問題となってくる。このような困難を解決するために、新しいリアプノフ指数の計測方法が必要となってくる。

変位の運動が式(4.5)を満たす限り、すなわち、変位の大きさに対して線形である限りリアプノフ指数は、変位の方向だけに依り大きさに依らない。シミュレーションの実行中に、変位の方向を保持して大きさをリスケールしても良いことになる。シミュレーション時間ステップ毎に変位の大きさをリスケールし、局所リアプノフ指数を求めれば、シミュレーションの間中、変位の大きさをほぼ一定値にしておくことができる。その時、リアプノフ指数は、式(4.9)の関係式から局所リアプノフ指数の長時間平均として求めることができる。また、このようにして求められた局所リアプノフ指数は、リアプノフ指数を求めるための単なる経由量というだけでなく、軌道不安定性に関して、それ以上の局所情報（不安定性の均一性や時間発展）を含む重要な量でもある。

Fig.4-4は、リスケールした変位軌道を用いた局所リアプノフ指数[14,16,18,19]の計算の方法の模式的説明である。細い破線と実線は、それぞれ基準軌道と変位軌道、または、連続的にリスケールした摂動軌道との間の変位ベクトルである。Fig.4-4のように常に方向を保存するようにリスケールしなければならない。また、変位ベクトルが小さいとき（初期の時間）は、これらのベクトルは平行であるこの２つの線は重なり合っているが、変位ベクトルが大きいとき（時間が十分たったときFig.4-4

のt=5Δt）は、それらは、平行でなくなる。すなわち、これより先の時間では、リスケールをしない変位軌道から局所リアプノフ指数を求めることはできなくなる。

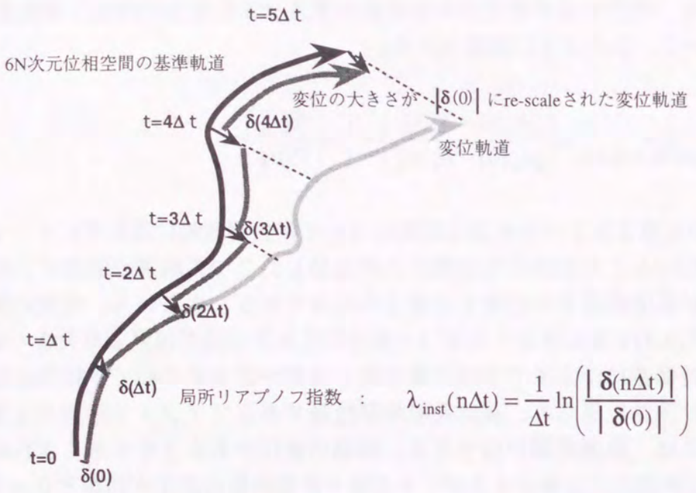


Fig. 4-4　リスケール法を用いて局所的な軌道不安定性の指標である局所リアプノフ指数がどのよう定義されるかについて書いた模式的図。太い黒実線と濃灰実線と薄灰実線は、それぞれ、6N次元位相空間上の基準軌道とそれに近接したリスケール軌道と変位軌道を示しており、δは、それら２つの軌道間の分離距離を表している。

変位の運動が十分線形的であり、数値計算誤差が小さくなるように、この変位の大きさを設定すると、長時間の軌道発散データを得ることができる。

実際のシミュレーションでは、次のように変位の大きさをリスケールする。数値計算では、基準軌道$\mathbf{\Lambda}_r(t)$と変位軌道$\mathbf{\Lambda}_d(t)$は有限の時間ステップΔtで離散的にしか定義されていない。n時間ステップのとき、変位をリスケールするためのn番目のリスケーリング係数は次のようにして計算される。

$$f(n)_{scale}=\frac{|\delta((n-1)\Delta t)|}{|\delta(n\Delta t)|}. \tag{4.11}$$

この時、変位のノルムを定義するときにいくらかの不確定性がある。それは、6N次元位相空間上の変位ベクトルは、異なる２つの次元（運動量と座標）の量から構成

されているため、ノルムを定義するときに任意の重み付けが必要となってくる、しかし、リアプノフ指数に対してその重み付けは本質的ではない[14]（リアプノフ指数は、計量普遍量である。）。本論文では、運動量空間と座標空間をそれぞれmv_{th}、aで規格化し、変位ベクトルのノルムは無次元運動量と座標を使った無次元量として定義した。リスケールされた新しい変位軌道$\mathbf{\Lambda}_d(t)$の出発点は、次のように決定される。

$$\mathbf{\Lambda}_d(n\Delta t)=\mathbf{\Lambda}_r(n\Delta t)+f(n)_{scale}\,\delta(n\Delta t). \tag{4.12}$$

そして、この時局所リアプノフ指数は次のように計算される。

$$\lambda_{inst}(n\Delta t)=\frac{1}{\Delta t}\ln\left(\frac{|\delta(n\Delta t)|}{|\delta(0)|}\right). \tag{4.13}$$

先にも述べたように、この手続きは、長時間の軌道発散の計算を可能にし、どんな初期変位方向でも最大リアプノフ指数に対応する最大発散方向へ向くことを保証する[14]。最終的に、最大リアプノフ指数は、次のように求められる。

$$\lambda\equiv\lim_{n_{max}\to\infty}\frac{1}{n_{max}\Delta t}\sum_{n=1}^{n_{max}}\lambda_{inst}(n\Delta t). \tag{4.14}$$

§4-4　リアプノフ指数の粒子数依存性と数値計算における計算誤差

前節で述べたように、２つの近接軌道の分離距離から（最大）リアプノフ指数を求めるときには、リスケール法を使う必要がある。数値計算でリスケール法を使うときに注意しなければならないことが２つある。一つは、分離距離の発散率の平均を取るシミュレーションの間じゅう、分離距離が基準軌道に対して微少量として取り扱える大きさでなければならない。この条件については、次の節で詳しく述べる。もう一つは、数値計算の精度からくるもので、微少な分離距離が十分計算誤差より大きくなければならない。これらの条件を満たして初めて、リアプノフ指数を求めることができるのである。この節では、後者の計算誤差からくる分離距離の下限について明らかにする。

軌道の計算誤差は、大きく分けて２種類のものがある。１つは、時間発展差分（leapfrog法）から生じる時間刻みΔtに対して３次のオーダーの誤差であり、もう１つは、PPPM法によって計算される粒子に掛かる力の誤差である。leapfrog法から生じる誤差は、時間刻みを小さくすることで、小さく抑えることができ、PPPM法から生じる誤差は、PM格子を小さくすることで小さく抑えることができる。しかし実際の計算では、計算時間の節約のためこの２つはできるだけ大きくすることが望ましい。

まず、leapfrog法から生じる誤差について考察する。第２章で述べたように、"SCOPE"は、局所可変時間ステップ法を使うことで、精度よく粒子軌道を解くことと時間刻みΔtが大きくとれること（計算の高速化）を両立させることができる。しかしながら、このようなシミュレーションでは、たとえ正確な軌道を計算できたとしても、時間刻みΔtの間に分離距離が基準軌道に対して微少量として取り扱える大きさを越えてしまう可能性がある。したがって、可変局所時間ステップ法を使用する場合には注意を要する。リスケール法によるリアプノフ指数の評価のときは、時間刻みΔtを十分小さくとっておき、時間刻みΔt間に分離距離が大きくならないようにする必要がある。本研究のシミュレーションでは、時間刻みΔtは、プラズマ振動周期$2\pi/\omega_p$の1/40π の時間と平均粒子球半径の1/10を熱速度の6倍の速度$6v_{th}$で進むのにかかる時間のどちらか小さい方を採用した。この条件では、Γ<1の時、後者を採用し、Γ>1の時、前者を採用することになる。また、この時間ステップが十分小さいかどうかは、次のテストやパラメーターランで確認した。

次に、PPPM法から生じる誤差について考察する。PPPM法から生じる誤差は、PP法とPM法の境界の粒子からの力で一番大きくなる、すなわち、粒子間距離が1.5Δの粒子の相互作用の誤差が一番重要なのである。改良されたPPPM法では、力の誤差はPM格子の大きさの４乗に比例するので、PP格子ΔとPM格子Δ_fの大きさの比Δ_f/Δに対して、力の最大誤差を次のように見積もることができる。

$$\left(\frac{\Delta_f}{1.5\Delta}\right)^4 = 0.2\left(\frac{\Delta_f}{\Delta}\right)^4. \tag{4.15}$$

PM格子Δ_fをPP格子Δの半分の大きさにしたとき、２粒子間の力の最大誤差は1%以下になる。実際には全ての粒子からの力の和をとるので、上式よりもう少し誤差は小さくなり、ある一つの粒子に働く力の誤差の２乗平均（RMS）は、0.02%より小さくなる。また、比Δ_f/Δを1/4にすると誤差は、さらに1/5倍減少するが、総PM格子数が8倍に増大し、計算機のメモリーと計算時間を圧迫するようになる。特に、時間刻みが大きく取れないリアプノフ指数の評価では、リアプノフ指数を計算誤差に埋まることない程度の精度を保持して、１シミュレーションステップの計算時間をできるだけ短くする必要がある。

本格的にシミュレーションを行う前に、１成分プラズマで実際に簡単なテストシミュレーションを行い、リスケール法に使用する分離距離δ、時間刻みΔtとPP格子とPM格子の大きさの比Δ_f/Δの最適化を数値計算誤差の観点から行った。テストとこれから行なうパラメーターランのシミュレーション条件は、以下の表に示したとおりである。パラメーターランのシミュレーション条件は、時間刻みΔtとPP格子とPM格子の大きさの比Δ_f/Δを十分小さくした高精度シミュレーションとほぼ等しい局所リアプノフ指数を与えることをテストランを通して確認している。

	パラメーターラン	テスト
プラズマの種類	OCP, QOCP, TCP	OCP
クーロン結合定数 Γ	0.001 ～ 200	10
粒子数　N	500 (TCPのみ+500)	256, 500, 1024, 2920
PP格子の大きさ Δ	4×4×4	4×4×4
時間刻み幅 Δt	$\min(\omega_p^{-1}/20,\ a/60v_{th})$	$\omega_p^{-1}/10 \sim \omega_p^{-1}/200$
PM格子の大きさ Δ_f/Δ	1/2	1/2, 1/4
二つの軌道の分離距離 δ	5.0×10^{-3} (v_{th} and a)	$1.0\times10^{-2} \sim 1.0\times10^{-3}$ (v_{th} and a)

Fig. 4-5は、時間刻み幅$\omega_p^{-1}/20$、PM格子の大きさΔ/2、分離距離5.0×10^{-3} (v_{th} and a)の局所リアプノフ指数（真値と考えて良い）とその条件から分離距離だけを小さく

（1.0×10^{-3} v_{th} and a）したシミュレーションによる局所リアプノフ指数である。図から明らかなように、分離距離を小さくしたシミュレーション（点で表している）は、全体に値が大きくなり、そのうえ、間欠的に大きな値や小さな値をとり時間的になめらかに変化していない。これら２つの現象は、上で述べた誤差が原因となっていると思われる。

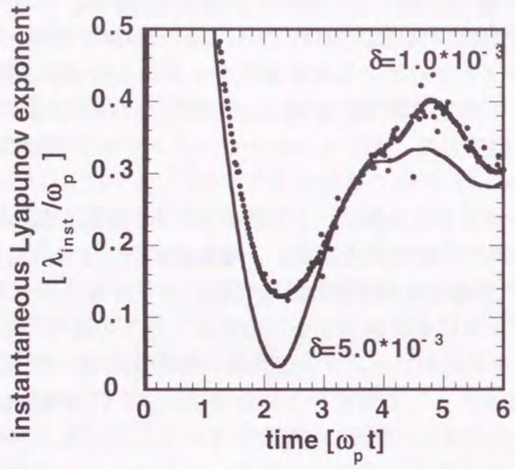


Fig.4-5　局所リアプノフ指数の時間変化。クーロン結合定数10、時間刻み幅ω_p^{-1}/20、PM格子の大きさΔ/2、分離距離5.0×10^{-3} (v_{th} and a)の局所リアプノフ指数（真値と考えて良い）を実線で表している。また、その条件から分離距離だけを小さく（1.0×10^{-3} v_{th} and a）したシミュレーションによる局所リアプノフ指数は、黒丸で表している。

上で述べた２つの現象（平均値の増大と間欠的な振る舞い）と２つの誤差（leapfrog法から生じる誤差とPPPM法から生じる誤差）には、それぞれ密接な関係がある。leapfrog法から生じる誤差は、粒子の運動が連続的であるため、なめらかな誤差を生むはずである。分離距離が小さいとその時間変化も小さくなり、時間刻み幅を小さくしなければ、leapfrog法から生じる誤差が無視できない。したがって、局所リアプノフ指数の評価が純粋に分離距離の時間変化だけでなく、leapfrog法から生じる誤差の二乗平均を上乗せして評価することになってしまうのである。PPPM法から生じる誤差は、PM領域の粒子からの力の誤差によって生じるのだが、それは、時間

に対して通常なめらかな誤差を生むだけであり、leapfrog法から生じる誤差と同様の性質である。しかしながら、次のような場合、大きな誤差が間欠的に発生する。それは、２つの軌道のうち１つの軌道では粒子がPP領域に存在し、もう１つの軌道では対応する粒子がPM領域に存在するような場合である。このような状況は、間欠的に起こり、PPPM法から生じる誤差が最も分離距離の時間変化に影響する。したがって、間欠的に大きな値や小さな値をとる現象は、PPPM法から生じる誤差が原因であると考えられる。

Fig.4-6は、以上の推論が正しいことを示すシミュレーション結果である。この図のプロットは、分離距離をFig.4-5で誤差が生じている1.0×10^{-3} v_{th} and aの値に設定して、時間刻み幅のみを小さく（ω_p^{-1}/200）した場合（●で示した。）と、PM格子の大きさのみを小さく（Δ/4）した場合（+で示した。）の局所リアプノフ指数である。

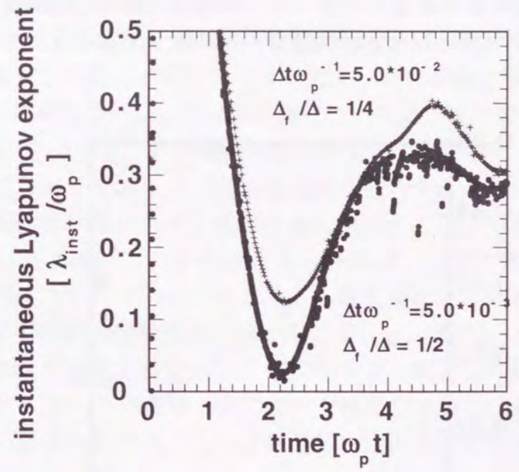


Fig.4-6　leapfrog法とPPPM法のそれぞれの精度を向上させた局所リアプノフ指数の時間変化。クーロン結合定数10、分離距離1.0×10^{-3} (v_{th} and a)に固定しておいて、時間刻み幅のみを小さく（ω_p^{-1}/200）した場合（●で示した。）と、PM格子の大きさのみを小さく（Δ/4）した場合（+で示した。）の局所リアプノフ指数である。

この図から、確かにleapfrog法から生じる誤差は、なめらかな過剰評価を生み、PPPM

法から生じる誤差は、間欠的な時間変化を生んでいることが分かる。

以上の結果から、分離距離をあまり小さく設定すると局所リアプノフ指数を観測するときに、時間刻み幅とPM格子の大きさの両方を小さくした高精度のシミュレーションをしなければならなくなることがわかった。したがって、計算の経済性のためには、基準軌道を解くときに要求される精度、すなわち、エネルギー保存などの巨視的な統計量を観測するのに必要な時間刻み幅とPM格子の大きさで、局所リアプノフ指数の精度が十分あるように分離距離を大きさの下限を決めるべきである。ただし、分離距離の大きさの上限は、このような誤差論からは決定できない。上限は、次の節で述べる分離距離の運動が線形から非線形に遷移する大きさから決まる。

最後に、リアプノフ指数の粒子数依存性に関して調べた結果をFig.4-7に示す。図のプロットは、分離距離を5.0×10^{-3} v_{th} and a、時間刻み幅$\omega_p^{-1}/20$、PM格子の大きさ$\Delta/2$に固定して、粒子数を256, 500, 1024, 2920と変化させた場合の局所リアプノフ指数の長時間平均としてのリアプノフ指数である。この図からリアプノフ指数は、粒子数が増加するとともに若干大きくなっていくが、その粒子数依存性は小さく、粒子数500の値を漸近値と見なしてもほとんど問題ないと結論づけることができる。

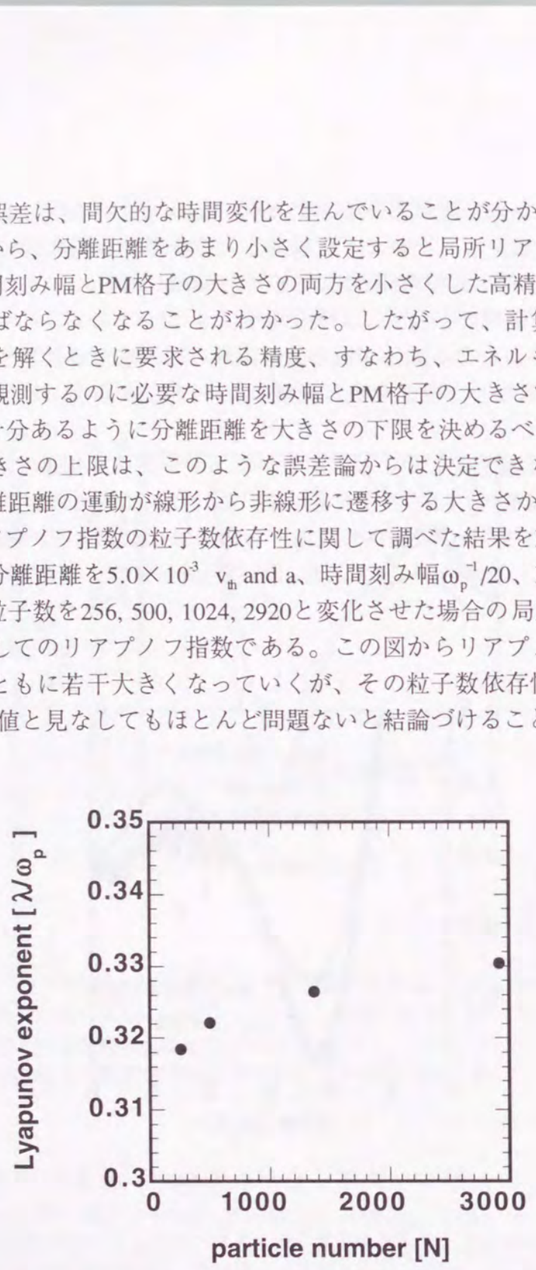


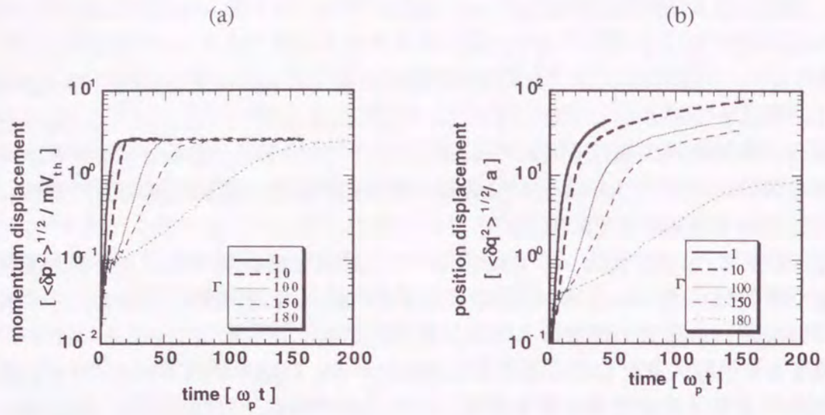
Fig.4-7　リアプノフ指数の粒子数依存性。図のプロットは、分離距離を5.0×10^{-3} v_{th} and a、時間刻み幅$\omega_p^{-1}/20$、PM格子の大きさ$\Delta/2$に固定して、粒子数を256, 500, 1024, 2920と変化させた場合の局所リアプノフ指数の長時間平均としてのリアプノフ指数である。

