arXiv:2301.02431v1 [cond-mat.stat-mech] 6 Jan 2023

流体力学尺度上的托达晶格平衡时空关联

Guido Mazzuca*、Tamara Grava†、Thomas Kriecherbauer‡、
Kenneth T-R McLaughlin §、Christian B. Mendl¶、HerbertSpohn‖

2023年1月9日

摘要

我们报告了对热平衡状态下 Toda 晶格时空关联的分子动力学模拟。我们在广泛的压力和温度范围内，对伸长量、动量和能量的关联函数进行了数值计算。随后将数值结果与欧拉尺度上线性化广义流体力学的预测进行了比较。系统尺寸为 $N = 3000$，4000，时间为 $t = 600$，此时弹道标度得到了充分验证。无需任何可调参数，数值获得的标度函数与理论结果的偏差小于 3.5%。

1 引言

统计力学的核心目标之一，是探究人们感兴趣的物理可观测量的平衡关联结构。这些关联可以是静态关联，但更具雄心的研究也会考察时空关联。一类有趣但经过精细调谐的哈密顿量对应于可积多体系统，无论是经典系统还是量子系统。这样的选择将我们限定在一维系统中。一般而言，无论模型是否可积，静态关联都会呈指数衰减。然而，关联的动力学则截然不同。在非可积链中，关联以少数几个窄峰的形式以恒定速度传播，随后呈现出特征性的亚弹道展宽。另一方面，在可积模型中，关联仍以弹道方式扩展，但此时

*瑞典斯德哥尔摩皇家理工学院数学系。邮箱：*mazzuca@kth.se*

†SISSA（国际高等研究院），意大利的里雅斯特；英国布里斯托大学数学学院；意大利国家核物理研究院的里雅斯特分部，邮箱：*grava@sissa.it*

‡德国拜罗伊特大学数学系邮箱：*thomas.kriecherbauer@uni-bayreuth.de*§美国新奥尔良杜兰大学邮箱：*kmclaughlin@tulane.edu*

¶慕尼黑工业大学信息学系，Boltzmannstraße 3，85748 加兴，德国邮箱：*christian.mendl@tum.de*

‖慕尼黑工业大学数学与物理系，Boltzmannstraße 3 和 James-Franck-Str.1，85748 加兴，德国邮箱：*spohn@ma.tum.de*

速度谱很宽。这种行为已通过对 Ablowitz-Ladik 模型 [32], （非线性薛定谔方程的一种可积离散化形式）的分子动力学（MD）模拟得到验证。对 Toda链 [22] 的模拟进一步证实了这一点。在理论方面，2016 年广义流体动力学（GHD）的构建是一项重要突破 [3, 6]。这一理论提供了强有力的工具，至少原则上能够预测关联谱的精确形式。随着这一进展，分子动力学模拟也可以被视为对 GHD 有效性的检验。

从凝聚态物理的角度来看，可积量子模型受到了相当多的关注。受尺寸限制，人们更倾向于模拟宏观剖面。不过，也有人通过 DMRG 模拟研究时间关联 [4, 5, 8, 34]。近年来，人们开始关注半填充和各向同性点处 XXZ 模型的时空自旋-自旋关联 [10, 20, 25]。对于一种由单位长度的 3 个自旋构成、相互作用方式使模型可积的离散经典链，也研究了同一物理量 [7]。经典 sinh-Gordon 方程也有类似的情况：它作为非线性连续介质波动方程是可积的，并且具有一个可积离散化模型；关于该离散模型平衡时间关联的分子动力学模拟，见 [2] 。

在本文中，我们通过分子动力学模拟研究热平衡下 Toda链的关联函数，并将结果与广义流体动力学的预测进行比较。我们将在最后一节讨论与 [22] 的联系。为使本文内容相对完整，我们首先讨论非可积链的 Landau-Lifshitz 理论。该理论揭示了时空关联与线性化流体力学之间的联系。对于 Toda链，则需要扩展该理论，以容纳无限多个守恒场。我们报告 Toda链的分子动力学模拟结果，并将其与线性化广义流体动力学进行比较。

2 朗道-利夫希茨理论

Toda链的动力学由哈密顿量支配

$$H = \sum_{j\in\mathbb{Z}} \left(\tfrac{1}{2}p_j^2 + \exp(-(q_{j+1} - q_j))\right), \tag{1}$$

其中 $(q_j,\ p_j) \in \mathbb{R}^2$ 分别是第 j 个粒子 [43, 44] 的位置和动量。通过 $r_j = q_{j+1} - q_j$ 引入第 j 个伸长量（自由体积）后，运动方程为

$$\frac{d}{dt}r_j = p_{j+1} - p_j\,, \qquad \frac{d}{dt}p_j = -\mathrm{e}^{-r_j} + \mathrm{e}^{-r_{j-1}}, \qquad j \in \mathbb{Z}. \tag{2}$$

按照惯例，人们通过 $(g/\gamma)\ \exp(-\gamma(q_{j+1} - q_j))$ 引入相互作用势的作用范围和强度系数。不过，通过适当改变时空尺度，可以恢复形式 (2)，参见第 5 节的讨论。Toda 哈密顿量没有自由参数。由于 (1) 的平衡测度呈乘积形式，静态关联很容易求得。时间关联则更具挑战性，早期尝试见 [36, 37] 。一种新方法现已发展出来，称为广义流体动力学。其核心思想是首先确定 Toda 链的流体力学方程；这些方程必然是一组非线性耦合双曲守恒律。在此基础上，可以构造相应的朗道-利夫希茨理论 [13, 24], ，其建立在线性化广义流体动力学之上。

在深入细节之前，我们先回顾一下针对具有一般相互作用势的链的朗道-利夫希茨理论，该势记为 V（对于 Toda 晶格，$V\ (x)\ = \mathrm{e}^{-x}$），参见 [38]

以及其中列出的参考文献。因此，在式 (1) 中，相互作用项为 $V(q_{j+1}-q_j)$，运动方程变为

$$\frac{d}{dt}r_j = p_{j+1} - p_j\,, \qquad \frac{d}{dt}p_j = V'(r_j) - V'(r_{j-1}).$$