§4-5　近接した２つの軌道の発散

連続的リスケール法でリアプノフ指数を計算する前に、実際に変位が時間的に指数発散するかどうかを確かめなければならない（連続的リスケール法では、指数発散しない場合でも強制的に指数を求めてしまう）。そのために、色々な大きさのクーロン結合定数において、リスケール法を使わずに基準軌道と変位軌道の分離距離、すなわち変位の時間発展を計算する。

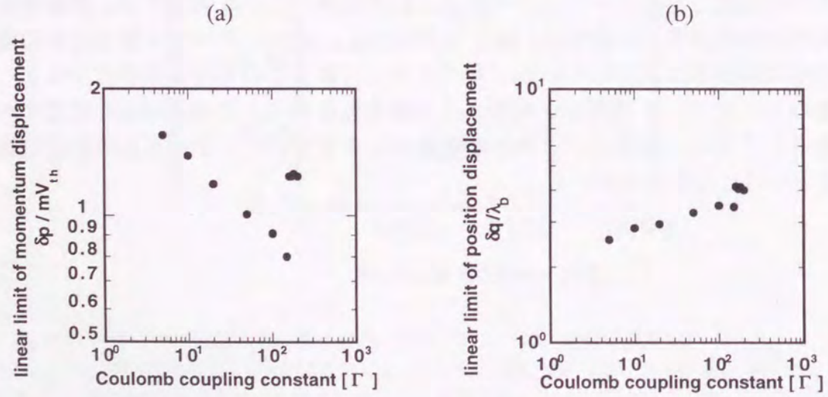
６次元位相空間（p_x, p_y, p_z, q_x, q_y, q_z）において、初期分離距離の大きさを標準偏差が運動量空間で5.0×10^{-3} mv_{th}、座標空間で5.0×10^{-3} aとなる正規分布で与えた。これらの値は近接軌道の発散を計算する時に、前節で議論したシミュレーションコードの計算精度より十分大きな値になるように選んでいる。Figs.4-8は、3N次元の運動量(a)と座標(b)の２乗平均変位の時間発展を示したものである。分離距離は、初期値に与えた非常に小さな値から出発し、時間に対して指数的に発散するまでは不規則に変化する。この不規則な遷移時間は、リアプノフ遷移時間と呼ばれている。この遷移時間内で、変位は位相空間上において最大固有値に対応する固有ベクトルの方向を探し出す。系が、軌道不安定性を有するなら、その固有ベクトルの方向は、初期の変位の方向には依らない。この遷移時間については、後で詳しく議論する。

Figs.4-8において、リアプノフ遷移時間の後で、すべてのクーロン結合定数において、変位は時間に対して明らかに指数関数的に発散することが見られる。この結果は、選んだ初期変位が十分小さく無限小量と見なすことができると言うことを意味している。言い換えれば、この変位の大きさでは、変位の運動が線形化された式(4.5)によって記述されるということである。指数発散している領域では、運動量空間の発散率と座標空間の発散率は、ほとんど等しい。また、クーロン結合定数の増加に伴い平均発散率は減少している。後で示すように、この平均発散率とリスケール法で求めたリアプノフ指数は、同じような依存性を持ち、その絶対値も同じオーダーである。これらの結果は、この分離距離の大きさでのリスケール法の適応は適切であるということを示している。



Figs.4-8　Γ=1,10,100,150,180における２つの近接軌道の分離距離の時間変化。(a)は運動量空間、(b)は位置座標空間に関しての分離距離の時間変化である。時間、運動量、位置座標はそれぞれプラズマ振動数、粒子の質量と熱速度の積、粒子球半径によって規格化されている。

Figs.4-8 が示すように、変位の大きさがある一定値に達すると、発散の速さが指数成長からずれてくる。Figs.4-9 は、指数成長からのずれる分離距離（線形限界点）を示しており、全てのクーロン結合定数において運動量空間でmV_{th}、座標空間で3~4λ_Dの分離距離が線形限界点であることがわかる。



Figs.4-9　２つの近接軌道の分離速度が指数関数的な振る舞いからずれ始めるときの変位の大きさ。(a)は運動量空間、(b)は位置座標空間に関してである。である。運動量、位置座標はそれぞれプラズマ振動数、粒子の質量と熱速度の積、デバイ長によって規格化されている。

後で詳しく述べるが、運動量空間は、0次の分布がマックスウェル分布であり、有限領域に拘束されているので、どこまでも発散し続けることはできない。線形限界点の大きさがmV_{th}のオーダーという結果は非常に大きな値であり、軌道が完全分離する直前まで指数発散するということである。また、座標空間の線形限界点が強結合プラズマにおいてデバイ長によって決まるということは、興味深い結果である。

長い時間分離距離を観測すると、全てのクーロン結合定数において運動量空間の２乗平均変位は、$|\delta \mathbf{p}| \sim \sqrt{6}\, mV_{th}$,で飽和し、座標空間の２乗平均変位は、$|\delta \mathbf{q}| \sim t^{1/2}$で発散していく。後で示すように、この分離距離の漸近的な振る舞いは、基準軌道と変位軌道がもはや無相関になっていることを意味している。言い換えると、微少変位に対して不安定なだけでなく大域的にも軌道を混合させる性質を備えている、すなわち、系がエルゴディクとみなせることを示唆している[4~6]。ちなみに、FPU問題のように微少変位に対して不安定でも、大域的に安定であれば系の振る舞いはエルゴディクではない。２つの軌道がともに、運動量分布関数が同じ温度を持つマックスウェル分布, fM(p), であると仮定すると、運動量空間の分離距離の２乗は次のように書くことができる。

$$\begin{aligned}\overline{\delta \mathbf{p}^2} &\equiv \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\mathbf{p}_{di}-\mathbf{p}_{ri}\right)^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\mathbf{p}_{di}{}^2 - 2\mathbf{p}_{ri}\cdot\mathbf{p}_{di} + \mathbf{p}_{ri}{}^2\right), \\ &= 6mV_{th}{}^2 - \frac{2}{N}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{p}_{ri}\cdot\mathbf{p}_{di}.\end{aligned} \tag{4.16}$$

ここで、次の関係を使った。

$$\frac{1}{N}\Sigma_i^N \mathbf{p}_i{}^2 = \int_0^\infty \mathbf{p}^2 f_M(p)dp = 3mv_{th}. \tag{4.17}$$

添字の"r" と "d" は、それぞれ基準システムと変位システムを表し、添字 "i"は、対応するシステムのi番目の粒子を示す。与えられた初期の運動量空間の変位は、mv_{th}に比べて非常に小さいので、基準システムの3N次元のベクトルは、変位システムのベクトルとほとんど平行である。運動量空間の２乗平均変位は、指数的に発散するにつれて、6N次元の初期状態の情報を失っていく。初期状態の情報を完全に失ってしまったとき、つまり、２つのシステムがそれぞれ無相関である時、基準システムと変位システムの間の各粒子（３次元空間上）の角度は、ランダムになる。このことは、基準システムの3N次元のベクトルが変位システムのベクトルと直交していることを表している。その時、運動量空間の２乗平均変位は$\sqrt{6}mv_{th}$になる。この値は、シミュレーションと一致する。

一方、座標空間の分離距離の２乗は、次のように書くことができる。

$$\begin{aligned}\overline{\delta \mathbf{q}^2} &\equiv \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\mathbf{q}_{d_i}-\mathbf{q}_{r_i}\right)^2 \\ &= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(d\mathbf{q}_{d_i}{}^2+d\mathbf{q}_{r_i}{}^2\right) \\ &+\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}2\left\{-d\mathbf{q}_{d_i}\cdot d\mathbf{q}_{r_i}+\left(\mathbf{q}_{d_i}(0)-\mathbf{q}_{r_i}(0)\right)\cdot\left(d\mathbf{q}_{d_i}-d\mathbf{q}_{r_i}\right)\right\}+\overline{\delta \mathbf{q}(0)^2}.\end{aligned} \tag{4.18}$$

ここで、$\mathbf{q}_i(t)\equiv \mathbf{q}_i(0)+d\mathbf{q}_i(t)$とした。

２つのシステムの速度がそれぞれ無相関である時、式(4.18)の第１項，$\left(d\mathbf{q}_{d_i}{}^2+d\mathbf{q}_{r_i}{}^2\right)$は、座標空間の変位の大きさの主要項になる。そのとき、変位の運動はランダムウォーク過程となる、すなわち、座標空間変位の２乗の平均は、粒子の平均２乗偏差のちょうど２倍に相当することになる。結果として、気体、液体状態では、座標空間の２乗平均変位は、$|\delta \mathbf{q}| \sim t^{1/2}$で発散していく。良く知られているとおり固体状態では、拡散係数がゼロでありそれぞれの粒子の位置は格子点近傍に拘束されている。そのため、２つのシステムの対応した粒子の分離距離も拘束されるので、座標空間の２乗平均変位は格子振動で決まる一定値に落ちつく。

§4-6　局所リアプノフ指数

局所リアプノフ指数[14, 16]をリスケール法で計算する場合、§4-3, 4-4で示したように、初期変位の大きさは、計算誤差と線形限界から決まる範囲（1.0×10^{-3} ~1 mv_{th} またはλ_D）に設定されなければならない。ここでは、初期変位は、正規分布で、その標準偏差は，運動量空間で5.0×10^{-3} mv_{th}、座標空間で5.0×10^{-3} aとした。局所リアプノフ指数は、リアプノフ指数を与えるだけでなく、軌道不安定性の局所構造と大域構造に関する情報を持っている。 Fig.4-10 は、Γ=10に対する局所リアプノフ指数である。典型的にそれは、小さな値から出発して大きなピーク値まで急激に増大し、ゆっくりと漸近的な値に収束していく[18～21]。この漸近値に収束するまでの領域をリアプノフ遷移領域と呼び、この領域で初期変位は、最大固有値、すなわち、最大リアプノフ指数に対応する固有方向を探し出す。

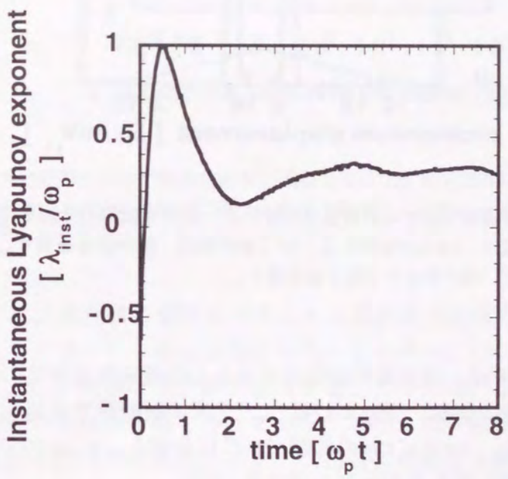


Fig.4-10　Γ=10での遷移領域における局所リアプノフ指数の時間発展。横軸の時間、縦軸の局所リアプノフ指数は、それぞれ、プラズマ振動数で規格化されている。

例えば、Fig.4-11 は、初期変位が全ての方向について運動量空間で$\pm\frac{5.0}{\sqrt{3}}\times10^{-3}mv_{th}$、座標空間で$\pm\frac{5.0}{\sqrt{3}}\times10^{-3}a$の２つのピークをもつの場合の１体分布関数の時間変化であ

る。２ピークの分布関数は、 Fig.4-10のリアプノフ遷移時間の間に正規分布へ緩和していることが分かる。どんな初期変位から始めても遷移時間の後、小さな揺らぎを除いて分布関数は変化しない、すなわち、定常な正規分布になる。この結果は、リアプノフ遷移時間に初期状態の情報が失われることを示している。

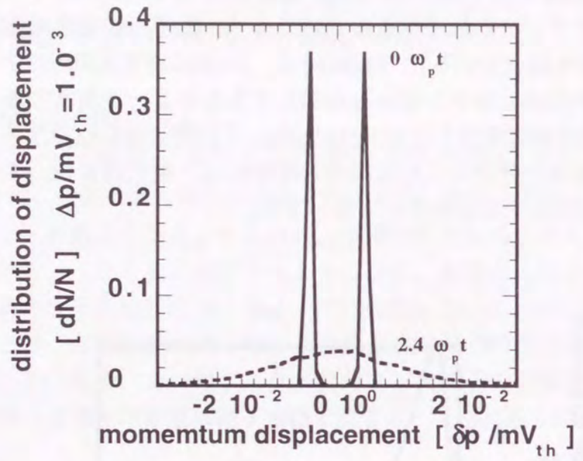


Fig.4-11　Γ=10での遷移領域における運動量空間変位の一体分布関数の時間変化。実線は、初期分布（δ関数）を表し、破線は、2.4 ω_pt時間経過した（遷移領域）後の分布を表す。ここで、 dN は、運動量が$\bar{p}$+Δp（Δp/ =10^{-3}）内に存在する粒子数を表す。

また、遷移時間の後では、運動量の変位の大きさと位置座標の変位の大きさの比は、初期変位に依らず一定になる。 Fig.4-12は、プラズマ振動数で規格化した比が、Γ<1の範囲で$\Gamma^{-1/2}$に比例し、1<Γ<170の範囲で$\Gamma^{-1/3}$ に比例し、Γ>170では、クーロン結合定数に依らず一定になることを示している。

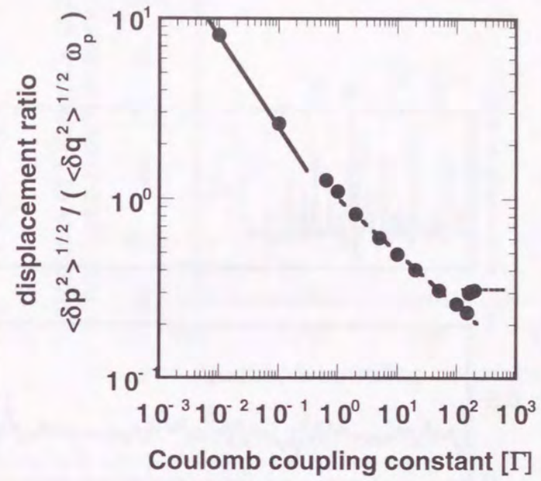


Fig. 4-12　プラズマ振動によって規格化された運動量変位と位置座標変位の大きさ比のクーロン結合定数依存性。 実線は、 Γ=1~160 について最小２乗法で最適化して引いた直線。

Appendix 4-Aで、「運動量の変位の大きさと位置座標の変位の大きさの比が固体領域（Γ>170）でなぜクーロン結合定数に依存しないのか、Γ<170において何故大きな値を持つのか。」を簡単なモデルで説明する。この比は、最大リアプノフ指数に対応する固有方向の情報の一部を持っている。また、この結果は、どんな初期変位の方向でも、遷移時間の間に最大リアプノフ指数に対応する固有方向に向くということの証拠の一つでもある。

Fig.4-13は、Γ=1,10,50,200のついての局所リアプノフ指数の時間変化である。クーロン結合定数の増大とともに局所リアプノフ指数の漸近値、すなわち、リアプノフ指数は小さくなり、遷移時間は長くなっていっていることが分かる。言い換えれば、遷移時間が長くなると、リアプノフ指数 は小さくなっていくのである。また、Fig.4-13から明らかなように、局所リアプノフ指数は、大きな揺らぎを持っていて、その揺らぎは時間的にカオティックに振る舞っている。局所リアプノフ指数のバースト（その平均値より十分大きい揺らぎ）がΓ<1で観測された。これは、薄いプラズマでは、軌道不安定性の原因である粒子間の衝突が極めて狭い領域で強く起こっていることを示している。Γ>1の領域でも、局所リアプノフ指数の揺らぎ は、平均

値と同じ程度の大きさを持っている。このような振る舞いは、軌道不安定性が位相空間で非常に非一様に生じていることを示している。この漸近領域の局所リアプノフ指数は、位相空間上の混合性の情報を含むので、より詳細なミクロ過程についての探針になりうるものである。

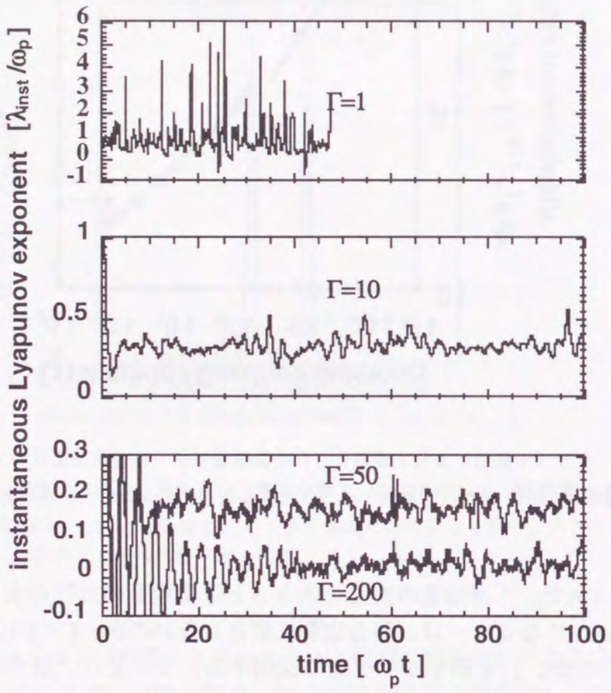


Fig. 4-13　Γ=1,10,50,160プラズマ振動によって規格化された局所リアプノフ指数。

Fig.4-14 は、Γ=1~150 の範囲でリアプノフ指数とリアプノフ 遷移時間の積をプロットしたものである。この積は無次元量であり、全ての領域で1.5～2.0の一定値をとることが分かる。すなわち、リアプノフ 遷移時間はリアプノフ指数と反比例の関係にある。

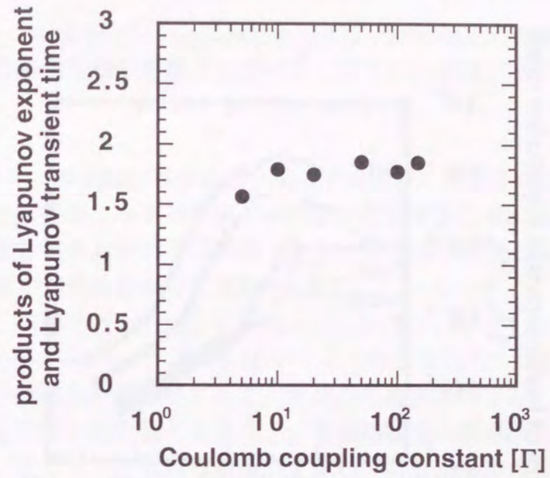


Fig.4-14　Γ=1~150 での リアプノフ指数とリアプノフ遷移時間の積。

Fig.4-15 は、Γ=1,2,10,50,200について局所リアプノフ指数を周波数分解し周波数依存性を示したものである。局所リアプノフ指数が時間的にカオティックに揺らぐのに対応して、全てのクーロン結合定数においてそのスペクトルは、広い帯域を持ち、３つの異なるスペクトルから成っている。周波数の低い順に, 最初は、プラズマ周波数あたりのホワイトノイズ領域、次にf^{2}で減衰する領域、それより高周波領域でf^{1}で減衰する。

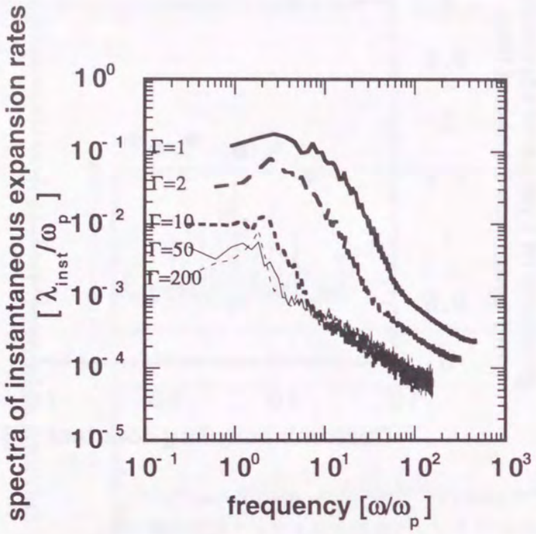


Fig.4-15　Γ=1,2,10,50,200における局所リアプノフ指数のスペクトル（周波数分解）。

§4-7　まとめ

本章では、粒子シミュレーションにおけるリアプノフ指数とその瞬時値である局所リアプノフ指数の観測方法や問題点を述べた。以下に、各節ごとの内容と結論についてまとめる。

第２節では、エルゴード論的観点から、軌道不安定性と統計力学の成立条件の関係について述べ、その指標であるリアプノフ指数の定義を記した。また、強度非平衡系では従来の統計力学の方法適用が困難であり、強度非平衡系の解明に力学量であるリアプノフ指数が有効であることを説明した。

第３節では、粒子シミュレーションにおいて２つの近接軌道の分離距離の発散を観測してリアプノフ指数を評価方法すると、軌道間分離距離の下限（数値誤差）と上限（摂動変位の線形性）が問題となり、十分な長時間振る舞いが観測されなくなることを指摘した。そして、それらの問題点を克服する有効な数値計算方法であるリスケール法について説明した。

第４節では、リアプノフ指数の数値計算におけるSCOPEの計算誤差について、実際の粒子シミュレーションの結果から評価し、leapfrog法（時間発展の計算）から生じる誤差は、なめらかな局所リアプノフ指数の過剰評価を生み、PPPM法（加速度の計算）から生じる誤差は、間欠的な局所リアプノフ指数の時間変化を生んでいることが分かった。また、粒子数を増やすとリアプノフ指数は若干大きくなるが、依存性は非常に弱く、粒子数500でのシミュレーションで妥当であると結論づけた。

第５節では、リスケール法を使わない粒子シミュレーションにより近接軌道が指数関数的に発散することを観測し、また、その指数発散の限界点（摂動の非線形成長開始点）を決定した。さらに、長時間経過後、２つの軌道（系）が無相関になっていること、すなわち、系がエルゴディックになっていることを示した。

第６節では、リスケール法を使ったシミュレーションにより局所リアプノフ指数を観測し、任意の初期摂動から出発しても同一のリアプノフ指数に漸近すること、また、漸近するまでの遷移時間とリアプノフ指数の関係を明らかにした。その振る舞いから、位相空間の軌道不安定性が空間的にも時間的にも非一様であることを明らかにし、そのスペクトルが広い帯域を持ち、周波数の低い順にプラズマ周波数近傍の白色ノイズ領域、次にf^{-2}で減衰し、それより高周波領域でf^{-1}を持つことを示した。

Appendix 4-A.　運動量変位と位置座標変位の大きさ比

Fig.4-12に示したように、プラズマ振動数で規格化された運動量変位と位置座標変位の大きさ比は、Γ>170では、クーロン結合定数によらず一定値をとっている。古典一成分分プラズマは、Γ～170において、液体状態から固体状態（bcc格子）に相転移することは　モンテカルロや分子動力学シミュレーションによりよく知られている。次の章で示すが、本シミュレーションにおいても、この相転移は確認された。すなわち、Γ>170の領域は固体領域であり、熱運動は存在するものの、構造の大きな変化は見られないので運動量変位と位置座標変位の大きさの比が一定になるものと考えられる。具体的に簡単なモデルで、この比がどのようにして決まるか説明できる。

変位に関する運動方程式の時間微分は、次のように書くことができる。

$$\ddot{\delta\mathbf{p}} = -\frac{d^2\dot{\Phi}}{dq^2}\delta\mathbf{q} - \frac{d^2\Phi}{dq^2}\delta\mathbf{p}. \tag{4A.1}$$

ここで、格子振動が十分小さいと考えると、ポテンシャルの時間微分が小さいので右辺第１項が無視できる。格子点は、$q = 0, \pm d, \pm 2d, \cdots$ とする。ここで、d～2aである。最近接格子点によってつくられるポテンシャルをq=0近傍で格子振動の大きさの２次のオーダーまで展開すると次のように書くことができる。

$$\ddot{\delta\mathbf{p}} = -\frac{2e^2}{md^3}\delta\mathbf{p}. \tag{4A.2}$$

この時、一次元格子を考えると、比$|\delta\mathbf{p}|/|\delta\mathbf{q}|$ は、次のように見積もることができる。

$$\frac{|\delta\mathbf{p}|}{|\delta\mathbf{q}|} = \sqrt{\frac{2e^2}{md^3}} = \omega_p\sqrt{\frac{1}{12}\left(\frac{2a}{d}\right)^3}. \tag{4A.3}$$

シミュレーションの結果は、比$|\delta\mathbf{p}|/|\delta\mathbf{q}|$は、Γ>170 の領域でおよそ$0.3\omega_p$であった。実際の１成分プラズマは、Γ>170 の領域でbcc型の結晶になるので、式(4A.3)においてd～1.8aとすることができる。この時、比$|\delta\mathbf{p}|/|\delta\mathbf{q}|$ は、$0.29\omega_p$になる。このように簡単なモデルで、固体状態の比$|\delta\mathbf{p}|/|\delta\mathbf{q}|$の特徴（クーロン結合定数によらずおよそ$0.3\omega_p$）が説明できた。もし、液体状態において"d" を実効的な最近接粒子間距離と考えると、クーロン結合定数の減少とともに比$|\delta\mathbf{p}|/|\delta\mathbf{q}|$が増大することになる。このような解釈により、シミュレーションの結果は定性的に説明することができる。

参考文献

1. E.Fermi, J.Pasta and S.Ulam, Los Alamos Scientific Report LA-1940 (1955).
2. 下條　隆嗣、「カオス力学入門」、（近代科学社、1992）.
3. F.M.Izrailev, A.I.Khisaamutdinov and B.V.Chiricov, Rept. INF 252, Novosibirsk (1968).
4. A.N.Kolmogorov, DAN SSSR 98, 527 (1954)
5. V.I.Arnold, Russ. Math. Surveys, 18 (5), 9 (1963)
6. G.M.ザフラフスキー　著、三島　信彦、斉藤　徹也、新藤　茂　訳、「カオスー古典および量子力学系ー」、（現代工学社、1989）.
7. D.Ruelle and F.Takens, Comm.Math.Phys. 20, 167 (1971).
8. M.J.Feigenbaum, J.Stat.Phys. 19, 25 (1978).
9. P.Berge, Y.Pomeau and Ch.Vidal　著、相澤　洋二　訳、「カオスのなかの秩序」、（産業図書、1992）.
10. 谷川　清隆、数理科学６月「古典力学の輝き」、（サイエンス社、1995）.
11. R.M.May, Nature, 261, 459, (1976).
12. T.Geherels, Phys. Today, 38 (2), 32 (1985).
13. T.Y.Li and J.A.York, Am.Math.Monthly 82, 985 (1975).
14. A.J.Lichtenberg and M.A.Lieberman, *Regular and Stochastic Motion, Applied Mathematical Science* Vol.38, (Springer-Verlag, New York 1983).
15. S.ウィギンス　著、丹羽　敏雄　監訳、「非線形の力学系とカオス」、（シュプリンガー・フェアラーク東京、1992）.
16. 森　肇、蔵本　由紀、「散逸構造とカオス」、（岩波書店、1994）.
17. L.D.Landau and E.M.Lifshitz, *Statistical Mechanics*,　(Pergamon Press, 1992）.
18. K. Nishihara et al., Instantaneous Phase-Space Lyapunov Expansion Rates in Strongly Coupled Plasmas, in the Oji International Seminar, Tomakomai, Japan, June 27-July 1, 1994.
19. Y. Ueshima et al. submitted to Phys.Rev.E.
20. D.J.Evans, Phys.Rev.Lett. 69, 395 (1992).

第５章
リアプノフ指数と熱力学量との関係

§5-1　はじめに

最近、リアプノフ指数とマクロな統計量の関係を見出すために熱心な研究が続けられている[1～14]。リアプノフ指数は、位相空間上の初期条件の情報を失う速さである。そしてリアプノフ指数は力学量であり、熱力学量が厳密に定義できないような強度非平衡状態に対しても厳密に定義できる。このような力学量の特性を生かせば、リアプノフ指数は非平衡状態を探る新しいツールになる可能性がある。これまでの研究で、リアプノフ指数に対する多くの公式が提案されている。例えば、Krylov [1]は、剛体球系でリアプノフ指数が衝突周波数に比例することを見出した。Gaspard とNicolis[5]は、２次元のローレンツ気体の拡散係数と正のリアプノフ指数 とコルモゴルフエントロピーを関係づけた。Chaudhuri [8]は、外力が加えられている非線形振動子についてリアプノフ指数の公式を見出し、リアプノフ指数とポテンシャルの２階空間微分の時間相関を関係づけた。Seki [9], Nishihara[10], Barnett[11] は、拡散係数とリアプノフ指数の関係を提示した。しかし、これらの研究は[1～9]、短距離力によって決定されている系か、少数自由度の系を対象としている。

本章では、長距離力によってダイナミクスが決定されている荷電粒子多体系、すなわち、プラズマについて、粒子シミュレーションを通してリアプノフ指数と熱力学量（拡散係数、熱力学状態）の関係を明らかにする。クーロン多体系は長距離力であり、そのダイナミクスは短距離力系とは異なり本質的に多体問題である。そのリアプノフ指数は、短距離力系とは極めて異なることが期待される。また、希薄プラズマにおいてリアプノフ指数と誘電応答関数[15]の直接的な関係を第一原理から導出する。以下に、本章の構成と概要を述べておく。

第２節では、前節で説明したリスケール法を用いて、古典的１成分プラズマ、準量子的１成分プラズマ 、準量子的２成分プラズマの３種類について、そのリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性を示す。 特に、古典的１成分プラズマにおいて広範囲（気体、液体、固体状態）のクーロン結合定数依存性を示す。

第３節では、簡単なモデル（剛体球粒子モデル）[1]におけるリアプノフ指数を解析的に求めて、第２節のシミュレーション得られたそれぞれの熱力学状態のクーロン結合定数依存性との比較をする。

第４節では、希薄プラズマと強結合液体プラズマにおいて、衝突周波数及び、拡散係数とリアプノフ指数の関係について考察する。

第５節では、１成分希薄プラズマにおけるリアプノフ指数を線形化されたハミルトン方程式から第一原理的[16]に求め、誘電応答関数の関数としてのリアプノフ指数の公式を導出する。この公式において、熱平衡１成分希薄プラズマのリアプノフ指数を解析的に評価する。

§5-2　荷電粒子多体系のリアプノフ指数

ここでは、基準軌道とリスケール軌道間の初期変位は、正規分布で運動量空間と位置座標空間のそれぞれ3方向の標準偏差を $\frac{5.0}{\sqrt{3}}\times10^{-3}mv_{th}$ とaに設定して、リスケール法を使い、様々な荷電粒子多体系のリアプノフ指数を計算した。対象とした、荷電粒子多体系は、古典的1成分プラズマ(OCP; θ -> ∞, 電子は点電荷で、イオンは理想的な一様背景）、準量子的1成分プラズマ (QOCP; θ -> l.m.t, 電子は点電荷で、イオンは理想的な一様背景）、準量子的2成分プラズマ (TCP; θ -> l.m.t, イオン、電子ともに点電荷）の3種類[17～20]を考えた。ここで、古典的プラズマとは、距離に反比例した純粋なクーロンポテンシャルを持つプラズマを意味し、準量子的プラズマとは、第2章の§2-3で述べた準量子論的ポテンシャルをもつプラズマを意味する。

まず、最初に古典的1成分プラズマについて述べる。古典的1成分プラズマについては、ほとんど理想プラズマの状態から非常に強結合状態までリアプノフ指数を求めた。Fig.5-1は、プラズマ振動数で規格化したリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性を示した図である。

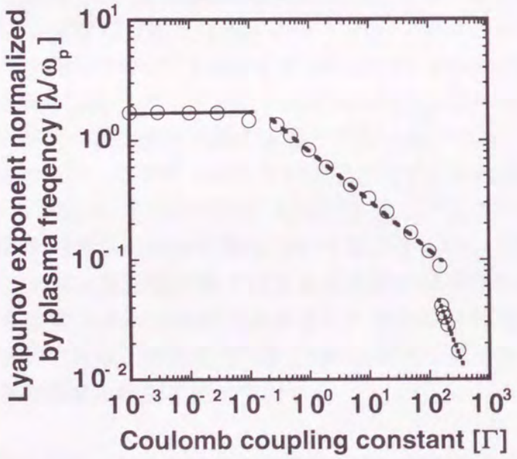


Fig.5-1　古典的1成分プラズマのリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性。縦軸のリアプノフ指数は、プラズマ振動数で規格化している。クーロン結合定数のΓ<<1、1<Γ<170、170<Γの領域は、希薄プラズマ（気体）、強結合プラズマ（液体）、固体プラズマ（固体）に対応している。白丸は、シミュレーションの結果を示しており、実線、破線、点線は、それぞれの領域のシミュレーションの結果から最小2乗法によって引いた線である。

この図から、古典的1成分プラズマのリアプノフ指数は、クーロン結合定数の大きさによって3つの領域があることが分かる。理想プラズマに近い、非常に粒子相関の弱い状態（Γ<0.1）では、リアプノフ指数は、クーロン結合定数によらず、プラズマ周波数と同じオーダーでほぼ一定値である。次に、粒子相関が無視できなくプラズマが液体的に振る舞う状態（1<Γ<150）では、リアプノフ指数は、$\Gamma^{2/5}$に比例している。最後に、より強結合な状態（Γ>170）では、$\Gamma^{6/5}$に比例している。また、Γ～170付近のリアプノフ指数の大きな跳びは、液体状態から固体状態の相転移[18, 21～23]に対応している。Fig.5-2に示すように、粒子の2乗変位（この傾きの1/6倍が拡散係数に対応する）は、Γ<170では時間に比例して増大する、すなわち、有限の拡散係数を持つが、Γ=200では増大せず、一定の領域で振動するのみ（拡散係数がゼロとなる）となる。この事実からもΓ>170において、強結合プラズマが固体になっていることが分かる。また、この振動振幅の大きさは、0.5a程度であることが分かる。

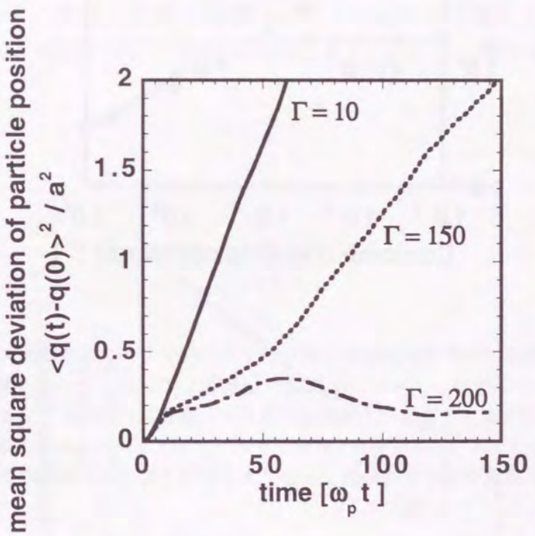


Fig.5-2　古典的1成分プラズマの粒子の二乗変位の時間発展。縦軸の二乗変位は、粒子球半径の二乗で規格化している。実線、破線、一点鎖線は、それぞれのΓ=10、150、200のシミュレーションの結果を示している。

リアプノフ指数は、力学量であるにも関わらず、このように、熱力学的な状態や相

転移に対して鋭敏に応答することが分かる。この結果は、リアプノフ指数が輸送過程などのマクロな性質の探針になる可能性を示唆している。

次に、古典的１成分、準量子的１成分プラズマ（θ=１）の２種類についてそれらのリアプノフ指数について比較する。Fig.5-3 は、プラズマ振動数で規格化された リアプノフ指数のクーロン結合定数依存性を示した図である。

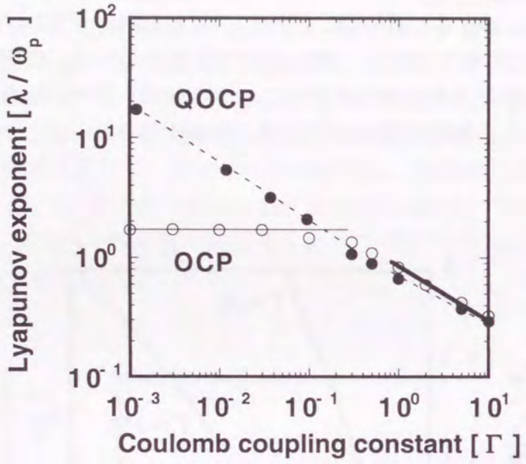


Fig.5-3　準量子的１成分プラズマと古典的１成分プラズマのリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性。縦軸のリアプノフ指数は、プラズマ振動数で規格化している。クーロン結合定数のΓ<<1、1<Γ<10の領域は、希薄プラズマ（気体）、強結合プラズマ（液体）に対応している。白丸と黒丸は、それぞれ、古典的１成分プラズマと準量子的１成分プラズマのシミュレーションの結果を示しており、破線、実線は、それぞれ準量子論的と古典的１成分プラズマのそれぞれの領域のシミュレーションの結果から最小２乗法によって引いた線である。

これら２種類のプラズマのリアプノフ指数は、それぞれ、Γ>1の領域では、クーロン結合定数に関して同じ依存性を持つが、Γ<1において異なる依存性を持っていることがわかる。この結果は、次のように説明できる。Γ>1の領域では、クーロン反発力が大きく、粒子間距離が0.5a以下になる粒子はほとんど存在しないため、0.5a以上の距離におけるポテンシャルの距離依存性が粒子のダイナッミクスを決定していると考えられる。第２章のFig.2-2をから明らかなようにθ＞１での準量子論的ポテンシャ