为了定义时空关联，我们首先必须指定用于模拟热平衡的随机初始数据。根据伽利略不变性，只需考虑平均动量为零的情形。此时，吉布斯态由逆温度 $\beta > 0$ 和参数 P 刻画，并满足物理压力等于 P/β。为简便起见，我们也将 P 称为压力。P 的允许范围取决于 V。若当 $|x| \to \infty$ 时，V 比 $|x|$ 发散得更快，则 $P \in \mathbb{R}$。对于 Toda 晶格，$P > 0$，这是因为指数函数在一侧发散。在热平衡下，$\{(r_j,\ p_j)\ j \in \mathbb{Z}\}$ 是一组独立同分布随机变量，其单点概率密度为

$$Z_0(P,\beta)^{-1}\exp\big(-\beta\big(\tfrac{1}{2}p_0^2 + V(r_0)\big) - Pr_0\big). \tag{3}$$

这里，$Z_0(P,\ \beta)$是归一化配分函数。请注意，按照我们的约定，P和 β 在线性地出现在指数中。关于这组独立同分布随机变量的期望值记作$\langle\cdot\rangle_{P,\ \beta}$。我们还将协方差的记法简写为$\langle X_1X_2\rangle^{\mathrm{c}}_{P,\ \beta} = \langle X_1X_2\rangle_{P,\ \beta} - \langle X_1\rangle_{P,\ \beta}\langle X_2\rangle_{P,\ \beta}$，其中具体的随机变量 X_1，X_2 将由上下文明确。

对于一般的 V，守恒场为伸长量、动量和能量，其密度为

$$\vec{Q}(j) = \big(r_j, p_j, e_j\big), \qquad e_j = \tfrac{1}{2}p_j^2 + V_j, \tag{4}$$

简记为 $V_j = V(r_j)$。$\vec{Q}$ 是一个三维向量，其分量标记为 $n = 0$，1、2。静态空间关联函数定义为

$$C_{m,n}(j) = \langle Q_m(j)Q_n(0)\rangle^{\mathrm{c}}_{P,\beta} \tag{5}$$

静态易感率则通过对空间求和定义为，

$$C_{m,n} = \sum_{j\in\mathbb{Z}}\langle Q_m(j)Q_n(0)\rangle^{\mathrm{c}}_{P,\beta},$$

m，$n = 0$，1、2。由于底层测度是乘积测度，只有 $j = 0$ 项非零，并且

$$C = \begin{pmatrix} \langle r_0r_0\rangle^{\mathrm{c}}_{P,\beta} & 0 & \langle r_0e_0\rangle^{\mathrm{c}}_{P,\beta} \\ 0 & \langle p_0p_0\rangle^{\mathrm{c}}_{P,\beta} & 0 \\ \langle r_0e_0\rangle^{\mathrm{c}}_{P,\beta} & 0 & \langle e_0e_0\rangle^{\mathrm{c}}_{P,\beta} \end{pmatrix},$$

其余零项是因为$\langle p_0\rangle_{P,\ \beta} = 0$、$\langle p_0^3\rangle_{P,\ \beta} = 0$和 r_0，p_0 是相互独立的随机变量。之后我们将需要流体动力学尺度下守恒场的统计性质。更确切地说，对于光滑测试函数 f，我们考虑随机场

$$\vec{\xi}_\epsilon(f) = \sqrt{\epsilon}\sum_{j\in\mathbb{Z}} f(\epsilon j)\big(\vec{Q}(j) - \langle\vec{Q}(0)\rangle_{P,\beta}\big).$$

于是，根据独立变量的中心极限定理，

$$\lim_{\epsilon\to 0}\vec{\xi}_\epsilon(f) = \int_{\mathbb{R}}\mathrm{d}x\, f(x)\vec{u}(x),$$

其中，极限场 $\vec{u}(x)$ 是定义在 $\mathbb{R}$ 上的均值为零的高斯随机场，$\mathbb{E}(\vec{u}(x)) = 0$，其协方差为

$$\mathbb{E}(u_m(x)u_n(x')) = C_{m,n}\delta(x-x'), \tag{6}$$

换句话说，$\vec{u}(x)$ 是各分量相关的高斯白噪声。

在微观层面，时空关联的定义是将其中一个可观测量演化至时间 t，从而得到

$$S_{m,n}(j,t) = \langle Q_m(j,t)Q_n(0,0)\rangle^{\mathrm{c}}_{P,\beta}. \tag{7}$$

注意，吉布斯测度具有时空平稳性，因此不失一般性地，在式 (7) 中，Q_n 的两个自变量都可以取为 (0,0)。要理解 $S_{m,n}$ 的结构，必须依赖近似方法。对于长时间的弹道区间，一种标准方法是朗道-利夫希茨理论；该理论将 $Q_n(0,0)$ 视为原点处初始吉布斯测度的微小扰动。这一扰动将会传播，随后通过时空点 (j,t) 处 Q_m 的平均值进行探测。对于较大的 (j,t)，微观动力学可由欧拉方程近似描述，但由于扰动很小，只需采用其线性化形式。更具体地说，近似理论将是在 $\mathbb{R}\times\mathbb{R}$ 上的连续场 $\vec{u}(x,t)$，其由下式支配

$$\partial_t\vec{u}(x,t) + A\partial_x\vec{u}(x,t) = 0\,, \tag{8}$$

具有(6)中所规定的随机初始条件。3×3 矩阵A是常数，即与(x,t)无关。要解释A 的结构还需要进一步推导。更多细节以及关键恒等式的证明，请参阅 [38] 。

由运动方程可知，对于每个密度 $Q_n(j,t)$，都存在一个流密度$J_n(j,t)$，使得

$$\frac{d}{dt}Q_n(j,t) + J_n(j+1,t) - J_n(j,t) = 0.$$

具体而言，流密度为

$$\vec{J}(j) = -(p_j, V'_{j-1}, p_jV'_{j-1}), \tag{9}$$

这里我们采用如下约定：省略时间参数 t 表示时间为0的场。于是定义静态流-守恒场关联函数

$$B_{m,n}(j) = \langle J_m(j)Q_n(0)\rangle^{\mathrm{c}}_{P,\beta}, \tag{10}$$

以及相应的易感率

$$B_{m,n} = \sum_{j\in\mathbb{Z}}\langle J_m(j)Q_n(0)\rangle^{\mathrm{c}}_{P,\beta}.$$