ルは、0.5a以上は、純粋なクーロンポテンシャルとほとんど変わらないので、Γ>1の領域でのリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性は等しくなるのである。また、Γ<1において準量子的１成分プラズマでは、リアプノフ指数は$\Gamma^{-1/2}$に比例し、その依存性が古典的１成分プラズマと著しく異なる。この原因は以下の通りである。クーロン結合定数が小さいとき、粒子球半径より内側の粒子間距離では、Deutchポテンシャルは Pauliの排他効果から生じる項が主要項となる。第２章で述べたように、このとき熱エネルギーで規格化された準量子論的ポテンシャルはクーロン結合定数によらず同一の距離依存性（粒子球半径で規格化した場合）を与える。すなわち、粒子球半径と熱速度で規格化したリアプノフ指数はクーロン結合定数に依存しないはずである。プラズマ振動数は$\Gamma^{1/2}v_{th}/a$に比例することを用いると、準量子的１成分プラズマでのプラズマ振動数で規格化したリアプノフ指数は$\Gamma^{-1/2}$に比例することが説明できる。

最後に、準量子的２成分プラズマのリアプノフ指数について考察する。Fig.5-4 は、0.1<Γ<10において、比較のため３種類のプラズマについて規格化されたリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性を示した図である。ただし、電子縮退度は１に固定している。

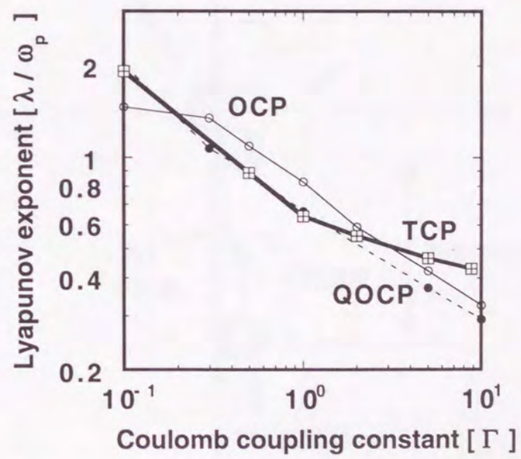


Fig.5-4　準量子的２成分プラズマ、準量子的１成分プラズマ、古典的１成分プラズマのリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性。縦軸のリアプノフ指数は、プラズマ振動数で規格化している。クーロン結合定数のΓ<<1、1<Γ<10の領域は、希薄プラズマ（気体）、強結合プラズマ（液体）に対応している。四角と黒丸と白丸は、それぞれ、２成分、準量子的１成分と古典的１成分プラズマのシミュレーションの結果を示している。

Γ<1の領域では、準量子的２成分プラズマのリアプノフ指数は、準量子的１成分プラズマのものとほとんど一致している。これは、クーロン結合定数の小さなところでは、パウリの排他効果の無い電子ーイオン間の相互作用ポテンシャルが小さくなり、実質的に電子の１成分プラズマと同様に振る舞うことになるためである。Γ>1の領域では、イオンと電子の相互作用を無視できなくなる。その結果、イオンと電子の相互作用のためリアプノフ指数は、１成分プラズマに比べて大きくなる。また、イオンと電子の相互作用は、本質的に引力であり１成分プラズマのように排除体積は存在しなく、極めて接近した散乱が生じるので、１成分プラズマのものと異なるリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性を持つことになる。次の章で詳しく述べるが、ちなみに、Γ>1の状態での１成分強結合プラズマのリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性は、排除体積、すなわち粒子球半径で決定されている。

§5-3　リアプノフ指数のクーロン結合定数依存性に関する考察

前節で、リアプノフ指数が熱力学状態によって、大きくその特徴を変化させることを見出した。前節の考察より、古典１成分プラズマについての理解が本質的に重要であると考えられるため、本節では、古典１成分プラズマの リアプノフ指数のクーロン結合定数依存性についてさらに考察を深める。初期情報の喪失速度の 力学量であるリアプノフ指数とマクロな情報の喪失に関する統計力学量（衝突周波数、拡散係数など）との関係についても議論する。

最初に、シミュレーションの結果との比較対象として、単純な系である剛体粒子系（単に、粒子の半径でステップ関数的に発散するポテンシャルを持つ粒子、したがって、慣性モーメントなどはない。）のリアプノフ指数[1]を考える。この系で、粒子の衝突は常に２体間でしか起こらないと仮定すると、リアプノフ指数は、次のようにして簡単に評価することができる。Fig.5-5は、２粒子が衝突する状況を模式的に書いたものである。

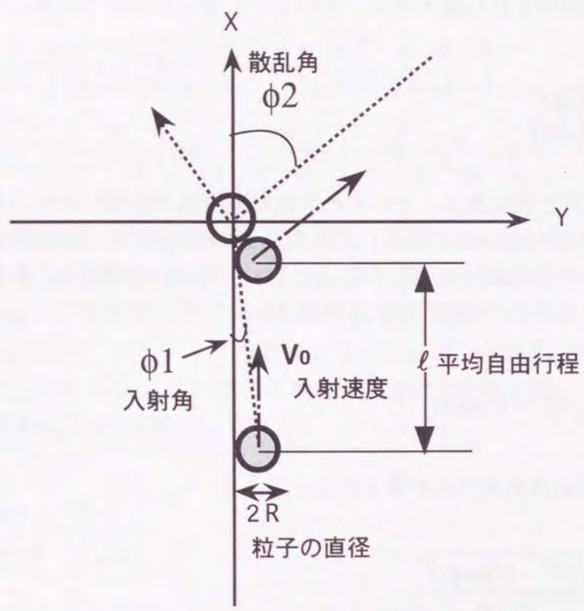


Fig.5-5　２つの剛体球粒子が衝突する状況の模式図。下方の灰色の粒子は、上方に進んでいき、白丸の粒子と衝突して右斜め上方へ散乱される。ただし、衝突前は、白い粒子は止まっている座標系で記述している。

剛体粒子の２体衝突でのリアプノフ指数を計算するためには、わずかな初期値のずれ（Δ_0）に対応して１回の衝突で散乱後の軌道がどの程度ずれるか（Δ）を評価しなければならない。衝突によって、初期情報が完全に喪失してしまうので、衝突時間をτ_c（平均的な粒子の相対速度V_0で平均自由行程ℓを進むのに要する時間）とすれば、平均的な軌道発散量としてのリアプノフ指数は、次のように評価することができる。

$$\Delta = \Delta_0 \exp(\lambda \tau_c) \quad \rightarrow \lambda \sim \frac{1}{\tau_c} \ln\left[\frac{\Delta}{\Delta_0}\right]. \tag{5.1}$$

重要な結論は、リアプノフ指数が衝突間の時間τ_cに反比例する、すなわち、衝突周波数に比例することである。ただし、一般的に対数項は、１より大きいので、リアプノフ指数は衝突周波数より大きい。ここで、対数の中身を評価するために、入射角$\phi 1$から微小にずれた一回の衝突で散乱角$\phi 2$がどのようにずれるかを考える。衝突前後での位置座標のずれの拡大率は、次のように書くことができる。

$$\frac{\Delta}{\Delta_0} = \left|\frac{\ell \delta\phi 2}{\ell \delta\phi 1}\right| = \left|\frac{\partial \phi 2}{\partial \phi 1}\right|. \tag{5.2}$$

ここで、入射角と散乱角は、それぞれ、絶対座標系で計測したものである（絶対的なずれを評価するためには、微小にずれた二つの衝突を同一の座標で記述しなければならない）。白丸の粒子の中心を原点にして、粒子の半径をRとすると、衝突するときの灰色粒子の中心の座標は次のようになる。

$$\left(\ell \tan\phi 1 \ , \ -\sqrt{4R^2 - (\ell \tan\phi 1)^2}\right). \tag{5.3}$$

このとき、$\phi 2$は次のように計算される。

$$\phi 2 = \mathrm{Arc}\tan \frac{\sqrt{4R^2 - (\ell \tan\phi 1)^2}}{\ell \tan\phi 1}. \tag{5.4}$$

したがって、衝突前後での位置座標のずれの拡大率は、

$$\left|\frac{\partial \phi 2}{\partial \phi 1}\right| = \frac{\ell\left(1 + \tan\phi 1^2\right)}{\sqrt{4R^2 - (\ell \tan\phi 1)^2}}. \tag{5.5}$$

になる。また、入射角$\phi 1$にたいして、位相平均（$\ell \tan\phi 1$を0～Rまで平均する。）を取ると、平均的な拡大率が求められる。

$$\overline{\left|\frac{\partial \phi 2}{\partial \phi 1}\right|} = \frac{\pi}{4}\frac{\ell^2 + R^2}{\ell R} = \frac{\pi}{4}\left(\frac{\ell}{R} + \frac{R}{\ell}\right). \tag{5.6}$$

剛体粒子系の数密度は $n = \left(4\pi a^3/3\right)^{-1}$ 、断面積は$\sigma = \pi R^2$,で与えられるので、平均自由行程は、 $\ell \equiv (n\sigma)^{-1} = 4a^3/3R^2$ と書くことができる。粒子の大きさを$R \sim 0.5 \times 10^{-10}\mathrm{m}$（原子半径）であるとすると、これらの値を代入して、剛体粒子系のリアプノフ指数は、次のように評価することができる。

$$\lambda \sim \frac{V_0}{\ell} \ln\left[\frac{\pi}{4}\left(\frac{\ell}{R} + \frac{R}{\ell}\right)\right] = \frac{3}{2}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{v_{th}}{a}\left(\frac{R}{a}\right)^2 \ln\left[\frac{\pi}{3}\left(\frac{a}{R}\right)^3 + \frac{3\pi}{16}\left(\frac{R}{a}\right)^3\right]$$
$$\sim 10^{13}\sqrt{\frac{m_i}{m}}\sqrt{\frac{T}{1eV}}\left[\frac{n}{10^{23}\mathrm{cm}^{-3}}\right]\ln\left\{\frac{1}{6}\left[\frac{n}{10^{23}\mathrm{cm}^{-3}}\right]^{-1} + 9\left[\frac{n}{10^{23}\mathrm{cm}^{-3}}\right]\right\} \ \mathrm{s}^{-1}. \tag{5.7}$$

ここで、粒子の速度分布はMaxwell分布を仮定し、相対速度と熱速度の間には、$V_0 = 2\sqrt{2/\pi}v_{th}$のような関係があるとした。例えば、室温（300K）、一気圧、または、数密度$3 \times 10^{19}\mathrm{cm}^{-3}$での窒素（空気）を 剛体粒子系と考えると、$v_{th} \sim 350\mathrm{m/s}$、$a = 2.1 \times 10^{-9}\mathrm{m}$となり、リアプノフ指数は、$\lambda \sim 1.2 \times 10^8 \times \ln\left[7.8 \times 10^4\right] \sim 1.3 \times 10^9 \ \mathrm{s}^{-1}$となる。最後に、クーロン系におけるリアプノフ指数と比較しやすくするために、リアプノフ指数をv_{th}とaで規格化しておく。

$$\frac{\lambda}{v_{th}/a} \sim \frac{a}{\ell}\ln\left[\frac{\pi}{4}\left(\frac{\ell}{R} + \frac{R}{\ell}\right)\right]. \tag{5.8}$$

前節で述べた古典１成分プラズマの リアプノフ指数について、上述の剛体粒子系のリアプノフ指数と比較するために、Fig.5-1のリアプノフ指数の規格化をv_{th}/aの規格化に変更する。その結果、リアプノフ指数のクーロン結合定数依存性はFig.5-6のようになる。

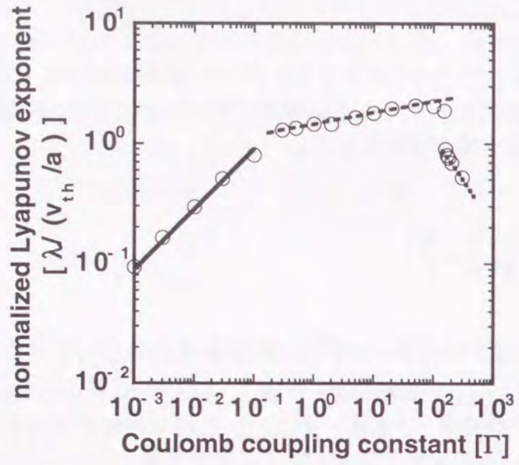


Fig.5-6　古典的１成分プラズマのリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性。縦軸のリアプノフ指数は、熱速度で粒子球半径を横切る時間の逆数（v_{th}/a）で規格化している。クーロン結合定数のΓ<<1、1<Γ<170、170<Γの領域は、希薄プラズマ（気体）、強結合プラズマ（液体）、固体プラズマ（固体）に対応している。白丸は、シミュレーションの結果を示しており、実線、破線、点線は、それぞれの領域のシミュレーションの結果から最小２乗法によって引いた線である。

理想プラズマに近い、非常に粒子相関の弱い状態（Γ<0.1）では、リアプノフ指数は、$\Gamma^{1/2}$に比例している。次に、粒子相関が無視できなくプラズマが液体的に振る舞う状態（1<Γ<150）では、リアプノフ指数は、ほとんど一定（$\Gamma^{1/10}$に比例している。）で1のオーダーである。最後に、固体状態（Γ>170）では$\Gamma^{-7/10}$に比例している。

Appendix 5-Aより粒子相関の非常に弱い状態（Γ<0.1）では、古典１成分プラズマの平均自由行程と剛体的粒子半径は、次のように評価される。

$$\ell \sim \lambda_D \Gamma^{-\frac{3}{2}} \left(\ln \Lambda_D\right)^{-1} \sim a\Gamma^{-2}\left(\ln \Gamma^{-\frac{3}{2}}\right)^{-1}, \qquad (5.9)$$

$$R \sim a\Gamma.$$

これらの値を式(5.8)に代入すると、対数の項をのぞいてリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性は、次のように評価できる。

$$\frac{\lambda}{v_{th}/a} \sim \Gamma^2\left(\ln \Gamma^{-\frac{3}{2}}\right)^{-1} \ln\left[\frac{\pi}{4}\left\{\Gamma^{-3}\ln \Gamma^{-\frac{3}{2}} + \Gamma^3\left(\ln \Gamma^{-\frac{3}{2}}\right)^{-1}\right\}\right] \sim \Gamma^2. \qquad (5.10)$$

この値は、古典１成分プラズマのシミュレーションの結果と大きく食い違っている（クーロン結合定数の小さいところで極めて過少評価となる）。この食い違いの原因は、プラズマの場合、剛体粒子系とは異なり粒子の散乱は小角散乱により決定され、Fig.5-5のような散乱の単なる平均の評価方法は妥当でないことからきている。粒子相関が弱い状態でのリアプノフ指数についての説明は、次の節でのより厳密な取り扱いを待たなければならない。

次に、粒子相関が強い液体状態（1<Γ<150）について考察する。このような状態では、粒子間の反発力が非常に大きく、粒子はお互い相手の粒子球半径（a）内にほとんど入ることができないので、古典１成分プラズマの平均自由行程と剛体的粒子半径は、$\ell \sim a$ ， $R \sim a$のように評価される。実際、シミュレーションでも1<Γ<150の範囲では２粒子間の再接近距離は、0.5aから0.9a程度しか変動しないことが動径分布関数から観測されている。この値$\ell \sim a$ ， $R \sim a$を剛体粒子系の式(5.8)に代入すると、リアプノフ指数は、次のように評価できる。

$$\frac{\lambda}{v_{th}/a} \sim 0.5. \qquad (5.11)$$

この値は、クーロン結合定数によらず一定値であり、古典１成分プラズマのシミュレーションの結果と定性的には、よい一致を示す。また、定量的には２から３倍ほど小さな値を示すが、このような粗いアナロジーであることを考えると、物理内容は十分とらえていると思われる。ちなみに、この食い違いの原因は、1<Γ<150の範囲のプラズマでは、粒子の散乱は２体衝突だけでなく、このアナロジーで取り扱えていない多体衝突が起こっているためであると思われる。

最後に、固体状態（170<Γ）について考察する。固体状態では、粒子は、格子点に束縛されてしまい、格子点を中心に振動するだけになるので、剛体粒子の衝突のアナロジーは、もはや適用できない。このような状況では、粒子モデルより非線形格子モデルの方が現象をより良く説明するはずである。この固体状態の系は、熱エネルギーを持つため有限の格子振動振幅を持つ非線形格子とみなすことができる。対

称性を考慮すると格子点の近傍でポテンシャルは、次のように展開できる。

$$\frac{\phi}{2e^2/d}=\frac{d}{q}\sim 1+\left(\frac{\delta q}{d}\right)^2+\left(\frac{\delta q}{d}\right)^4,$$
$$q\equiv d+\delta q. \tag{5.12}$$

ここで、dは格子間距離を示す。第１項目は、定数項でポテンシャルの原点を決めるだけである。第２項目が、調和振動の項であり、最後の項が最初に現れる非線形項である。第２項目の係数に対する第３項目の係数の比βは、非線形度と呼ばれ、非線形格子の非線形性の強さを表す。FPU問題の時の弱非線形格子（β<<1）と異なり、１成分プラズマ結晶格子自体は、β=1であり、非常に強い非線形性を持ってることが分かる。この展開されたポテンシャルから、格子振動振幅δqは、次のように見積もることができる。

$$\delta q^2\sim\frac{d^2}{2}\left\{\frac{d}{a\Gamma}-\left(\frac{d}{a\Gamma}\right)^3\right\}. \tag{5.13}$$

前節で述べたように、１成分プラズマはΓ～170 の領域でbcc型の結晶になるのでd~1.8aとすることができ、上式から格子振動の大きさδq^2が1.0×10^{-2}aと見積もられる。ちなみに、最近の研究[4]で、非線形格子の非線形度βと規格化された格子振動エネルギー（$\delta q/d)^2$との積が一定であれば、その系の軌道不安定性、すなわち、リアプノフ指数は、等しいことが明らかにされている。１成分プラズマ結晶は、非常に強い非線形性を持ってるにもかかわらず、このように振幅が十分小さいので、弱い非線形格子と見なすことができるのである。最近の研究で、この様々な非線形格子において、積β（$\delta q/d)^2$ がある程度大きい領域で、リアプノフ指数が、格子振動エネルギーδq^2の2/3乗に比例することが見出されている[4]。本研究において、系の軌道不安定性、すなわち、リアプノフ指数が、結晶状態でδq^2の7/10乗に比例していることは、広く非線形格子一般に認められる傾向の現れであると思われる。

§5-4　衝突周波数、および拡散係数とリアプノフ指数の関係

リアプノフ指数（軌道不安定性の強さ）は、ある意味で非平衡状態から平衡状態への緩和の速さ意味するので、軌道不安定性の強さと巨視的な緩和の速さを示す量である衝突周波数や輸送係数との間に大きな相関があることが予想される。しかし、現在まで、これらの量の関係は、殆ど理解されていない。この節では、古典的１成分プラズマに対象を絞り、リアプノフ指数と衝突周波数、もしくは拡散係数との関係を明らかにする。

Appendix 5-Aから、粒子相関が非常に小さい、すなわち、Γ<<1の領域では衝突周波数は解析的[15]に計算でき、次のように評価される。

$$\nu\sim\omega_p\Gamma^{\frac{3}{2}}\ln\Lambda_D\sim\frac{v_{th}}{a}\Gamma^2\ln\Lambda_D. \tag{5.14}$$

また、衝突周波数から拡散係数は、次のように評価できる。

$$D\sim v_{th}^2/\nu\sim\left(\frac{v_{th}^2}{\omega_p}\right)\Gamma^{-\frac{3}{2}}(\ln\Lambda_D)^{-1}\sim a^2\omega_p\Gamma^{-\frac{5}{2}}(\ln\Lambda_D)^{-1}. \tag{5.15}$$

Γ<<1の領域でのシミュレーションの結果から、リアプノフ指数と衝突周波数、また、リアプノフ指数と拡散係数の関係は次のようになる。

$$\frac{\lambda}{v_{th}/a}\propto\left(\frac{\nu}{v_{th}/a}\right)^{\frac{1}{4}},\quad \frac{\lambda}{v_{th}/a}\propto\left(\frac{D}{v_{th}^2/\omega_p}\right)^{-3}\propto\left(\frac{D}{a^2/\omega_p}\right)^{-5}. \tag{5.16}$$

つぎに、強結合プラズマ、すなわち、Γ>1の範囲では、多体衝突などの高密度効果があるため衝突周波数は、モデルを用いなければ計算できない。粒子シミュレーションでは、速度自己相関関数や粒子の平均二乗変位から比較的簡単に拡散係数が求められる。Fig.5-7は、このように粒子シミュレーションから求めた拡散係数のクーロン結合定数依存性である。速度自己相関関数を時間積分から評価した拡散係数と粒子の平均２乗変位の時間勾配から評価される拡散係数は、誤差数%範囲で一致していることを確認している。

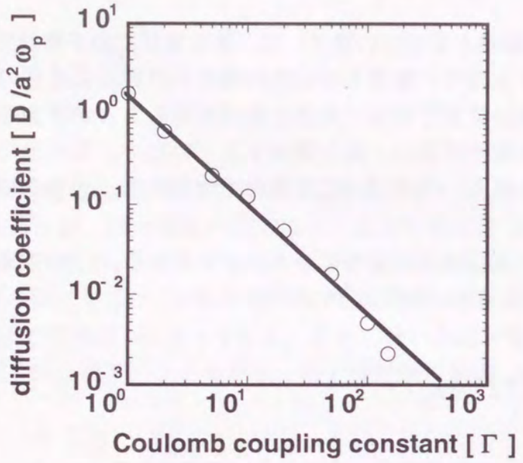


Fig.5-7　古典的１成分プラズマの拡散係数のクーロン結合定数依存性。縦軸の拡散係数は、プラズマ振動数と粒子球半径の二乗（$\omega_p a^2$）で規格化している。白丸は、シミュレーションの結果を示している。実線は、シミュレーションの結果から最小２乗法によって引いた線である。

Fig.5-7から見てわかる通り、液体領域1<Γ<150において、（v_{th}/a^2）で規格化された拡散係数は$\Gamma^{-6/5}$に比例している。この結果から、この領域におけるリアプノフ指数と拡散係数の関係は次のようになる。

$$\frac{\lambda}{\omega_p} \propto \left(\frac{D}{a^2/\omega_p} \right)^{\frac{1}{3}}. \qquad (5.17)$$

すなわち、リアプノフ指数は、拡散係数の３乗根に比例しているのである。

ちなみに、前にも述べたが、Γ>170の領域では、プラズマは固体になっており、速度自己相関関数は、長時間振動を続けてその時間積分は収束せず、粒子の平均２乗変位は、時間に対して一定値にとどまる、すなわち、拡散係数がゼロとなる。

最後に準量子的２成分プラズマと準量子的１成分プラズマと古典的１成分プラズマについて、リアプノフ指数と拡散係数の依存性についてFig.5-8にまとめた。この図より、強結合液体状態において、プラズマの種類によらずリアプノフ指数は、拡散

係数の３乗根に比例していることが分かる。

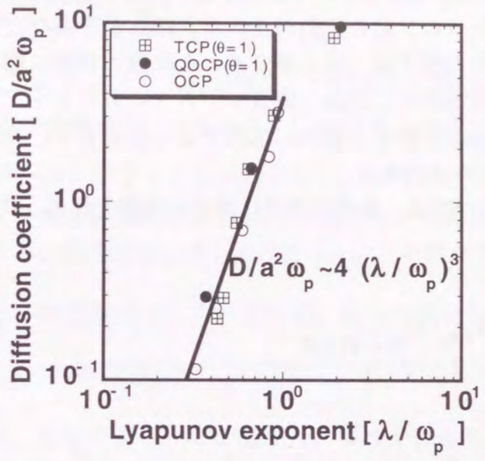


Fig.5-8　準量子的２成分プラズマと準量子的１成分プラズマと古典的１成分プラズマの拡散係数のクーロン結合定数依存性。準量子的プラズマの電子縮退度は1にしている。縦軸の拡散係数は、粒子の平均２乗変位の時間勾配から求め、プラズマ振動数と粒子球半径の二乗（$\omega_p a^2$）で規格化している。四角と黒丸と白丸は、それぞれ、２成分、準量子的１成分と古典的１成分プラズマのシミュレーションの結果を示している。実線は、シミュレーションの結果から最小２乗法によって引いた線である。

§5-5　1成分希薄プラズマにおけるリアプノフ指数と誘電応答関数の関係

3節で考察したように、希薄な（粒子相関が弱い状態）古典1成分プラズマにおけるリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性は、剛体粒子系などの簡単なモデルでは、説明できない。この節では、第4章で求めた軌道の摂動に関する運動方程式から、第一原理的に希薄極限の古典的1成分プラズマにおけるリアプノフ指数を評価する。さらに、この導出過程を一般的に拡張することにより、リアプノフ指数と誘電応答関数の関係を明らかにする。

古典的1成分プラズマでは、軌道の摂動に関する運動方程式、式(4.5)は、次のように書くことができる。

$$\dot{\boldsymbol{\delta}} \equiv \begin{pmatrix} \dot{\delta\mathbf{p}} \\ \dot{\delta\mathbf{q}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{V}_{\mathbf{q}_i\mathbf{q}_j}(t) \\ \mathbf{m}^{-1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \boldsymbol{\delta} \equiv \mathbf{T}(\boldsymbol{\Lambda})\boldsymbol{\delta}. \tag{5.18}$$

ここで、$\mathbf{V}_{\mathbf{q}_i\mathbf{q}_j}(t) \equiv \boldsymbol{\sigma}_{ij}\sum_{\ell\neq i}^{N}\psi_{i\ell}(t) - (\mathbf{1}-\boldsymbol{\sigma}_{ij})\psi_{ij}(t)$ 、$\psi_{i\ell}(t) \equiv \dfrac{\partial^2}{\partial\mathbf{q}_i\partial\mathbf{q}_i}\dfrac{e^2}{|\mathbf{q}_i(t)-\mathbf{q}_\ell(t)|}$ である。

式(5.18)において、$\boldsymbol{\sigma}_{ij}$，$\mathbf{m}^{-1}$，$\mathbf{0}$ は、それぞれクロネッカーのデルタ、m^{-1}の成分を持つ対角テンソル、ゼロテンソルを表している。$\psi_{i\ell}$は、ℓ番目の粒子によってつくられるクーロンポテンシャルの空間2階微分を表している。すなわち、$\sum_{\ell\neq i}\psi_{i\ell}\delta\mathbf{q}_i$は、i番目の粒子とその粒子から微少量$\delta\mathbf{q}_i$ずれた位置にある仮想的な粒子にかかる力の差を表している。この力の差が近接軌道間距離の発散速度を決めているのである。

最大リアプノフ指数は、式(5.18)の軌道の関数である行列$\mathbf{T}(\boldsymbol{\Lambda})$の最大固有値として定義される。しかしながら、その行列の成分が時間の関数であるので、最大リアプノフ指数を式(5.18)から直接計算することはできない。そこで、式(5.18)を解くときにストカスティックな微分方程式に対するVan Kampen [16] の方法を採用した。この方法についてAppendix 5-Bに詳しく述べるが、ここで簡単にその方法について説明する。$\mathbf{V}_{\mathbf{qq}}$が有限の相関時間τ_cをもつことを仮定する。すなわち、$|t_2-t_1|>\tau_c$を満たす2つの時刻t_1とt_2において、$\mathbf{V}_{\mathbf{qq}}(t_1)$が統計的に$\mathbf{V}_{\mathbf{qq}}(t_2)$と無相関であると仮定する。0次の軌道$\boldsymbol{\Lambda}$に対して平均された摂動$\boldsymbol{\delta}$を考えると、式(5.18)を統計平均した摂動の運動方程式は次のように書くことができる。

$$\langle\dot{\boldsymbol{\delta}}_i\rangle = \sum_j\left\langle\bar{\mathbf{T}}_{ij}\right\rangle\langle\boldsymbol{\delta}_j\rangle. \tag{5.19}$$

ここで、$\left\langle\bar{\mathbf{T}}_{ij}\right\rangle = \begin{pmatrix} -\int_0^\infty d\tau\left(\frac{\tau}{m}\right)^2\left\langle\sum_{\ell=1}^{N}\mathbf{V}_{\mathbf{q}_i\mathbf{q}_\ell}(0)\mathbf{V}_{\mathbf{q}_\ell\mathbf{q}_j}(-\tau)\right\rangle & \int_0^\infty d\tau\frac{\tau}{m}\left\langle\sum_{\ell=1}^{N}\mathbf{V}_{\mathbf{q}_i\mathbf{q}_\ell}(0)\mathbf{V}_{\mathbf{q}_\ell\mathbf{q}_j}(-\tau)\right\rangle \\ \mathbf{m}^{-1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}$.

ブラケット <>は、アンサンブル平均を表す。一般的に、行列の成分の主要項は、$\mathbf{V}_{\mathbf{q}_i\mathbf{q}_\ell}$の時間相関関数の時間積分、すなわち、$\int_0^\infty d\tau\left\langle\sum\mathbf{V}_{\mathbf{q}_i\mathbf{q}_\ell}(0)\mathbf{V}_{\mathbf{q}_\ell\mathbf{q}_j}(-\tau)\right\rangle$である。しかしながら、重力やクーロンポテンシャルのように、ポテンシャルが$|\mathbf{q}_i-\mathbf{q}_j|^{-1}$に比例するような系では、時間相関関数の時間積分、すなわち、時間についてゼロ次のモーメントの項はなくなり、時間に対して1次のモーメントの項が主要項となる。

次に、行列$\left\langle\bar{\mathbf{T}}_{ij}\right\rangle$の階数を小さくするために、以下の仮定をもうける。$j\neq i$の場合の$\mathbf{V}_{\mathbf{q}_i\mathbf{q}_\ell}(0)$と$\mathbf{V}_{\mathbf{q}_\ell\mathbf{q}_j}(-\tau)$の相関時間が、j=iの場合の相関時間より短いと仮定すると、交差項$\sum_{j\neq i}\left\langle\bar{\mathbf{T}}_{ij}\right\rangle\langle\boldsymbol{\delta}_j\rangle$は、無視できる。この仮定は、少なくとも粒子相関の小さいプラズマ（希薄なプラズマ）では、正当化される。その結果、$\langle\dot{\boldsymbol{\delta}}_i\rangle = \sum_j\left\langle\bar{\mathbf{T}}_{ij}\right\rangle\langle\boldsymbol{\delta}_j\rangle$の計算は、$\langle\dot{\boldsymbol{\delta}}_i\rangle = \left\langle\bar{\mathbf{T}}_{ii}\right\rangle\langle\boldsymbol{\delta}_i\rangle$に近似できる。ここで、階数を小さくした行列は、次のように書くことができる。

$$\left\langle\bar{\mathbf{T}}_{ii}\right\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{1}{3}\int_0^\infty d\tau\left(\frac{\tau}{m}\right)^2 Tr\left\langle\sum_{\ell=1}^{N}\mathbf{V}_{\mathbf{q}_i\mathbf{q}_\ell}(0)\mathbf{V}_{\mathbf{q}_\ell\mathbf{q}_i}(-\tau)\right\rangle & \frac{1}{3}\int_0^\infty d\tau\frac{\tau}{m}Tr\left\langle\sum_{\ell=1}^{N}\mathbf{V}_{\mathbf{q}_i\mathbf{q}_\ell}(0)\mathbf{V}_{\mathbf{q}_\ell\mathbf{q}_i}(-\tau)\right\rangle \\ m^{-1} & 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ m^{-1} & 0 \end{pmatrix}. \tag{5.20}$$

行列の成分の係数1/3は、空間の等方性の仮定からくるものである。行列の要素のc_{11}とc_{12}は、それぞれ、時間に対して2次と1次のモーメントである。相関時間τ_cは、希薄なプラズマでは 短いので、後で確認されるように、c_{11} は、$\sqrt{c_{12}/m}$より小さい。その時、最大リアプノフ指数は、近似的に$\lambda\sim\sqrt{c_{12}/m}$のように評価できる。この計算の利便性により、要素$c_{12}$を2つの項$c_{12}=c_{121}+c_{122}$に分けておく。この時、

$$\frac{c_{121}}{m} \equiv \int_0^\infty d\tau \frac{\tau}{3m^2} \mathrm{Tr}\left\langle \sum_{\ell\neq i}^{N} \psi_{i\ell}(0)\psi_{\ell i}(-\tau)\right\rangle, \tag{5.21}$$

$$\frac{c_{122}}{m} \equiv \int_0^\infty d\tau \frac{\tau}{3m^2} \mathrm{Tr}\left\langle \sum_{\ell\neq i}^{N} \psi_{i\ell}(0) \sum_{\ell\neq i}^{N} \psi_{i\ell}(-\tau)\right\rangle. \tag{5.22}$$

と定義している。

前に考察したように、$\psi_{i\ell}$の定義から、式(5.21, 22)は、リアプノフ指数が、加速度の差に関する相関関数の時間に対する１次モーメントでの２乗根によって評価できることを示している。２つの項c_{121}とc_{122}は、非常に似た形をしているが、$\psi_{i\ell} = \psi_{\ell i}$であることを使うと、$c_{122}$は、$\sum_{\ell\neq i}\psi_{i\ell}(0)\psi_{\ell i}(-\tau)$と$\sum_{\ell_1\neq i}\left(\psi_{i\ell_1}(0)\sum_{\ell_2\neq i,\ell_1}\psi_{i\ell_2}(-\tau)\right)$の項から構成されていることがわかる。最初の項は、$c_{121}$と全く同じであり、後の項は、i番目の粒子に関してt=0でℓ_1番目の粒子が与える加速度の差とt=-τでℓ_2番目の粒子が与える加速度の差の時間相関を含んでいる。この相関は、希薄なプラズマでさえ無視することはできない。後で示すが、少なくとも熱平衡下では$c_{122} = 2\,c_{121}$である。アンサンブル平均を１体の分布関数による平均に置き換えることと、0次の軌道に弾道（直線軌道）近似 [15]$\mathbf{q}_i(-\tau) = \mathbf{q}_i(0) - \mathbf{p}_i(0)\tau/m$を用いて、$c_{122}$と$c_{121}$の時間相関を計算する。この近似は、粒子間の衝突が非常に希にしか起こらないときに有効で妥当な仮定であり、希薄なプラズマではよく使われる仮定である。

c_{121}とc_{122}の項を実際に計算する場合、それぞれ粒子和の取り方が異なるので異なった方法で評価することになる。まず、１体の分布関数による平均ではそれぞれのℓ番目粒子が区別できないので、c_{122}のℓに関する粒子和$\sum_{\ell\neq i}$は、(N-1)に置き換えられる。また、ポアッソン方程式を通して、ポテンシャルの空間２階微分が電荷密度の揺らぎ$\delta n(\mathbf{q},t) \equiv \sum\delta(\mathbf{q}-\mathbf{q}_i(t)) - n$と結びついていることを利用すると、$c_{122}$では、$\sum_{\ell\neq i}\psi_{i\ell}$の相関は、次のように、電荷密度揺らぎ相関に置き換えることができる。

$$\mathrm{Tr}\left\langle \sum_{\ell\neq i}^{N}\psi_{i\ell}(0)\sum_{\ell\neq i}^{N}\psi_{i\ell}(-\tau)\right\rangle = \left(4\pi e^2\right)^2\left\langle \delta n(\mathbf{q}(0),0)\delta n(\mathbf{q}(-\tau),-\tau)\right\rangle$$
$$= \frac{\left(4\pi e^2\right)^2}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k}^3 d\omega e^{i\left(k\cdot\frac{p}{m}-\omega\right)\tau}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{q}^3 d\tau\left\langle \delta n(0,0)\delta n(\mathbf{q},t)\right\rangle e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}-\omega)t}. \tag{5.23}$$

これらの結果を使うと、c_{121}とc_{122}は、次のように書くことができる。

$$\frac{c_{121}}{m} = \frac{N-1}{3}\int_0^\infty \tau d\tau \iint d^3\mathbf{p}_i d^3\mathbf{p}_\ell f(\mathbf{p}_i) f(\mathbf{p}_\ell)$$
$$\times\left(\frac{n}{N}\right)^2 \iint d^3\mathbf{q}_i d^3\mathbf{q}_\ell \frac{\left(4\pi e^2\right)^2}{(2\pi)^6}\iint d^3\mathbf{k}_0 d^3\mathbf{k}_\tau \frac{(\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{k}_\tau)^2}{k_0^2 k_\tau^2} e^{i(k_0+k_\tau)\cdot(q_i-q_\ell)} e^{-ik_\tau\cdot(p_i-p_\ell)\tau/m}. \tag{5.24}$$

$$\frac{c_{122}}{m} = \frac{1}{3}\int_0^\infty \tau d\tau \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p}^3 f(\mathbf{p})\frac{\left(4\pi e^2\right)^2}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k}^3\int_{-\infty}^{\infty} d\omega S(\mathbf{k},\omega) e^{i\left(k\cdot\frac{p}{m}-\omega\right)\tau}. \tag{5.25}$$

c_{121}の計算の時に、直線軌道で粒子位置に関するFourier 変換を使って$\psi_{i\ell}(-\tau) = (2\pi)^{-3}\left(4\pi e^2\right)\iint d^3\mathbf{k}_\tau\left(\mathbf{k}_\tau\mathbf{k}_\tau/k_\tau^2\right)e^{ik_\tau\cdot(q_i-q_\ell)}e^{-ik_\tau\cdot(p_i-p_\ell)\tau/m}$の関係を使った。また、$S(\mathbf{k},\omega) \equiv \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{q}^3 dt\left\langle \delta n(0,0)\delta n(\mathbf{q},t)\right\rangle e^{-i(k\cdot q-\omega)t}$で、一般的に動的構造因子[15]と呼ばれる量である。ここで、$f(\mathbf{p})$は１体の運動量分布関数である。式(5.24, 25)は、一般的な式であり、定常な（強度非平衡でも良い）希薄プラズマ中でのリアプノフ指数の値を与える。