尽管其定义看起来并不对称，

$$B_{m,n} = B_{n,m}. \tag{11}$$

一般而言，欧拉方程是基于热平均流构建的。对平均场进行线性化可得

$$A = BC^{-1}.$$

这里，求平均流对化学势的导数时会出现B，而从强度变量转换为广延变量时会出现C^{-1}。根据定义，$C = C^{\mathrm{T}}$且$C > 0$；此外，根据式（11），$B = B^{\mathrm{T}}$。因此

$$A = C^{1/2} C^{-1/2} B C^{-1/2} C^{-1/2},$$

这确保A具有实特征值和一组完备的左右特征向量。非谐晶格在时间反演下具有对称性，这意味着其特征值为 $\vec{c} = (-c, 0, c)$，其中 $c > 0$~为等熵声速。我们将A的右、左特征向量分别记为 $|\psi_\alpha\rangle$ 和 $\langle\psi_\alpha|, \alpha = 0,1,2$。根据这些信息，满足初始条件 (6) 的方程 (8) 的解为

$$\begin{aligned} S^{\mathrm{LL}}_{m,n}(x,t) &= \mathbb{E}\big(u_m(x,t)u_n(0,0)\big) \\ &= (\delta(x - At)C)_{m,n} = \sum_{\alpha=0}^{2} \delta(x - c_\alpha t)(|\psi_\alpha\rangle\langle\tilde{\psi}_\alpha| C)_{m,n} \end{aligned}$$

其中 $m, n = 0,1,2$。共有三个 δ 峰：一个静止不动的热峰，以及两个以速度 c 向相反方向传播的声峰。给定 m, n 后，每个峰都有一个带符号的权重，该权重取决于C和A的左右特征向量。

朗道-利夫希茨理论断言，微观关联函数

$$S_{m,n}(j,t) \simeq S^{\mathrm{LL}}_{m,n}(x,t)$$

对于 $j = \lfloor xt \rfloor$，$\lfloor \cdot \rfloor$ 表示整数部分，且 t 足够大。读者可能会对这一结论感到失望。但凭借这些基本信息，仍可研究各峰的精细结构，尤其是其特有的亚弹道展宽及相应的标度函数 [31, 38, 39]。

转向 Toda 晶格后，守恒律现在标记为 $n = 0, 1, \ldots\ldots$，因此 A、B、C 变为无限维矩阵。相应的朗道-利夫希茨理论已在 [40] 中建立。正如下一节将要讨论的那样，经过适当调整后，方程（12）仍然成立。

3 Toda 晶格，线性化广义流体力学

Toda 晶格的守恒律由 Lax 矩阵 [11, 26]得到。为此，我们首先引入 Flaschka 变量

$$a_j = \mathrm{e}^{-r_j/2}.$$

于是运动方程变为

$$\frac{d}{dt} a_j = \tfrac{1}{2} a_j (p_j - p_{j+1}), \quad \frac{d}{dt} p_j = a_{j-1}^2 - a_j^2. \tag{13}$$

Lax 矩阵 L定义为

$$L_{j,j} = p_j, \qquad L_{j,j+1} = L_{j+1,j} = a_j,$$

$j \in \mathbb{Z}$，以及 $L_{i,\,j} = 0$ 否则。显然 $L = L^{\mathrm{T}}$。守恒场由非负整数标记，其密度为

$$Q_0(j) = r_j, \qquad Q_n(j) = (L^n)_{j,j}\,, \tag{14}$$

其中 $n \geq 1$。请注意， $Q_n(j)$ 是局域的，也就是说，它仅依赖区间 $[j-n, j+n]$ 内的变量。文献 [15] 给出了这些量的显式表达式。对于流密度，可得

$$J_0(j) = -p_j, \qquad J_n(j) = (L^n L^{\downarrow})_{j,j}, \quad n = 1, 2, \dots, \tag{15}$$

其中 $L^{\downarrow}$ 是 L的下三角部分。于是，在 Toda 动力学下

$$\frac{d}{dt} Q_n(j,t) + J_n(j+1,t) - J_n(j,t) = 0,$$

这是局部形式的第 n 个守恒律。

列表中的前两项是伸长量和动量，我们当前的定义与式 (4)、(9) 中的定义一致。然而，对于 $n = 2$ ，可得 $(L^2)_{0,\,0} = p_0^2 + a_{-1}^2 + a_0^2$ 以及 $(L^2 L^{\downarrow})_{0,\,0} = a_{-1}^2 (p_{-1} + p_0)$，这与式 (4)、(9) 在两方面有所不同。首先是显而易见的因子 2。在数值图中，我们使用物理能量密度 e_j。第二点则更为微妙。密度的定义并不唯一，因为可以加上某个局部函数与其向右平移一个位置后的函数之差。将某种密度定义在某个空间区间上求和时，结果与采用另一种密度定义所得的结果仅相差一个边界项。因此，体项会有一个量级为 1/(区间长度) 的修正，但这不会影响流体力学方程。对于流，两种定义之差可以写成一个全时间导数；在某个时间区间上积分时，它同样只是一个边界项。本节采用约定 (14) 和 (15)，因为分析很大程度上依赖于 Lax 矩阵。对于 $n = 2$ 之后的项，尽管这些场不再有名称，在流体力学理论中仍须将它们纳入考量。

无限体积下的静态场-场关联函数定义如式（5），流-场关联函数定义如式（10）。特别地，$B = B^{\mathrm{T}}$。当然， C， B 现在是由以 $\mathbb{N}_0$ 为指标的序列构成的希尔伯特空间上的矩阵，即空间 $\ell_2(\mathbb{N}_0)$。为区分 3×3 矩阵与其无限维对应物，后者采用标准斜体符号表示。Toda 晶格的时空关联函数定义为

$$S_{m,n}(j,t) = \langle Q_m(j,t) Q_n(0,0) \rangle^{\mathrm{c}}_{P,\beta}. \tag{16}$$

我们计划构造其 Landau-Lifshitz 近似。本质上，这相当于分析

$$\left(\mathrm{e}^{At} C\right)_{m,n}, \qquad A = BC^{-1}. \tag{17}$$

虽然我们主要关注与指标 m， $n = 0$，1 2 对应的物理场，但要理解式（17）中的算子，就需要了解这些无限维矩阵。

从基础内容开始，Toda 晶格的自由能为

$$F_{\mathrm{eq}}(P,\beta) = \log \sqrt{\beta/2\pi} + P \log \beta - \log \Gamma(P).$$

特别地，平均伸长量 ν 由下式确定

$$\nu(P,\beta) = \partial_P F_{\mathrm{eq}}(P,\beta) = \langle Q_0(0) \rangle_{P,\beta} = \log \beta - \psi(P), \tag{18}$$