式(5.24, 25)を使って、熱平衡下でのc_{121}とc_{122}の項を計算する。熱平衡下のc_{121}は、運動量分布関数$f(\mathbf{p})$に、マックスウェル分布を仮定して、次の順番（$\mathbf{q}_i$->$\mathbf{q}_\ell$->$\mathbf{k}_\tau$->$\mathbf{p}_i$->$\mathbf{p}_\ell$->τ）で積分を実行すると、次のようになる。

$$\frac{c_{121}}{m} \sim \frac{8ne^4}{3m}\int_0^\infty dk k^2\int_0^\infty d\tau\frac{\tau}{m}\exp\left[-\frac{\tau}{\tau_0}\right]^2 = \frac{\omega_p^2 e^2}{3\pi T}\int_0^\infty dk. \tag{5.26}$$

$\tau_0 \equiv \left(k\sqrt{T/m}\right)^{-1}$は、波数に依存する相関時間であり、式(5.26)の積分で次の関係式を使った。

$$\iint d^3\mathbf{q}_i d^3\mathbf{q}_\ell e^{i(k_0+k_\tau)\cdot(q_i-q_\ell)} = (2\pi)^3\frac{N}{n}\delta^3\left(\mathbf{k}_0+\mathbf{k}_\tau\right), \tag{5.27}$$

$$\iint d^3\mathbf{p}_i d^3\mathbf{p}_\ell \frac{1}{(2\pi T)^3}\exp\left(-\frac{p_i^2+p_\ell^2}{mT}\right)e^{-ik_\tau\cdot(p_i-p_\ell)\tau/m} = \exp\left(-\frac{Tk^2\tau^2}{m}\right). \tag{5.28}$$

次に、c_{122}に関しては、熱平衡下では揺動散逸定理[15, 24]が成り立つので、動的構造因子$S(\mathbf{k},\omega)$は、運動量のマックスウェル分布$f_M(p)$を使って次のように書くことができる。

$$S(\mathbf{k},\omega)=\frac{T}{\pi\omega}\frac{k^2}{4\pi e^2}\frac{\mathrm{Im}\left[1+(k\lambda_D)^{-2}W(Z)\right]}{\left|1+(k\lambda_D)^{-2}W(Z)\right|^2},$$

$$W(Z)\equiv\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dp\frac{kp}{\frac{kp}{m}-\omega-i\eta}f_M(p)\ ;\eta\to+0$$

$$=1-Z\exp\left(-\frac{Z^2}{2}\right)\int_0^Z dx\exp\left(\frac{x^2}{2}\right)+i\sqrt{\frac{\pi}{2}}Z\exp\left(-\frac{Z^2}{2}\right). \tag{5.29}$$

ここで、W関数は、プラズマ分散関数[15]と呼ばれており、その引数は、$Z\equiv\frac{1}{k\lambda_D}\frac{\omega}{\omega_p}$である。したがって、$c_{122}$は、次のように書くことができる。

$$\frac{c_{122}}{m}=\frac{4\omega_p^2}{3^2\pi^2}\left(\frac{\lambda_D}{a}\right)^2\int_0^\infty(ka)^4d(ka)\int_0^\infty\frac{\mathrm{Re}\left[(k\lambda_D)^{-2}W(Z)\right]\mathrm{Im}\left[1+(k\lambda_D)^{-2}W(Z)\right]}{Z\left|1+(k\lambda_D)^{-2}W(Z)\right|^2}dZ. \tag{5.30}$$

このW関数に関する積分において、その引数Zが大きいところと小さいところの近似式[15]を使うと、主要項は小さいZからくる項であることがわかる。この結果を使うと、c_{122}は次のようになる。詳細は、Appendix 5-C参照。

$$\frac{c_{122}}{m}\sim4\left(\frac{\omega_p}{3\pi}\right)^2\left(\frac{\lambda_D}{a}\right)^2\int_0^\infty(ka)^4d(ka)\int_0^\infty\sqrt{\frac{\pi}{2}}\left\{1+(k\lambda_D)^2\right\}^{-2}e^{-\frac{Z^2}{2}}dZ\sim\frac{2\omega_p{}^2e^2}{3\pi T}\int_0^\infty dk. \tag{5.31}$$

式(5.26, 31)において、非物理的な積分の発散を防ぐために、波数に関する最後の積分の上限をある有限の値k_{max}にすべきである。この発散は、近接粒子間の粒子相関を無視したために起こったものである。一般的に、希薄なプラズマでは、ほとんどの粒子の粒子間ポテンシャルは粒子の運動エネルギーに比べて小さいので無視できる。しかし、極めて接近した粒子間のポテンシャルは大きく、その粒子相関は無視できない。ここで、粒子相関を第一近似で取り入れて波数に関する積分の上限値をk_{max}とすると積分の発散は除去できる。この積分の上限値は、2粒子の最接近距離であるランダウ長 $e2/T=a\Gamma$ に対応する波数$2\pi/a\Gamma$にすべきである[15]。この上限値$k_{max}=2\pi/a\Gamma$を式(5.26, 31)に代入すると、

$$\frac{c_{121}}{m}\sim\frac{2}{3}\omega_p{}^2,\quad\frac{c_{122}}{m}\sim\frac{4}{3}\omega_p{}^2. \tag{5.32}$$

となる。最初の評価で無視した行列の成分c_{11}をc_{12}と同様にして計算すると、

$$\frac{c_{11}}{m}\propto\Gamma^{\frac{3}{2}}\ln\left(\Gamma^{-1}\right). \tag{5.33}$$

となり、クーロン結合定数の小さい領域、すなわち、希薄なプラズマでは、c_{11}は十分小さく、無視できることが確認される。したがって、希薄なプラズマのリアプノフ指数は、$\lambda=\sqrt{2}\omega_p$と評価できる。この結果は、希薄なプラズマ($\Gamma<0.1$)のシミュレーション結果と良い一致を示し、リアプノフ指数がプラズマ振動数と同じオーダーであることを示している。

最後に、希薄プラズマのリアプノフ指数と誘電応答関数の一般的な関係を導出する。定常な運動量分布関数f(p)を与えれば、誘電応答関数$\varepsilon(k,\omega)$は次のように定義できできる。

$$\varepsilon(k,\omega)\equiv1+\frac{1}{2\pi(k\lambda_D)^2}\int_{-\infty}^{\infty}dp\frac{kp}{\frac{kp}{m}-\omega-i\eta}f(p)\ ;\eta\to+0. \tag{5.34}$$

さらに、揺動散逸定理が成り立つ程度の非平衡系であれば、動的構造因子$S(\mathbf{k},\omega)$は、誘電応答関数$\varepsilon(k,\omega)$と次のような関係がある。

$$S(\mathbf{k},\omega)=\frac{T}{\pi\omega}\frac{k^2}{4\pi e^2}\frac{\mathrm{Im}[\varepsilon(k,\omega)]}{|\varepsilon(k,\omega)|^2}. \tag{5.35}$$

これらの関係を用いると、c_{121}とc_{122}の項は、誘電応答関数$\varepsilon(k,\omega)$を使って、それぞれ、次のように書くことができる。

$$\frac{c_{121}}{m}=\left(\frac{\omega_p}{3\pi}\right)^2\int_0^{k_{max}}(ka)^2d(ka)\int_0^\infty\frac{d\tau}{\tau}\left\{\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{\omega_p}\mathrm{Re}[\varepsilon(k,\omega)-1]e^{i\omega\tau}\right\}^2. \tag{5.36}$$

$$\frac{c_{122}}{m}=2\left(\frac{\omega_p}{3\pi}\right)^2\left(\frac{\lambda_D}{a}\right)^2\int_0^{k_{max}}(ka)^4d(ka)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{\omega}\frac{\mathrm{Im}[\varepsilon(k,\omega)]\mathrm{Re}[\varepsilon(k,\omega)-1]}{|\varepsilon(k,\omega)|^2}. \tag{5.37}$$

この式(5.36, 37)から、誘電応答関数ε(k,ω)の関数としてのリアプノフ指数の一般式が得られる。この一般式は、揺動散逸定理が成り立つ範囲で、非平衡状態の系にも適用できるものである。

結論として, 第一原理的アプローチにより1成分希薄プラズマにおけるリアプノフ指数を解析的に評価し、リアプノフ指数がプラズマ振動数と同じオーダーであることを明らかにした。この結果は、希薄なプラズマ(Γ<0.1)のシミュレーション結果と良い一致を示している。また、式(5.36, 37)でリアプノフ指数の一般式を見出し、さらに、揺動散逸定理が成り立つことを仮定して、誘電応答関数ε(k,ω)の関数としてのリアプノフ指数の一般式得た。この式は、系のミクロな力学量とマクロな統計力学量を結びつける重要な関係であり、それは、非平衡状態の系にも適用できるものである。

§5-6 まとめ

本章では、粒子シミュレーションの結果を使って、リアプノフ指数と熱力学量との関係について議論した。以下に、各節ごとの内容と結論についてまとめる。

第2節では、粒子シミュレーションにより荷電粒子多体系のリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性が次のようになることを見出した。理想プラズマに近い、非常に粒子相関の弱い状態（Γ<0.1）では、リアプノフ指数は、クーロン結合定数によらず、プラズマ周波数と同じオーダーでほぼ一定値である。次に、粒子相関が無視できなくプラズマが液体的に振る舞う状態（1<Γ<150）では、リアプノフ指数は、$\Gamma^{2/5}$に比例している。最後に、より強結合な固体状態（Γ>170）では、$\Gamma^{6/5}$に比例している。また、Γ～170付近のリアプノフ指数の大きな跳びは、液体状態から固体状態の相転移に対応している。

第3節では、強結合液体プラズマのリアプノフ指数を剛体球粒子モデルによって説明した。また、強結合固体プラズマのリアプノフ指数は、非線形格子のリアプノフ指数と非常に良く似た振る舞いをすることを指摘した。また、剛体球粒子モデルでは、1成分希薄プラズマにおけるリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性を説明できないことを示した。

第4節では、希薄プラズマと強結合液体プラズマにおいて、拡散係数とリアプノフ指数の関係について考察し、以下の結果を得た。希薄プラズマでは、

$$\frac{\lambda}{v_{th}/a} \propto \left(\frac{D}{v_{th}^2/\omega_p}\right)^{-3} \propto \left(\frac{D}{a^2/\omega_p}\right)^{-5}$$

強結合液体プラズマでは、

$$\frac{\lambda}{\omega_p} \propto \left(\frac{D}{a^2/\omega_p}\right)^{\frac{1}{3}}$$

である。この結果より、拡散係数とリアプノフ指数は密接に関係していることが示された。

第5節では、1成分希薄プラズマにおけるリアプノフ指数を線形化されたハミルトン方程式から第一原理的に求め、誘電応答関数の関数としてのリアプノフ指数の公式を導出した。この公式は、熱平衡下で粒子シミュレーションの結果と良い一致を示すことを示した。

Appendix 5-A.　希薄プラズマにおける衝突周波数と拡散係数[15, 25]

距離に逆比例するポテンシャルを持つ２体の粒子散乱は、ラザフォード散乱と呼ばれ、プラズマや天体などの適用範囲の広い重要な素過程である。まず、一般的な方法に従って、２体の粒子散乱と等価な固定点O（２粒子系の重心に対応する。）を中心とするポテンシャル場$\Phi(q)$によるインパクトパラメーターb、換算質量m_{eff}の粒子の散乱を考える。

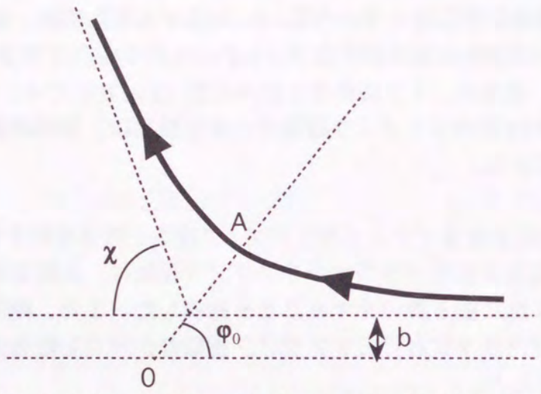


Fig.5-A-1　２体の粒子散乱と等価な固定点O（２粒子系の重心に対応する。）を中心とするポテンシャル場$\Phi(q)$によるインパクトパラメーターb、換算質量m_{eff}の粒子の散乱。χは、重心系での散乱角を与える。

この系のエネルギー(E)保存と角運動量(M)保存の法則は、次のように書くことができる。

$$E = \frac{m_{eff}\dot{q}^2}{2} + \frac{M^2}{2m_{eff}q^2} + \Phi(q), \tag{5A.1}$$

$$M = m_{eff}q^2\dot{\varphi}. \tag{5A.2}$$

この保存法則だけから運動の軌跡を次のようにして求めることができる。

$$t = \int_q^\infty \frac{dq}{\sqrt{\frac{2}{m_{eff}}\left[E-\Phi(q)\right]-\frac{M^2}{m_{eff}{}^2q^2}}}, \tag{5A.3}$$

$$\varphi = \int_q^\infty \frac{\frac{M}{q^2}dq}{\sqrt{2m_{eff}\left[E-\Phi(q)\right]-\frac{M^2}{q^2}}}. \tag{5A.4}$$

この式から見ても分かるとおり、運動の時間可逆性より中心力場における粒子の軌跡は、散乱中心Oとそれに対する最接近位置Aとを結ぶ直線に関して対称であり、角度φ_0は、次のように書くことができる。

$$\varphi_0 = \int_{q_{min}}^\infty \frac{\frac{M}{q^2}dq}{\sqrt{2m_{eff}\left[E-\Phi(q)\right]-\frac{M^2}{q^2}}}. \tag{5A.5}$$

このとき、散乱角χは、角度φと$\chi = \pi - 2\varphi$の関係がある。無限遠での粒子の運動エネルギーと角運動量から$E = m_{eff}v_\infty{}^2/2$ ，$M = m_{eff}bv_\infty$が決められる。これを上式に代入すると、

$$\varphi_0 = \int_{q_{min}}^\infty \frac{\frac{b}{q^2}dq}{\sqrt{1-\frac{b^2}{q^2}-\frac{2\Phi(q)}{m_{eff}v_\infty{}^2}}}. \tag{5A.6}$$

となる。また、距離に逆比例するポテンシャル$\Phi(q) = \alpha/q$を仮定すると、

$$\varphi_0 = \mathrm{Cos}^{-1}\frac{\frac{\alpha}{m_{eff}v_\infty{}^2b}}{\sqrt{1+\left(\frac{\alpha}{m_{eff}v_\infty b}\right)}} \rightarrow b^2 = \frac{\alpha^2}{m_{eff}{}^2v_\infty{}^4}\cot^2\frac{\chi}{2}. \tag{5A.7}$$

希薄なプラズマでは、微分散乱断面積dσは、上の関係を使い次のように書ける。

$$d\sigma = 2\pi b(\chi)\left|\frac{db(\chi)}{d\chi}\right|d\chi = \pi\left(\frac{\alpha}{m_{eff}v_\infty{}^2}\right)^2\frac{\cos\frac{\chi}{2}}{\sin^3\frac{\chi}{2}}d\chi. \qquad (5A.8)$$

この微分散乱断面積は、重心系から見たものであるので、実用的には、実験室系に戻す必要がある。この変換は、一般に面倒な式になるので、式が簡単になる特別な２つの場合についてだけ考える。散乱する（対象）粒子の質量m_2が散乱を受ける（入射）粒子の質量m_1に比べて十分大きいときには、$\chi \approx \chi_1$, $m_{eff} \approx m_1$となり、したがって、

$$d\sigma_{1,2} = 4\pi\left(\frac{\alpha}{4E_1}\right)^2\frac{\cos\frac{\chi_1}{2}}{\sin^3\frac{\chi_1}{2}}d\chi_1. \qquad (5A.9)$$

二つの粒子の質量が等しいときには、$\chi \approx 2\chi_1$, $m_{eff} \approx m_1/2$となり、したがって、

$$d\sigma_{1,2} = 2\pi\left(\frac{\alpha}{E_1}\right)^2\frac{\cos\chi_1}{\sin^3\chi_1}d\chi_1. \qquad (5A.10)$$

となる。希薄なプラズマでは、全運動量輸送断面積$\sigma^m{}_{1,2}$は、散乱角が小さいところの積分で発散するので、下限χ_{min}を設けて、

$$\sigma^m{}_{1,2} = \int_{\chi_{min}}^{\pi}(1-\cos\chi_1)\frac{d\sigma_{1,2}}{d\chi_1}d\chi_1. \qquad (5A.11)$$

と書くことができる。散乱角の下限χ_{min}は、インパクトパラメーターbがデバイ半径λ_Dの時の散乱角、すなわち、$1/\chi_{min} \sim \lambda_D m_1 v_\infty{}^2/\alpha$とすると良い。なぜなら、インパクトパラメーターが$\lambda_D$以上では、粒子のポテンシャルはプラズマに遮蔽されて、急速に減衰するからである。また、プラズマの散乱角の小さいところでは、上のどちらの場合でも積分核は、次のように書くことができる。

$$(1-\cos\chi_1)\frac{d\sigma_{1,2}}{d\chi_1} = \pi\left(\frac{\alpha}{E_1}\right)^2\frac{1}{\chi_1}. \qquad (5A.12)$$

そして、Fig.5-A-2を見て分かるように、全断面積への寄与は、この散乱角の小さいところが大きいので、散乱の単純な平均であれば、この簡易積分核を使っても問題はない。特に、二つの粒子の質量が等しいときには、0.5π以上の大きな散乱断面積はゼロになるので、散乱角の上限を１とする。実際にこの簡易積分核と散乱角の下限χ_{min}を使って全運動量輸送断面積$\sigma^m{}_{1,2}$を求めると、

$$\sigma^m{}_{1,2} = \int_{\frac{\alpha}{\lambda_D m_1 v^2}}^{1}\pi\left(\frac{\alpha}{E_1}\right)^2\frac{1}{\chi_1}d\chi_1 = \pi\left(\frac{\alpha}{E_1}\right)^2\ln\left(\frac{\lambda_D m_1 v_\infty{}^2}{\alpha}\right). \qquad (5A.13)$$

となる。しかし、このような近似ができる散乱角は0.1π程度までであり、それより散乱角の大きいところでは、簡易積分核は過剰評価になる。

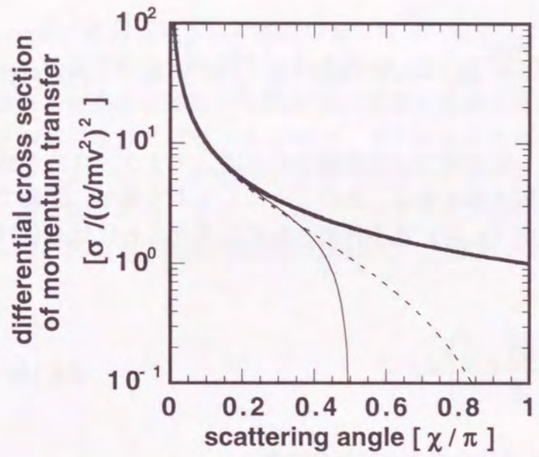


Fig.5-A-2　運動量輸送微分散乱断面積の角度依存性。太い実線、破線、実線は、それぞれ、式(5A.9)、式(5A.10)、式(5A.12)の微分散乱断面積を示している。

熱平衡状態にある希薄なプラズマでは、粒子１が粒子２に散乱される平均衝突周波数は、次のようにして求められる。

$$\langle \nu_{1,2} \rangle \equiv \frac{n_2 \langle \sigma^m_{1,2} v_r v_r \rangle}{\langle v_r \rangle} = \frac{n_2 \int_{v_1} \int_{v_2} d^3\mathbf{v}_1 d^3\mathbf{v}_2 f_M(\mathbf{v}_1) f_M(\mathbf{v}_2) \sigma^m_{1,2} v_r^2}{\int_{v_1} \int_{v_2} d^3\mathbf{v}_1 d^3\mathbf{v}_2 f_M(\mathbf{v}_1) f_M(\mathbf{v}_2) v_r}$$

$$= \frac{n_2 \int_0^\infty v_r^4 \sigma^m_{1,2}(v_r) e^{-\frac{m_{eff} v_r^2}{2T}} dv_r}{\int_0^\infty v_r^3 e^{-\frac{m_{eff} v_r^2}{2T}} dv_r} = \frac{n_2}{2 v_{1th}^4} \left(\frac{m_1}{m_{eff}} \right)^2 \int_0^\infty v_r^4 \sigma^m_{1,2}(v_r) e^{-\frac{m_{eff} v_r^2}{2T}} dv_r. \quad (5A.14)$$

ここで、v_rは衝突する２粒子の相対速度、n_2は対象粒子（ターゲット）の数密度、f_Mは、マックスウェル分布、v_{1th}は粒子１の熱速度を表す。荷電数１の１成分プラズマ（同種粒子）の散乱すなわち、$n_1 = n_2$, $m_{eff} = m_1/2$を考えて、式(5A.10)で求めた全運動量輸送断面積$\sigma^m_{1,2}$を代入して積分すると、

$$\langle \nu \rangle = \frac{\pi n_1}{2 v_{th}^4} \left(\frac{\alpha}{m_1} \right)^2 \int_0^\infty \ln\left(\frac{\lambda_D m_1 v_r^2}{\alpha} \right) e^{-\frac{m_1 v_r^2}{4T}} dv_r \sim 4\sqrt{\pi} \times \sqrt{3} \Gamma^{\frac{3}{2}} \ln\left(\frac{\sqrt{3}}{3} \Gamma^{-\frac{3}{2}} \right) \omega_p. \quad (5A.15)$$

を得る。クーロン結合定数に関する依存性だけの議論であれば、マックスウェル分布に関する積分は必要なく、平均衝突周波数は、次のようにしてより簡単に評価できる。しかし、絶対値は、１桁程度（$4\sqrt{\pi}$）過小評価されてしまうことに気を付けておく必要がある。

$$\langle \nu \rangle \sim n_1 \sigma^m_{1,2} v_r \Big|_{v_r = v_{th}} \sim \sqrt{3} \Gamma^{\frac{3}{2}} \ln\left(\frac{\sqrt{3}}{3} \Gamma^{-\frac{3}{2}} \right) \omega_p. \quad (5A.16)$$

また、粒子１の拡散係数は、一般的に次のように評価できる。

$$D_1 = \left\langle \frac{v_1^2}{3 \sum_i n_i \sigma^m_{1,i} v_{1,ir}} \right\rangle. \quad (5A.17)$$

荷電数１の１成分プラズマ（同種粒子）の散乱すなわち、$n_1 = n_2$, $m_{eff} = m_1/2$を考えて、式(5A.10)で求めた全運動量輸送断面積$\sigma^m_{1,2}$を代入してマックスウェル分布で積分平均すると、

$$D_1 = \left\langle \frac{v_1^2}{3 n_1 \sigma^m_{1,2} v_r} \right\rangle \sim 2.8 \frac{\Gamma^{-\frac{3}{2}}}{\ln\left(\frac{\sqrt{3}}{3} \Gamma^{-\frac{3}{2}} \right)} \frac{v_{th}^2}{\omega_p}. \quad (5A.18)$$

ただし、クーロン結合定数に関する依存性だけの議論であれば、上で求めた平均衝突周波数を用いると簡単に評価できる。しかし、拡散係数の絶対値は、２桁程度過小評価されてしまうことに気を付けておく必要がある。

$$D_1 \sim \frac{v_{v_{th}}^2}{3\langle \nu \rangle} \sim 2.7 \times 10^{-2} \frac{\Gamma^{-\frac{3}{2}}}{\ln\left(\frac{\sqrt{3}}{3} \Gamma^{-\frac{3}{2}} \right)} \frac{v_{v_{th}}^2}{\omega_p}. \quad (5A.19)$$

通常、希薄な気体は、速度の分布関数の積分などせずに系の代表速度で拡散係数や平均衝突周波数を評価しても定量的に良い結果を得る。しかし、希薄なプラズマでは、正確な拡散係数や平均衝突周波数を求めるときに速度の分布関数によって積分平均をしなければならないのは、ポテンシャルが遠距離まで到達する柔らかいポテンシャルなので、断面積が速度（速度の４乗の逆数に比例）に強く依存していることが原因である。また、これが、リアプノフ指数の振る舞いが中性の希薄な気体のものと異なる（衝突周波数に比例しない）原因でもある。

Appendix 5-B. ストカスティックな微分方程式に対するVan Kampenの摂動展開方法[16]

次のような線形微分方程式を考える。

$$\dot{\boldsymbol{\delta}} = \mathbf{T}(t)\boldsymbol{\delta} = \{\mathbf{T}_0 + \mathbf{T}_1(t)\}\boldsymbol{\delta}. \tag{5B.1}$$

ここで、$\boldsymbol{\delta}$はベクトル、$\mathbf{T}_0$は時間に依存しない定数行列、$\mathbf{T}_1(t)$は長時間平均が0のストカスティックな行列である。すなわち、$\mathbf{T}(t)$の時間平均値を$\mathbf{T}_0$にするということである。これから述べるVan Kampenの方法は、基本的には$\mathbf{T}_1(t)$に対してべき乗展開する近似方法である。ちなみに、本文の$\mathbf{T}_0$と$\mathbf{T}_1(t)$は、

$$\mathbf{T}_0 = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{m}^{-1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}_1(t) = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{V}_{qq}(t) \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \tag{5B.2}$$

となる。上のように分離できる理由は以下の通りである。長時間平均の空間の対称性から行列$\mathbf{V}_{qq}(t)$の平均の各々の３×３小行列は、

$$\left\langle \mathbf{V}_{q_i q_j}(t) \right\rangle = \frac{\mathrm{Tr}\left[\mathbf{V}_{q_i q_j}(t)\right]}{3}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{\mathrm{Tr}\left[\sigma_{ij}\sum_{l\neq i}^{N}\psi_{il}(t) - (\mathbf{1}-\sigma_{ij})\psi_{ij}(t)\right]}{3}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{5B.3}$$

となる。なぜなら、クーロン系では恒等的に

$$\mathrm{Tr}\left[\psi_{i\ell}(t)\right] \equiv \mathrm{Tr}\left[\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{q}_i \partial \mathbf{q}_i}\frac{e^2}{|\mathbf{q}_i(t) - \mathbf{q}_\ell(t)|}\right] = 0. \tag{5B.4}$$

が成り立つからである。Van Kampenの方法で式(5B.1)を近似するために、$\mathbf{T}_1(t)$が有限の相関時間τ_cをもつことを仮定する、すなわち、$|t_2 - t_1| > \tau_c$を満たす２つの時刻t_1とt_2において、$\mathbf{T}_1(t_1)$が統計的に$\mathbf{T}_1(t_2)$と無相関であることを仮定する。

まず最初に次のような変数変換（相互作用表示）をして、式(5B.1)を書き換える。

$$\boldsymbol{\varphi}(t) \equiv e^{-t\mathbf{T}_0}\boldsymbol{\delta},$$
$$\dot{\boldsymbol{\varphi}}(t) = e^{-t\mathbf{T}_0}\mathbf{T}_1(t)e^{t\mathbf{T}_0}\boldsymbol{\varphi}(t) \equiv \boldsymbol{\Pi}(t)\boldsymbol{\varphi}(t). \tag{5B.5}$$

この方程式の解を$\boldsymbol{\Pi}(t)$の２次のオーダーまで展開して求めると

$$\boldsymbol{\varphi}(t) = \boldsymbol{\varphi}(0) + \int_0^t d\tau_1 \boldsymbol{\Pi}(\tau_1)\boldsymbol{\varphi}(0) + \int_0^t d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \boldsymbol{\Pi}(\tau_1)\boldsymbol{\Pi}(\tau_2)\boldsymbol{\varphi}(0) + \ldots. \tag{5B.6}$$

となる。ここで、$\boldsymbol{\varphi}(0)$を固定したまま平均をとる、すなわち、0次の軌道に対してアンサンブル平均をとると、上の式は次のように変形される。

$$\langle \boldsymbol{\varphi}(t) \rangle = \boldsymbol{\varphi}(0) + \int_0^t d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \langle \boldsymbol{\Pi}(\tau_1)\boldsymbol{\Pi}(\tau_2) \rangle \boldsymbol{\varphi}(0). \tag{5B.7}$$

$\tau_2 = \tau_1 - \tau$とおくと、上の式は次のようになる。

$$\langle \boldsymbol{\varphi}(t) \rangle = \boldsymbol{\varphi}(0) + \int_0^t d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau \langle \boldsymbol{\Pi}(\tau_1)\boldsymbol{\Pi}(\tau_1 - \tau) \rangle \boldsymbol{\varphi}(0). \tag{5B.8}$$

ここで、この式を両辺、時間に対して微分する。

$$\langle \dot{\boldsymbol{\varphi}}(t) \rangle = \int_0^t d\tau \langle \boldsymbol{\Pi}(t)\boldsymbol{\Pi}(t-\tau) \rangle \boldsymbol{\varphi}(0) = \int_0^t d\tau \langle \boldsymbol{\Pi}(t)\boldsymbol{\Pi}(t-\tau) \rangle \langle \boldsymbol{\varphi}(t) \rangle. \tag{5B.9}$$

最後の等式は、$\boldsymbol{\Pi}(t)$の２次のオーダーの精度で$\boldsymbol{\varphi}(0) \approx \langle \boldsymbol{\varphi}(t) \rangle$が成り立つことを利用した。この式を最初の$\boldsymbol{\delta}$に関する式に戻すと最終的に$\boldsymbol{\delta}$に関する定係数常微分方程式が得られる。

$$\langle \dot{\boldsymbol{\delta}}(t) \rangle = \left[\mathbf{T}_0 + \int_0^t d\tau \left\langle \mathbf{T}_1(t)e^{\tau\mathbf{T}_0}\mathbf{T}_1(t-\tau)e^{-\tau\mathbf{T}_0} \right\rangle\right] \langle \boldsymbol{\delta}(t) \rangle. \tag{5B.10}$$

最後に、$\mathbf{T}_1(t)e^{\tau\mathbf{T}_0}\mathbf{T}_1(t-\tau)e^{-\tau\mathbf{T}_0}$の計算を実行すると、

$$\mathbf{T}_1(t)e^{\tau\mathbf{T}_0}\mathbf{T}_1(t-\tau)e^{-\tau\mathbf{T}_0} = \begin{pmatrix} -\left(\frac{\tau}{m}\right)^2 \sum_{\ell=1}^{N} \mathbf{V}_{qq}(0)\mathbf{V}_{qq}(-\tau) & \frac{\tau}{m}\sum_{\ell=1}^{N}\mathbf{V}_{qq}(0)\mathbf{V}_{qq}(-\tau) \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \tag{5B.11}$$

となり、本文の式

$$\langle \dot{\boldsymbol{\delta}}_i \rangle = \sum_j \left\langle \bar{\mathbf{T}}_{ij} \right\rangle \langle \boldsymbol{\delta}_j \rangle. \tag{5B.12}$$

が得られる。ここで、

$$\left\langle \bar{\mathbf{T}}_{ij} \right\rangle = \begin{pmatrix} -\int_0^\infty d\tau \left(\frac{\tau}{m}\right)^2 \left\langle \sum_{\ell=1}^{N} \mathbf{V}_{q_i q_\ell}(0) \mathbf{V}_{q_\ell q_j}(-\tau) \right\rangle & \int_0^\infty d\tau \frac{\tau}{m} \left\langle \sum_{\ell=1}^{N} \mathbf{V}_{q_i q_\ell}(0) \mathbf{V}_{q_\ell q_j}(-\tau) \right\rangle \\ \mathbf{m^{-1}} & \mathbf{0} \end{pmatrix}.$$

Appendix 5-C.　式(5.30)のc_{122}の積分について

第５節の式(5.30)は、プラズマ分散関数[15]を含んだ関数の波数とZ空間積分となっている。

$$\frac{c_{122}}{m} = \frac{4\omega_p{}^2}{3^2\pi^2}\left(\frac{\lambda_D}{a}\right)^2 \int_0^\infty (ka)^4 d(ka) \int_0^\infty \frac{\mathrm{Re}\left[(k\lambda_D)^{-2} W(Z)\right] \mathrm{Im}\left[1+(k\lambda_D)^{-2} W(Z)\right]}{Z\left|1+(k\lambda_D)^{-2} W(Z)\right|^2} dZ. \tag{5C.1}$$

熱平衡状態の誘電応答関数はプラズマ分散関数と次のような関係がある。

$$\varepsilon_{th}(k,\omega) = 1+(k\lambda_D)^{-2} W(Z). \tag{5C.2}$$

式を簡単に表記するために

$$g(k,Z) \equiv \frac{\mathrm{Re}\left[\varepsilon_{th}(k,\omega)-1\right] \mathrm{Im}\left[\varepsilon_{th}(k,\omega)\right]}{Z\left|\varepsilon_{th}(k,\omega)\right|^2}. \tag{5C.3}$$

とおくと、式 (5C.1)は、次のように書ける。

$$\frac{c_{122}}{m} = \frac{4\omega_p{}^2}{3^2\pi^2}\left(\frac{\lambda_D}{a}\right)^2 \int_0^\infty (ka)^4 d(ka) \int_0^\infty g(k,Z) dZ. \tag{5C.4}$$

W関数は、Zの絶対値が１より大きいところと小さいところでそれぞれ次のように展開できる。

$$\begin{aligned} |Z|<1 &\rightarrow W(Z) = i\sqrt{\frac{\pi}{2}} Z e^{-\frac{Z^2}{2}} + 1 - Z^2 + \frac{Z^4}{3} - \cdots + \frac{(-1)^{n+1} Z^{2n+2}}{(2n+1)!!} \cdots, \\ |Z|>1 &\rightarrow W(Z) = i\sqrt{\frac{\pi}{2}} Z e^{-\frac{Z^2}{2}} + 1 - \frac{1}{Z^2} - \frac{3}{Z^4} - \cdots - \frac{(2n-1)!!}{Z^{2n}} \cdots. \end{aligned} \tag{5C.5}$$

この性質を利用して、g(k,Z)をZの領域別に展開する。

$$|Z|>1 : \frac{-\sqrt{\frac{\pi}{2}}(k\lambda_D)^{-4} e^{-\frac{Z^2}{2}}}{Z^2}. \tag{5C.6}$$

$$|Z|<1 : \frac{\sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-\frac{Z^2}{2}}}{\left\{1+(k\lambda_D)^2\right\}^2} . \tag{5C.7}$$

ただし、$|Z|>1$の領域において、これらの展開が破綻する小さい領域が1つある。その領域は$\mathrm{Re}[\varepsilon(k,\omega)]=0$の近傍である。この領域は、必ず$k \ll \lambda_D^{-1}$を満たしていて、その近傍では、$g(k,Z)$は、次のように評価される。

$$Z=Z_p \text{ at } \mathrm{Re}[\varepsilon(k,\omega)]=0 : \frac{-\sqrt{\frac{2}{\pi}}(k\lambda_D)^2}{Z_p{}^2 e^{-\frac{Z_p{}^2}{2}}} = -\frac{1}{Z_p \,\mathrm{Im}[\varepsilon(k,\omega)]_{Z_p}} . \tag{5C.8}$$

また、展開が破綻するこの小さい領域の幅は、$\mathrm{Re}[\varepsilon(k,\omega)] \le \mathrm{Im}[\varepsilon(k,\omega)]$の領域の幅で決まるので、$Z_p \,\mathrm{Im}[\varepsilon(k,\omega)]$の幅を持つことになる。

これらの結果を使って、$g(k,Z)$ のZに対する積分を実行すると次のようになる。

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty g(k,Z)dZ = \int_0^1 g(k,Z)dZ + \int_1^{Z_{p-}} g(k,Z)dZ + \int_{Z_{p+}}^\infty g(k,Z)dZ + g\left(k,Z_p\right)\Delta Z_p \\
&\quad \sim \frac{1}{\left\{1+(k\lambda_D)^2\right\}^2}\int_0^1 \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-\frac{Z^2}{2}} dZ - 1 \sim \text{constant} \quad \left(k \ll \lambda_D^{-1}\right) \\
&\quad \sim \frac{1}{\left\{1+(k\lambda_D)^2\right\}^2}\int_0^1 \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-\frac{Z^2}{2}} dZ \sim \left(k\lambda_D\right)^{-4} \qquad \left(k > \lambda_D^{-1}\right).
\end{aligned} \tag{5C.9}$$

上の結果を考慮すると、積分$\int_0^\infty dk \int_0^\infty g(k,Z)dZ$ はk空間の積分は二つの領域（$k<\lambda_D^{-1}$ or $k>\lambda_D^{-1}$）に分けて考えられるべきである。この二つの領域の積分は次のように評価できる。

$$\begin{aligned}
&\int_{\lambda_D^{-1}}^\infty dk \int_0^\infty g(k,Z)dZ \propto \lambda_D^{-4} \int_{\lambda_D^{-1}}^\infty dk \sim \lambda_D^{-4} \int_{k_D}^{k_{max}} dk = \lambda_D^{-4}\left(k_{max} - \lambda_D^{-1}\right), \\
&\int_0^{\lambda_D^{-1}} dk \int_0^\infty g(k,Z)dZ \propto \int_0^{\lambda_D^{-1}} k^4 dk \propto \lambda_D^{-5}.
\end{aligned} \tag{5C.10}$$

最初の積分項が、薄いプラズマでの主要項となる。本文で書いたように、$k_{max} = 2\pi/a\Gamma$を代入すると、クーロン結合定数の小さいところでは、積分は次のように評価される。

$$\Gamma \ll 1 \quad \text{---} > \int_0^\infty dk \int_0^\infty g(k,Z)dZ \sim \int_0^{k_{max}} dk \int_0^\infty g(k,Z)dZ \propto \lambda_D^{-4} k_{max} . \tag{5C.11}$$

これらの結果を元の式に代入すると、最終的な値

$$\frac{c_{122}}{m} \sim \frac{4\omega_p{}^2}{3^2\pi^2}\left(\frac{\lambda_D}{a}\right)^2 \int_0^\infty (ka)^4 d(ka) \int_0^\infty \sqrt{\frac{\pi}{2}}\left\{1+(k\lambda_D)^2\right\}^{-2} e^{-\frac{Z^2}{2}} dZ \sim \frac{2\omega_p{}^2 e^2}{3\pi T}\int_0^{k_{max}} dk \sim \frac{4}{3}\omega_p{}^2 . \tag{5C.12}$$

を得る。

参考文献

1. N.S.Krylov, *Works on the Fundations of StatisticalPhysics,* (Prinsceton University, Princeton, New Jersey 1979).
2. H.A.Posch and W.G.Hoover, Phys.Rev.A. 38 , 473 (1988).
3. D.J.Evans et al. Phys.Rev.A. 42 , 5990 (1990).
4. M.Pettini and M.Landolfi, Phys.Rev.A 41 ,768 (1990).
5. P.Gaspard and G.Nicolis, Phys.Rev.Lett. 65 , 1693 (1990).
6. C.Amitrano and R.S.Berry, Phys.Rev.Lett. 68 ,729 (1992).
7. W.E.Wiesel, Phys.Rev.E. 47 , 3686 (1993).
8. S. Chandhuri, G. Gangopadhyay and D. S. Ray. Phys.Rev.E. 47 , 311 (1993).
9. K. Seki et al. Physica. A. 209 , 369 (1994).
10. K. Nishihara et al., Instantaneous Phase-Space Lyapunov Expansion Rates in Strongly Coupled Plasmas, in the Oji International Seminar, Tomakomai, Japan, June 27-July 1, 1994.
11. D. M. Barnett, Lyapunov Exponents of Many Body Systems, (Doctor Thesis, The University of Texas at Austin 1995).
12. D. M. Barnett et al. Phys.Rev.Lett. 76 , 1812 (1996).
13. Y. Ueshima et al. submitted to Phys.Rev.E.
14. Y. Ueshima et al. submitted to Phys.Rev.Lett.
15. S. Ichimaru, *Basic Principles of Plasma Physics, A Statistical Approach,* (W. A. BENJAMIN, INC. Publishers, Massachu setts, 1973).
16. N.G.van.Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry,* (North-Holland Physics Publishing, Amsterdam 1983).
17. J. P. Hansen, Phys.Rev. A. 8 , 3096 (1973).
18. S.Ichimaru et al., *Statistical Physics of Dense Plasmas: thermodynamics, transport coefficients and dymanic correlations,* (North-Holland Physics Publishing, Amsterdam 1987).
19. S.Tanaka and Setuo Ichimaru, Phys.Rev A 34 , 4163 (1986).
20. 古河裕之 、「レーザー生成高温･高密度プラズマに関する理論的研究」、（大阪大学大学院工学研究科博士論文、1991）.
21. S. G. Brush, H. L. Sahlin and E.Teller. J.Chem.Phys. 45 , 2102 (1966).
22. J. P. Hansen, Phys.Rev. A. 8 , 3096 (1973).
23. W.L.Slattery et al. Phys.Rev.A. 26 , 2255 (1982).
24. L.D.Landau and E.M.Lifshitz, *Statistical Mechanics,*（Pergamon Press, 1992）.