其中 ψ 为双伽马函数。高阶场的期望值可以写成概率测度 $\nu\rho_{\mathsf{p}}$的矩，

$$\kappa_n = \langle Q_n(0) \rangle_{P,\beta} = \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}w \nu \rho_{\mathsf{p}}(w) w^n, \tag{19}$$

$n \geq 1$。 ρ_{p} 称为粒子密度。要确定该密度，首先必须求解热力学贝特方程（TBA）。为此，我们引入积分算子

$$Tf(w) = 2\int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}w' \log|w - w'| f(w'),$$

$w \in \mathbb{R}$，视为作用于 $L^2(\mathbb{R}, \mathrm{d}w)$ 上的算子，并定义数密度

$$\rho_{\mathsf{n}}(w) = \mathrm{e}^{-\varepsilon(w)}, \tag{20}$$

具有准能量 ε。这些准能量满足 TBA 方程

$$\varepsilon(w) = \tfrac{1}{2}\beta w^2 - \mu - (T\mathrm{e}^{-\varepsilon})(w), \tag{21}$$

其中，必须调节化学势 μ，使得

$$\int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}w \rho_{\mathsf{n}}(w) = P. \tag{22}$$

因此，数密度取决于参数 P 和 β。

TBA 方程与随机矩阵理论的 β 系综密切相关。我们将（21）改写为

$$-\log \rho_{\mathsf{n}}(w) = \tfrac{1}{2}\alpha w^2 - \mu - \alpha P(T\rho_{\mathsf{n}})(w).$$

当 $\alpha \to \infty$ 时，左侧的熵项可以忽略，由此可认出这是区间 $[-2\sqrt{P}, 2\sqrt{P}]$ 上维格纳半圆律的定义方程。Lax 态密度是 ρ_{n} 的 P 阶导数，在两个边界处按 $(w \pm 2\sqrt{P})^{-1/2}$ 发散。随着 α 降低，边界逐渐变得模糊，最终过渡为高斯分布。

实际上，TBA 方程必须通过数值方法求解。但对于热平衡，有一个精确解 [1, 12, 35]。将满足 ρ_{n}^* 的方程 (21) 及约束条件 (22) 的解记为 $\beta = 1$，则有

$$\rho_{\mathsf{n}}^*(w) = \frac{\mathrm{e}^{-w^2/2}}{\sqrt{2\pi}|\hat{f}_P(w)|^2}, \quad \hat{f}_P(w) = \int_0^\infty \mathrm{d}t f_P(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}wt}, \quad f_P(t) = \sqrt{2}\pi^{-1}\Gamma(P)^{-1/2}t^{P-1}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}t^2}. \tag{23}$$

在数值模拟中，使用精确解更为有利。

TBA 方程是广义流体动力学中的一种标准工具，可用于表示与广义自由能变分原理相关的欧拉-拉格朗日方程。针对 Toda 晶格，这样的变分公式已在 [9, 42] 中给出。基于大偏差理论和转移算子方法的证明也已出现 [16, 27, 29, 30]。

接下来，我们定义某个函数 f 的修饰变换：

$$f^{\mathrm{dr}} = \big(1 - T\rho_{\mathsf{n}}\big)^{-1} f$$

其中 ρ_{n} 视为一个乘法算子。于是，数目与粒子密度之间的关系为

$$\rho_{\mathsf{n}}(w) = \frac{\rho_{\mathsf{p}}(w)}{1 + T\rho_{\mathsf{p}}(w)} \tag{24}$$

其逆为

$$\rho_{\mathsf{p}} = (1 - \rho_{\mathsf{n}}T)^{-1}\rho_{\mathsf{n}} = \rho_{\mathsf{n}}\varsigma_0^{\mathrm{dr}}, \tag{25}$$

采用约定 $\varsigma_n(w) = w^n$。

对于平均流，也有类似的恒等式。核心的新颖量是有效速度

$$v^{\mathrm{eff}} = \frac{\varsigma_1^{\mathrm{dr}}}{\varsigma_0^{\mathrm{dr}}}, \tag{26}$$

见 [3, 6, 41, 45]。于是

$$\langle J_0(0)\rangle_{P,\beta} = -\kappa_1,$$

而对于 $n \geq 1$,

$$\langle J_n(0)\rangle_{P,\beta} = \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}w \rho_{\mathsf{p}}(w)(v^{\mathrm{eff}}(w) - \kappa_1)w^n.$$

在热平衡中，我们有 $\kappa_1 = 0$。

由于下文会出现许多关于 $\mathbb{R}$ 的积分，我们先引入以下简写

$$\langle f\rangle = \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}w f(w).$$

采用这一记号后， C 矩阵的形式为

$$\begin{aligned}
C_{0,0} &= \nu^3\langle \rho_{\mathsf{p}}\varsigma_0^{\mathrm{dr}}\varsigma_0^{\mathrm{dr}}\rangle,\\
C_{0,n} = C_{n,0} &= -\nu^2\langle \rho_{\mathsf{p}}\varsigma_0^{\mathrm{dr}}(\varsigma_n - \kappa_n\varsigma_0)^{\mathrm{dr}}\rangle,\\
C_{m,n} &= \nu\langle \rho_{\mathsf{p}}(\varsigma_m - \kappa_m\varsigma_0)^{\mathrm{dr}}(\varsigma_n - \kappa_n\varsigma_0)^{\mathrm{dr}}\rangle,
\end{aligned}$$

$m, n \geq 1$。注意，矩阵 C 具有分块结构

$$C = \begin{pmatrix} C_{0,0} & C_{0,n} \\ C_{m,0} & C_{m,n} \end{pmatrix},$$

也就是说，$C_{m,n}$ 对于 $m, n \geq 1$ 呈现出简单的规律。这种结构还会在 B和 $\mathsf{e}^{At}C$中再次出现。

场- 流关联函数 B 可以用类似的方法计算，结果为

$$\begin{aligned}
B_{0,0} &= \nu^2\langle \rho_{\mathsf{p}}(v^{\mathrm{eff}} - \kappa_1)\varsigma_0^{\mathrm{dr}}\varsigma_0^{\mathrm{dr}}\rangle,\\
B_{0,n} = B_{n,0} &= -\nu\langle \rho_{\mathsf{p}}(v^{\mathrm{eff}} - \kappa_1)\varsigma_0^{\mathrm{dr}}(\varsigma_n - \kappa_n\varsigma_0)^{\mathrm{dr}}\rangle,\\
B_{m,n} &= \langle \rho_{\mathsf{p}}(v^{\mathrm{eff}} - \kappa_1)(\varsigma_m - \kappa_m\varsigma_0)^{\mathrm{dr}}(\varsigma_n - \kappa_n\varsigma_0)^{\mathrm{dr}}\rangle.
\end{aligned}$$

与式 (12) 中一样，我们要确定朗道-利夫希茨理论的传播子，记作$S^{\mathrm{LL}}_{m,n}(x,t)$。原则上，所有部分都已组装完成。然而，要计算 A的指数，需要对其进行对角化。详情见 [40]；这里只提及，人们构造一个线性相似变换 R，使得 $R^{-1}AR$ 等于乘以

$$\nu^{-1}(v^{\mathrm{eff}}(w) - \kappa_1) \tag{30}$$

在 $L^2(\mathbb{R}, \mathrm{d}w)$ 中。这里 v^{eff} 是式（26）中定义的有效速度。采用与式（28）相同的分块约定，朗道-利夫希茨近似下的时空关联函数为

$$\begin{aligned}
S^{\mathrm{LL}}(x,t) = \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}w \delta\big(x - t\nu^{-1}(v^{\mathrm{eff}}(w) - \kappa_1)\big)\nu\rho_{\mathsf{p}}(w)\\
\times \begin{pmatrix} \nu^2\varsigma_0^{\mathrm{dr}}(w)^2 & \nu\varsigma_0^{\mathrm{dr}}(w)(\varsigma_n - \kappa_n\varsigma_0)^{\mathrm{dr}}(w) \\ \nu\varsigma_0^{\mathrm{dr}}(w)(\varsigma_m - \kappa_m\varsigma_0)^{\mathrm{dr}}(w) & (\varsigma_m - \kappa_m\varsigma_0)^{\mathrm{dr}}(w)(\varsigma_n - \kappa_n\varsigma_0)^{\mathrm{dr}}(w) \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

注意， $S^{\mathrm{LL}}(x,\ 0)\ =\delta(x)C$。作为欧拉方程的一项性质，表达式（31）具有精确的弹道标度，

$$S^{\mathrm{LL}}_{m,n}(x,t)=\frac{1}{t}S^{\mathrm{LL}}_{m,n}(x/t,1). \tag{32}$$

关联函数 $S_{m,\ n}(j,\ t)$ 是通过我们的分子动力学模拟计算得到的，随后将与$S^{\mathrm{LL}}_{m,\ n}(x,\ t)$进行比较。

4 数值模拟

进行分子动力学模拟时，首先必须指定一个具有合适边界条件的有限环 $[1,\ldots,N]$。对于位置 q_j 和动量 p_j 的动力学，施加

$$q_{N+1}=q_1+\nu N. \tag{33}$$

参数 ν 确定每个粒子的自由体积，可以为正也可以为负。在我们的模拟中，我们实际上允许自由体积发生波动：通过选择随机初始条件，使得$\{r_1,p_1,\ldots,r_N,p_N\}$是具有式（3）所指定单点分布的独立同分布随机变量。随后，确定性时间演化由带有边界条件的式（13）支配

$$r_0=r_N,\qquad p_{N+1}=p_1.$$

事实上, 式（33）中的边界条件相当于微正则约束

$$\sum_{j=1}^{N}r_j=\nu N.$$

如果设定 $\nu\ =\ \langle Q_0(0)\rangle_{P,\ \beta}$，那么对于较大的 N，根据系综等价性，采样关联函数 $S_{m,\ n}(j,\ t)$ 的两种方案之间的差异应当与统计涨落的量级相当。对于几个具有代表性的例子，我们验证了对于所研究的特定可观测量，系综等价性确实成立。

回到系统尺寸的选择，还存在一个重要的物理约束。在所有模拟中，都可以观察到清晰的右、左前沿，它们以恒定速度传播；在前沿之外，空间关联呈指数级微小。在环上，两个前沿必然会在经过一段时间后发生碰撞。这种相遇会对分子动力学产生显著影响，而线性化广义流体动力学分析无法捕捉到这一点。因此，模拟时间受到首次碰撞时间的限制。事实上，我们注意到，在图1-3中，对于这些图所展示的整个 $(P,\ \beta,\ m,\ n)$ 范围，线性化广义流体动力学和分子动力学都清楚地显示出最大速度至多为 $\Delta j/\Delta t=2$。考虑到初始关联函数与 δ_{0j} 成正比，我们得出结论：对于尺寸为 $N=3000$ 的环，两个前沿在时间 $t=750$ 之前不会发生碰撞，而该时间大于我们模拟中所采用的 $t=600$。

在展示和讨论结果之前，我们将进一步介绍热力学贝特方程的数值求解，以及实际采用的分子动力学方案。

4.1 数值实现的细节

4.1.1 求解线性化广义流体动力学

为数值求解线性化广义流体动力学方程，我们采用一种与 [33] 中类似的数值方法。首先，式 (23) 可用抛物柱函数 $D_\nu(z)$ 表示，该函数可直接从 `Mathematica` 获取。这便给出了 TBA 方程 (21)、(22) 的解。

接着，我们用帽函数对依赖于 w 的函数进行简单的有限元离散化，从而在均匀网格上得到分段线性函数。预先计算出这些帽函数对应的式 (20) 中的积分算子 T 后，修饰变换 (24) 就变成了一个可通过数值方法求解的线性方程组。此过程得到 $\varsigma_n^{\mathrm{dr}}$，随后可通过式 (25) 得到 ρ_{p}，并通过式 (26) 得到 v^{eff}。矩可由 $\kappa_n = \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}w \nu \rho_{\mathsf{n}}(w) \varsigma_n^{\mathrm{dr}}(w)$ 计算，也可等价地由式 (19) 计算。

为计算式（31）中的关联函数，我们注意到，被积函数中的δ函数会产生一条参数化曲线，其第一坐标（对应于 x/t）等于式（30）中的 $\tilde{v}^{\mathrm{eff}}$，第二坐标则等于被积函数中其余各项除以δ函数产生的雅可比因子 $\left|\mathrm{d}\,\mathrm{d}w\,\tilde{v}^{\mathrm{eff}}(w)\right|$。