25. L.D.Landau and E.M.Lifshitz, *Mechanics,*（Pergamon Press, 1992）.

第6章　結論

本論文は、荷電粒子多体系におけるリアプノフ指数と巨視現象に関する理論的研究成果をまとめたものである。著者は、その相互作用が長距離に及ぶため、本質的に多体問題である荷電粒子多体系を研究対象として選らび、高精度高速強結合プラズマ粒子シミュレーションコードを使用し、荷電粒子多体系の力学過程を観測した。シミュレーションを通して、粒子の力学過程が問題となる極めてミクロな剪断流非平衡系のダイナミクスと力学特性量であるリアプノフ指数と熱力学状態や熱力学特性量との関係について調べた。以下に、各章ごとに主要な結果を総括する。

第1章　緒論

リアプノフ指数と巨視現象との関係に関する研究の重要性について述べた。また、軌道不安定性と巨視現象の関係を明らかにすることにより、現在、十分に理解されているとは言えない強度非平衡系などの複雑な系の巨視現象の理解が深まる可能性があることを論じた。

第2章　3次元高密度プラズマ粒子シミュレーション

本論文における研究対象である荷電粒子多体系の一般的性質について記した。また、荷電粒子多体系の粒子シミュレーションで使用した高精度高速強結合プラズマ粒子コード"SCOPE"について説明し、動径分布関数などを観測することにより、そのコードがクーロン相互作用の長距離性と粒子間相関を正しく取り扱えていることを示した。

第3章　1成分高密度プラズマ中の微視的剪断流不安定性

ミクロな剪断流非平衡系プラズマの粒子シミュレーションを行い、粒子スケールの現象を明らかにした。流体力学的な不安定性が粒子レベルでも生じ、不安定性の線形成長、および、非線形性成長の速さは主流速度が有限遷移幅を持つ中性非圧縮性流体のものとほぼ同じであるが、プラズマ振動を伴いながら成長することを見出した。

非線形過程では逆カスケードにより、大規模な渦が自己組織化されることを明らかにした。また、渦は通常のプラズマとは異なり、電荷分離により熱エネルギーの数倍になる非常に大きな静電ポテンシャルを伴い、その静電場と流体の遠心力で保持

した準定常状態が存在することを発見した。また、この現象が粒子の軌道不安定性とつながりがあることも示唆した。

第4章　荷電粒子多体系におけるリアプノフ指数の粒子シミュレーション

エルゴード論的観点から軌道不安定性と統計力学の成立条件の関係について述べ、軌道不安定性の指標であるリアプノフ指数とその瞬時値である局所リアプノフ指数の定義を記した。

粒子シミュレーションにおいて、摂動の大きさを一定に保ってリアプノフ指数と局所リアプノフ指数を観測するリスケール法について説明した。粒子コードSCOPEを用いてリアプノフ指数を計測するために必要な摂動の大きさと粒子数について数値誤差の観点から検討を行い、2つの近接軌道の変位の下限と粒子数を決めた。リスケール法を使わない粒子シミュレーションにより近接軌道が指数関数的に発散することを観測し、また、その指数発散の限界点（摂動の非線形成長開始点）を決定した。さらに、長時間シミュレーションを行って完全にそれらの軌道が無相関になることを確認した。

リスケール法を使った粒子シミュレーションにより荷電粒子多体系の局所リアプノフ指数を観測し、任意の初期摂動から出発しても同一のリアプノフ指数に漸近すること、また、漸近するまでの遷移時間とリアプノフ指数の関係を明らかにした。その振る舞いから、位相空間の軌道不安定性が空間的にも時間的にも非一様であることを明らかにした。また、局所リアプノフ指数のスペクトルは、全てのクーロン結合定数において、広い帯域を持ち、3つの異なるスペクトルから成っている。周波数の低い順に、最初は、プラズマ周波数あたりの白色ノイズ領域、次にf^{-2}で減衰する領域、それより高周波領域でf^{-1}で減衰ことを示した。

第5章　リアプノフ指数と熱力学量との関係

粒子シミュレーションにより古典1成分プラズマのリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性が希薄プラズマ、強結合プラズマ（液相）、固体プラズマの各状態で異なることを見出した。理想プラズマに近い、希薄プラズマ（$\Gamma<0.1$）では、リアプノフ指数は、クーロン結合定数によらず、プラズマ周波数と同じオーダーでほぼ一定値である。次に、粒子相関が無視できなくプラズマが液体的に振る舞う状態（$1<\Gamma<150$）では、リアプノフ指数は、$\Gamma^{2/5}$に比例している。最後に、より強結合な固体状態（$\Gamma>170$）では、$\Gamma^{6/5}$に比例している。また、$\Gamma\sim170$付近のリアプノフ指数の大きな跳びは、液体状態から固体状態の相転移に対応している。さらに、1成分、2成分準量子論的プラズマのリアプノフ指数のクーロン結合定数依存性を計測して古典1成分プラズマの結果との違いについて考察した。

古典１成分プラズマの結果について、それぞれの領域のクーロン結合定数依存性を説明できる理論モデルを構築した。すなわち、固体プラズマでは、格子振動エネルギーがリアプノフ指数に関係していること、液体プラズマでは、平均粒子間距離の半分の半径を持つ剛体粒子の散乱によってリアプノフ指数が決定されていることを示した。また、希薄な１成分プラズマの領域では、第一原理に基づいてリアプノフ指数を解析的に求め、リアプノフ指数がマクロな誘電応答関数と関係していることを見出し、その関係を与えた。熱平衡下でその結果と粒子シミュレーションの結果が良い一致を示すことを確認した。

以上のように、荷電粒子多体系におけるリアプノフ指数と巨視現象に関する研究を行なった。特に、粒子の力学過程が問題となる極めてミクロな剪断流非平衡系のダイナミクスと力学特性量であるリアプノフ指数の熱力学状態（気体、液体、固体）に対する依存性、リアプノフ指数と拡散係数の関係などについて明らかにした。また、希薄プラズマに対してリアプノフ指数を第一原理から求める理論モデルを構築し、ミクロなリアプノフ指数とマクロな誘電応答関数とが関係していることを明らかにした。

本研究で熱力学平衡下、もしくは、弱い非平衡下での軌道不安定性と巨視現象の基礎的な関係が明らかになり、巨視現象を新たな視点で見ることができるようになった。また、この関係の拡張することにより、強い非平衡系などの従来の統計力学的手法が適用困難な系の巨視現象の理解に大きな進歩が期待される。

謝辞

本研究の遂行に際し、終始懇篤なる御指導、御鞭撻を賜りました西原功修教授に深厚なる謝意を表します。また、研究面だけでなく、人生の先輩として半人前の私を広い心で優しくそして力強く支えて下さったことに深く感謝致します。

本論文作成にあたり綿密かつ有益な御指導と御助言を頂きました、三間圀興教授（レーザー核融合研究センター長）、権田俊一教授に深厚なる謝意を表します。また、三間圀興教授には、研究外の活動でも始終御世話になったことに深く感謝致します。

本研究は、大阪大学レーザー核融合研究センターで行われたものであり、素晴らしい研究の場を提供して戴くと共に、研究に対する深い御理解と御支援を戴いた中井貞雄教授（前レーザー核融合研究センター長）に謝意を表します。あわせて、大学院在学中において、御指導、御教示を戴きました西川雅弘教授、岡田成文教授、飯田敏行教授、堀池寛教授、三宅正宣名誉教授、青木亮三教授、桂正弘教授、佐々木孝友教授、井澤靖和教授、中塚正大教授、山中龍彦教授、加藤義章教授に心より謝意を表します。

終始変わらぬ御指導、討論、助言、激励を戴きました高部英明助教授、姫路工業大学坂上仁志助教授、摂南大学田口俊弘助教授、村上匡且助手に深く感謝します。

また、終始変わらぬ助言、激励を戴きました山中正宣助教授、北川米喜助教授、田中和夫助教授、疇地宏助教授、乗松孝好助教授、西村博明助教授、宮永憲明助教授、藤田尚徳助教授、實野孝久助教授、阪部周二助教授、大道博行助教授、白神宏之講師、中井光男助手、金辺忠助手、児玉了祐助手に厚く感謝致します。

本研究を進めるにあたり数々の熱心な御討論、御支援、助言、激励を戴きました古河裕之博士、加藤進博士、長谷川進博士、石崎龍一氏、紫牟田康志氏、徳満昌之氏に厚く感謝いたします。また、大学院在学中において研究生活を共にしたレーザー核融合研究センターの方々、特に、C、D、Compグループの方々に深く感謝致します。彼等がいたからこそ、研究に遊びに全力を注ぐことができ、私の最後の学生生活は充実したものになりました。これを、今後の研究人生の大きな糧として生かしていこうと思います。

本研究は、日本学術振興会の援助のもとに行われたものである。

最後に私事ですが、愛情を持って３年間の研究生活を支えてくれた妻（優美）に心から感謝します。

業績目録

主要論文

(1)N-body Lyapunov exponent in strongly coupled plasmas
Y.Ueshima, K.Nishihara and H.Furukawa, Butsusei Kenkyu **66**, 478 (1996).

(2) Simulation of Lyapunov exponent in strongly coupled one component plasmas
Y.Ueshima, K.Nishihara, D.M.Barnett, T.Tajima and H.Furukawa,
to be published in Phys.Rev.E.

(3) Relation between Lyapunov exponent and dielectric response function
in dilute one component plasmas
Y.Ueshima, K.Nishihara, D.M.Barnett, T.Tajima and H.Furukawa,
submitted to Phys.Rev.Lett., in May, 1996.

(4) N-body Lyapunov expaision rates in one component strongly coupled plasmas
Y.Ueshima, K.Nishihara and H.Furukawa,
Laser Interaction and Related Plasma Phenomena -12th International Conference-,
p.447 (1996), edited by S.Nakai and G.H.Miley,
(AIP conference proceedings, New York ,Vol.**369**).

(5) Lyapunov Exponent and Diffusion Coefficient in Coulomb Many Body Systems
Y.Ueshima, K.Nishihara and H.Furukawa,
Proc. of 24th European Conferrence on Laser Interaction with Matters,
June 3-7 , 1996, Madrid.
(in press).

(6) Lyapunov Exponent of a Many Body System and Its Transport Coefficients
D.M.Barnett, T.Tajima, K.Nishihara, Y.Ueshima and H.Furukawa,
Phys.Rev.Lett. **76**, 1812 (1996).

(7) Ion Collection by Electromagnetic Force
M.Murakami, Y.Ueshima and K.Nishihara, Jpn. J. Appl. Phys. **32**, 1471 (1993).

(8) Instability of a contact surface driven by a nonuniform shock wave
R.Ishizaki, K.Nishihara, H.Sakagami and Y.Ueshima,
Phys.Rev.E **53**, 5592 (1996).

(9) Simulation of Kelvin-Helmhotlz instability in strongly coupled one component plasmas
Y.Ueshima, H.Furukawa, M.Tokumitu and K.Nishihara,
to be submitted to Phys.Rev.E.

(10) Lyapunov exponent in dilute one component plasmas
Y.Ueshima, K.Nishihara, D.M.Barnett, T.Tajima and H.Furukawa,
to be submitted to Phys.Rev.E.

国際会議

(1) 3－d MD Simulation of Hydrodynamic Instability in One Component Dense Plasma
Y.Ueshima, K.Nishihara, H.Furukawa and H.Sakagami,
Oji International Seminar on Elementary Processes in Dense Plasmas,
June 27- July 1,1994, Tomakomai.

(2) N-body Lyapunov expaision rates in one component strongly coupled plasmas
Y.Ueshima, K.Nishihara and H.Furukawa,
12th International Conference on Laser Interaction and Related Plasma Phenomena,
April 24-28 ,1995, Osaka.

(3) Relation Between N−Body Lyapunov Exponent and Transport Coefficient
in One Component Strongly Coupled Plasmas
K.Nishihara, Y.Ueshima, D.M.Barnett and T.Tajima,
25th Anomalous Absorption Conference, May 28 ,1995, Aspen.

(4) Instantaneous Phase Space Lyapunov Expansion Rates
in Storongly Coupled Plasmas with Use of PPPM Code
K.Nishihara, Y.Ueshima, D.M.Barnett and T.Tajima,
Physics Computing '95, June 7 ,1995, Pittsburgh.

(5)N-body Lyapunov exponent in one component strongly coupled plasmas
Y.Ueshima, K.Nishihara and H.Furukawa,
1st Tohwa University International Meeting on Statistical Physics,
November 7-10, 1995, Fukuoka.

(6) Lyapunov Exponent and Diffusion Coefficient in Coulomb Many Body Systems
Y.Ueshima, K.Nishihara and H.Furukawa,
24th European Conferrence on Laser Interaction with Matters,
June 3-7 , 1996, Madrid.

(7) Lyapunov exponent in dilute gas,liquid and solid plasma
K.Nishihara, Y.Ueshima, D.M.Barnett, T.Tajima and H.Furukawa,
24th International Conference on Plasma Physics,
September 9-13, 1996, Nagoya.

(8) Theoritical studies on uniformity and stability in direct－drive laser fusion
K.Nishihara,H, Takabe, M.Murakami, R.Ishizaki, J.G.Wouchuk, M.Honda,
A.Sunahara, S.Hasegawa, Y.Simuta, Y.Ueshima, H.Azechi, H.Shraga, H.Nishimura,
N.Miyanaga, M.Nakai, K.Sigemori, Y.Fukuda and K.Mima,
16th International Atomic Energy Agency Fusion Energy Conference,
September 9-13, 1996, Montreal.

国内学会

(1) 強結合プラズマ中の速度シアー不安定性に伴う渦のダイナミクス
上島　豊，古河　裕之，西原　功修　　日本物理学会　１９９２年　９月２６日

(2) 強相関クーロン系の分子動力学シミュレーション—速度シアー不安定性に伴う渦生成—
上島　豊，古河　裕之，西原　功修　分子シミュレーション討論会　１９９２年１２月１０日

(3) 強結合プラズマ中におけるケルビン・ヘルムホルツ不安定性の３次元粒子シミュレーション
上島　豊，古河　裕之，坂上　仁志，西原　功修　日本物理学会　１９９３年　３月３１日

(4) 強結合プラズマ中におけるケルビン・ヘルムホルツ不安定性の３次元粒子シミュレーションII

上島　豊，古河　裕之，坂上　仁志，西原　功修　日本物理学会　１９９３年１０月１４日

(5) 強相関クーロン系の分子動力学シミュレーション—高密度プラズマ中のケルビンヘルムホルツ不安定性—
上島　豊，古河　裕之，西原　功修　分子シミュレーション討論会　１９９３年１２月１７日

(6) 強結合プラズマ中におけるケルビン・ヘルムホルツ不安定性の３次元粒子シミュレーションIII
上島　豊，古河　裕之，坂上　仁志，西原　功修　日本物理学会　　１９９４年　３月３１日

(7) １成分強結合プラズマのN体リアプノフ指数と輸送係数の相関
上島　豊，古河　裕之，西原　功修　　日本物理学会　　１９９５年　３月２８日

(8) ２成分強結合プラズマのN体リアプノフ指数
上島　豊，古河　裕之，西原　功修　　日本物理学会　　１９９５年　９月２７日

(9) レーザープラズマの流体力学的不安定性II
石崎龍一，西原　功修，坂上仁志，上島　豊，村上　匡且，三間　圀興，西口　彰夫，
松井　伸幸，本田　満，畦地　宏，重森　啓介　　日本物理学会　　１９９５年　９月３０日

(10) 非一様衝撃波による接触面の不安定性に関する理論的解析
石崎龍一，西原　功修，坂上仁志，上島　豊，西口　彰夫，松井　伸幸，本田　満，
重森　啓介畦地　宏，三間　圀興　　核融合エネルギー連合講演会　１９９５年　１２月４日

(11) 非一様衝撃波による流体力学的不安定性
石崎龍一，西原　功修，坂上仁志，上島　豊　　衝撃波シンポジウム　１９９６年　３月１４日

(12) ２成分強結合プラズマのN体リアプノフ指数II
上島　豊，古河　裕之，西原　功修　　日本物理学会　　１９９６年　３月３１日

(13) 相対論的３Ｄ粒子コード開発とレーザープラズマ相互作用の予備的シミュレーション
岡本　隆，西原　功修，坂上仁志，古河　裕之，上島　豊，宮本　斉児，本田　満
日本物理学会　　１９９６年　４月３日

(14) ３Ｄ相対論的電磁波粒子コードを用いたレーザープラズマ相互作用のシミュレーション
岡本　隆，西原　功修，坂上仁志，S.I.Anisimov，古河　裕之，上島　豊，宮本　斉児，本田　満
日本物理学会　　１９９６年　１０月３日