4.1.2 分子动力学模拟

我们用以下数值方案近似式（16）中关联函数的分子动力学定义所包含的期望值 $S_{m,\,n}$。该方案的实现程序以 Python编写，可在 [28]找到。首先，我们生成服从吉布斯测度的随机初始条件；根据式（3），这些初始条件由独立同分布随机变量（$r_j,\ p_j$）$_{1\le j\le N}$给出。具体而言，变量 p_j 服从标准正态分布，我们通过 Numpy v1.23的内置函数 `random.default rng().normal` [18]生成这些变量，再乘以 $1/\sqrt{\beta}$。简单计算可知，r_j 可取为 $-\ln(X/(2\beta))$，其中 X 服从形状参数为 $2P$ 的卡方分布。我们使用 Numpy v1.23的内置函数 `random.default rng().chisquare`生成随机变量 X。按此方式选定初始条件后，我们求解式（2）。

对于演化过程，我们对经典的二阶 St¨ormer–Verlet 算法 [17] 进行调整，使其适用于变量 $(\mathbf{p},\mathbf{r})$。具体而言，我们采用的时间步长为 $\delta = 0.05$。给定时刻 t的解 $(\mathbf{r}(t),\mathbf{p}(t))$，我们通过以下格式近似时刻 $t+\delta$ 的解：

$$
\begin{aligned}
p_j\left(t+\frac{\delta}{2}\right) &= p_j(t) - \frac{\delta}{2}\left(e^{-r_j(t)} - e^{r_{j-1}(t)}\right), \\
r_j(t+\delta) &= r_j(t) + \delta\left(p_{j+1}\left(t+\frac{\delta}{2}\right) - p_j\left(t+\frac{\delta}{2}\right)\right), \\
p_j(t+\delta) &= p_j\left(t+\frac{\delta}{2}\right) - \frac{\delta}{2}\left(e^{-r_j(t+\delta)} - e^{r_{j-1}(t+\delta)}\right),
\end{aligned}
$$

对所有 $j = 1, \ldots, N$均成立。在实现的这一部分中，我们大量使用了库 `Numba` [23]来加快计算。

随后，我们根据 3×10^6 次具有独立初始条件的试验次数，计算期望 $S_{m,n}$ 的近似值。这里，我们取所有试验的经验均值；对于每次试验，我们还对通过依次选择环上的每个格点所生成的 $N = 3000$ 组数据取均值，选择过程持续 $j = 0$。

为评估数值模拟的质量，我们将数值实验重复了最多五次，并改变环的长度；此外，我们还在比下图所示更多的中间时间步上对解进行了评估。此外，我们将结果与由独立于 `Python` 程序开发的 `MATLAB` 程序所得的相应结果进行了比较；该程序采用不同的数值方案。它使用 `MATLAB` 的随机数生成器 `randn` 来生成初始动量，并结合 `rand`

拒绝法生成初始伸长量。随后，使用求解器 `ode45` 计算动力学过程，该求解器利用龙格–库塔方法对环上与 (1) 式相关的哈密顿系统进行数值求解。我们发现，不同实验之间的偏差与图 4–5 中高频振荡的振幅大小相当。这些振荡源于经验均值围绕其期望值的随机涨落 $S_{m,\ n}$。因此，不同实验的结果在这些振荡量级内保持一致，表明相应数值结果具有一致性。

还想提及的是，本文中出现的所有图片都是使用库 `matplotlib` [19] 制作的。

4.2 在时间 $t = 600$ 比较线性化广义流体动力学与分子动力学

我们比较了广义流体动力学的预测与分子动力学模拟在三种不同温度下的结果，这些温度分别对应 $\beta = 0.5$ （图1）、 $\beta = 1$ （图2）和 $\beta = 2$ （图3）。对于每个 β，我们选择压力参数 P 的三个不同取值，使得由式（ 18 ）给出的相应平均伸长量在低压时为正（ ≈ 2.57 ）、在高压时为负（≈ -0.42），而在中压时近似为零。我们在表1中汇总了这些数值。

压力	$\beta = 0.5$	$\beta = 1$	$\beta = 2$
low	$P = 0.32,\ \langle r\rangle \approx +2.58$	$P = 0.4,\ \langle r\rangle \approx +2.56$	$P = 0.52,\ \langle r\rangle \approx +2.56$
中等	$P = 0.95,\ \langle r\rangle \approx -0.03$	$P = 1.5,\ \langle r\rangle \approx -0.04$	$P = 2.55,\ \langle r\rangle \approx -0.03$
high	$P = 1.21,\ \langle r\rangle \approx -0.42$	$P = 2.0,\ \langle r\rangle \approx -0.42$	$P = 3.53,\ \langle r\rangle \approx -0.42$

表1：数值 实验中使用的 β 和 P 以及相应的平均伸长量 s

在九种情况中的每一种情况下，我们都使用第4.1.1节所述的数值方案，计算了所有 $0 \le n \le m \le 2$ 的关联函数的朗道-利夫希茨近似$S^{\mathrm{LL}}_{m,\ n}(\cdot,\ 1)$，见式（31）。其图像以虚线显示在图1-3中。请注意，声峰的速度显著取决于压力和温度。此外，与中压和高压相比，在低压下，热峰和声峰预测的精细结构都大不相同。

图1-3中的彩色线条展示了相应分子动力学的数值结果。根据预测的弹道标度（32），我们将$tS_{m,\ n}(j,\ t)$绘制为j/t 的函数，适用于 $t = 600$。这里，$S_{m,\ n}(j,\ t)$的数值是使用第4.1.2节所述的数值方法近似得到的。

线性化广义流体动力学与分子动力学的结果高度吻合，尤其值得一提的是，这里没有任何可调参数。在图1-3所示的54组对比中，广义流体动力学对热峰和声峰精细结构的预测，与分子动力学在时刻 $t = 600$观测到的结果都高度吻合。正如我们将在下一小节中更详细地展示的，最大的偏差大多出现在声峰附近，且不超过峰值最大值的3.5%。

4.3 偏差 o 时刻 $t = 150$ 和 $t = 60$线性化广义流体动力学相对于分子动力学的偏差 0

本小节有两个目的。一方面，我们考察广义流体动力学预测与分子动力学模拟之间那些很难在

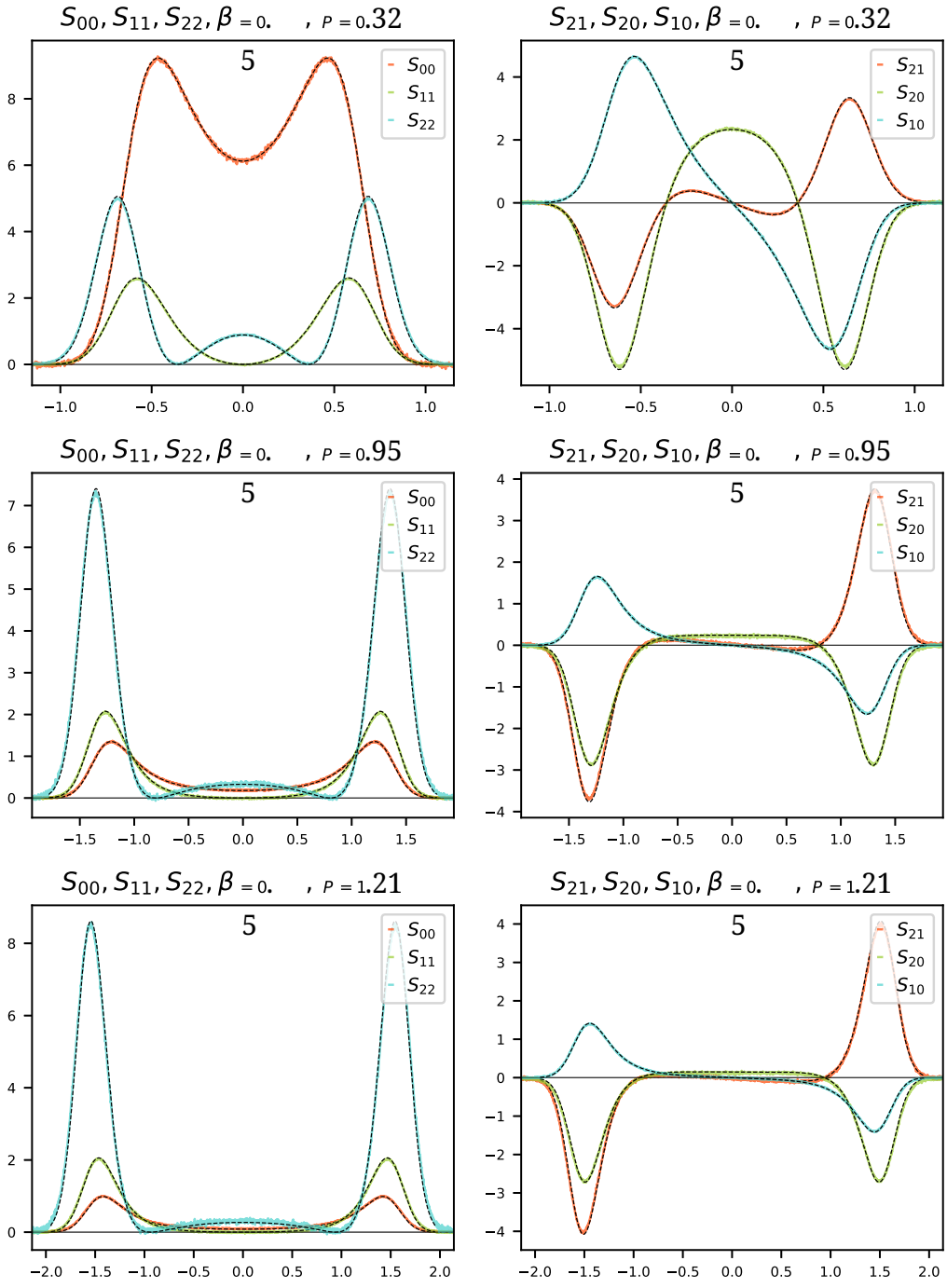


图1：Toda关联函数：广义流体动力学预测 $y \mapsto S^{\mathrm{LL}}_{m,n}(y,1)$ 与分子动力学数值模拟 $y \mapsto tS_{m,n}(yt, t)$ 的对比， $t = 600$ for $\beta = 0.5$ 的结果分别对应低压（上）、中压（中）和高压（下）。数值模拟的颜色与图例一致，相应的广义流体动力学预测以虚线表示。试验次数：3×10^6。

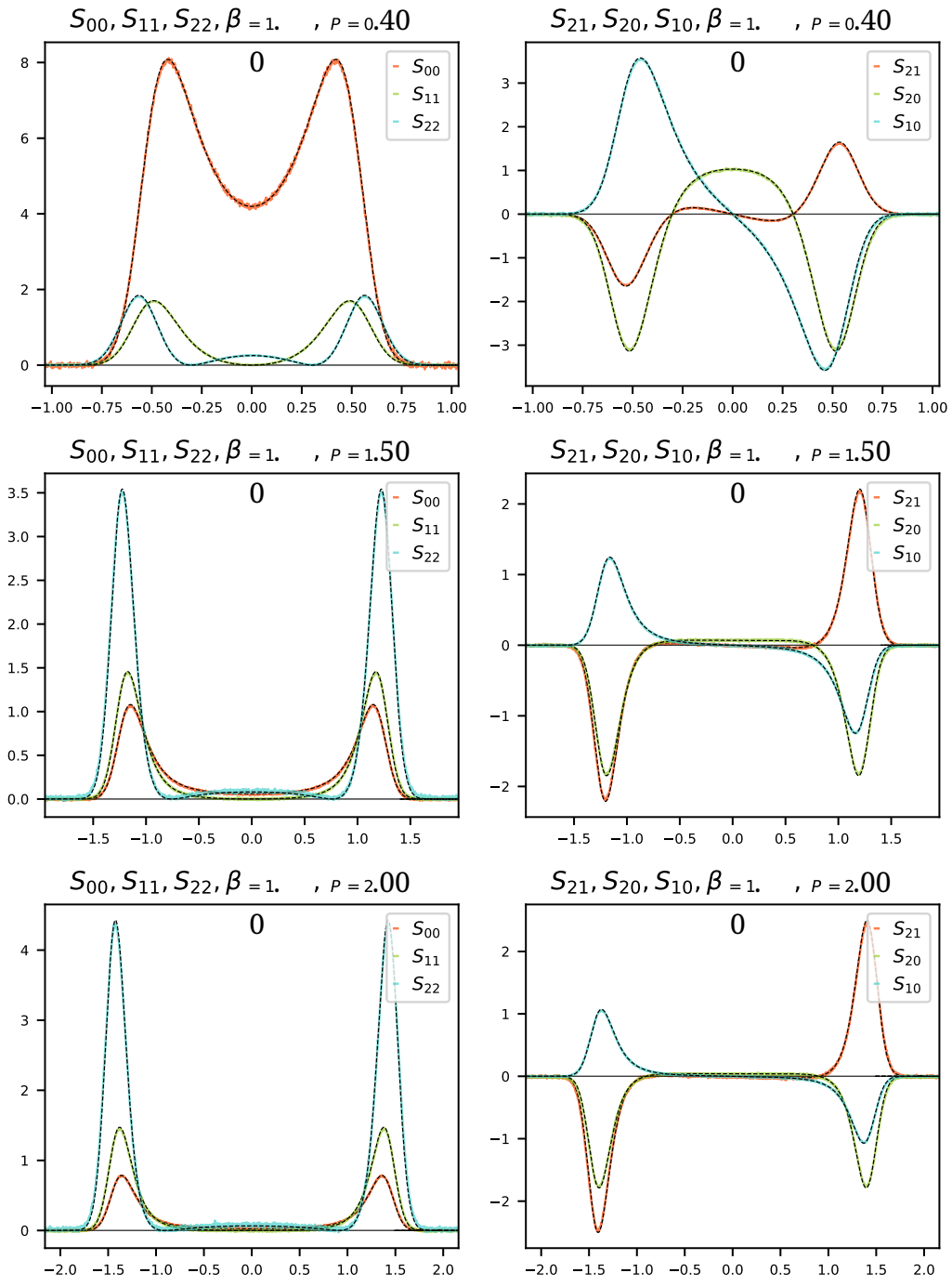


图2：Toda关联函数：广义流体动力学预测值 $y \mapsto S^{\mathrm{LL}}_{m,\,n}(y,\ 1)$ 与分子动力学数值模拟结果 $y \mapsto tS_{m,\,n}(yt,\ t)$ 在 $t = 600$ 处针对 $\beta = 1.0$ 的结果，其中低压力（上）、中压力（中）和高压力（下）。数值模拟结果按图例着色，相应的广义流体动力学预测值以虚线表示。试验次数：3×10^6。

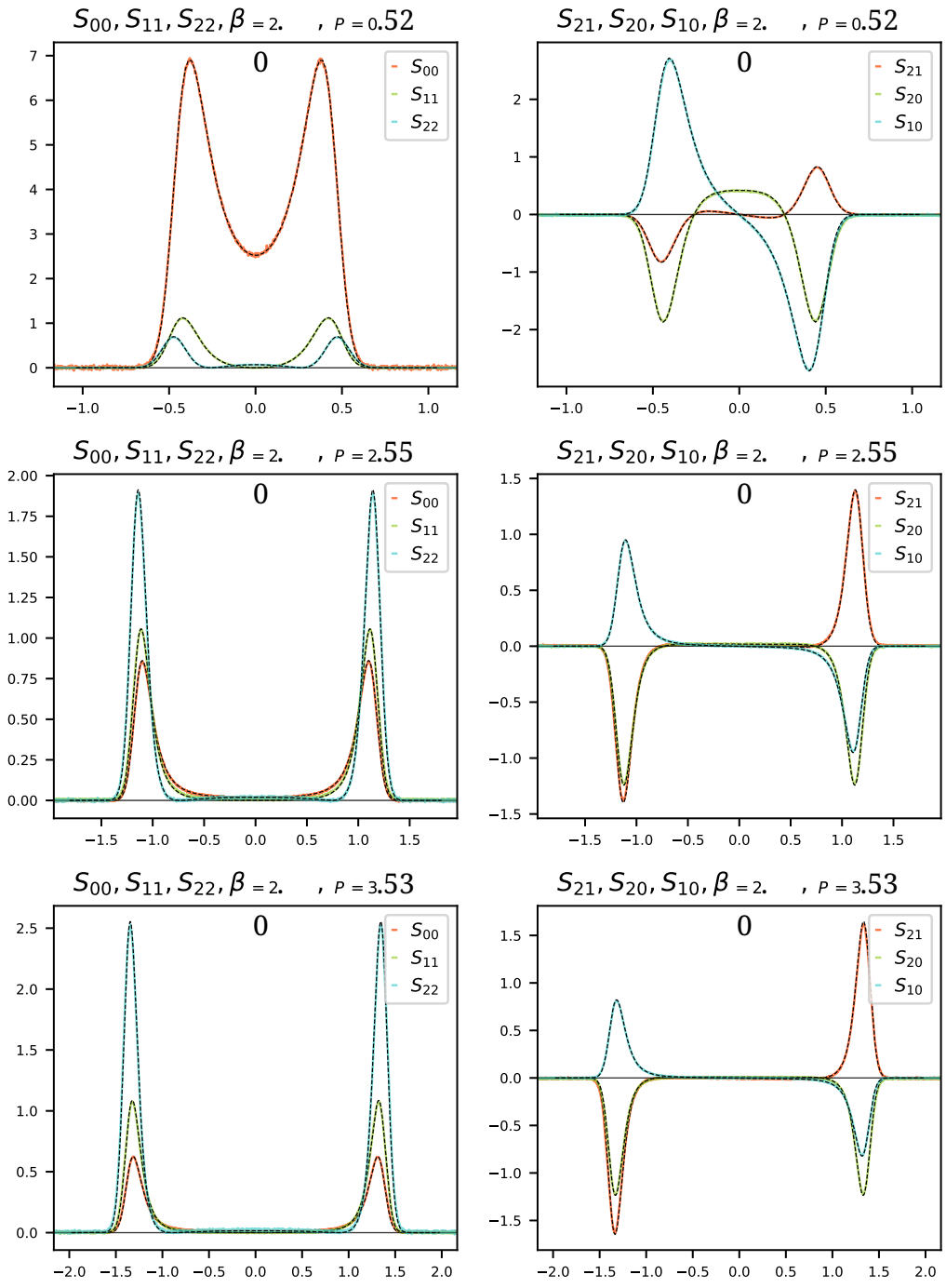


图 3：Toda关联函数：广义流体动力学预测 $y \mapsto S^{\mathrm{LL}}_{m,n}(y,1)$ 与分子动力学数值模拟 $y \mapsto tS_{m,n}(yt, t)$ 在 $t = 600$ for $\beta = 2.0$ 下的对比，其中低压（上）、中压（中）和高压（下）。数值模拟的颜色按图例标示，相应的广义流体动力学预测用虚线表示。试验次数：3×10^6。

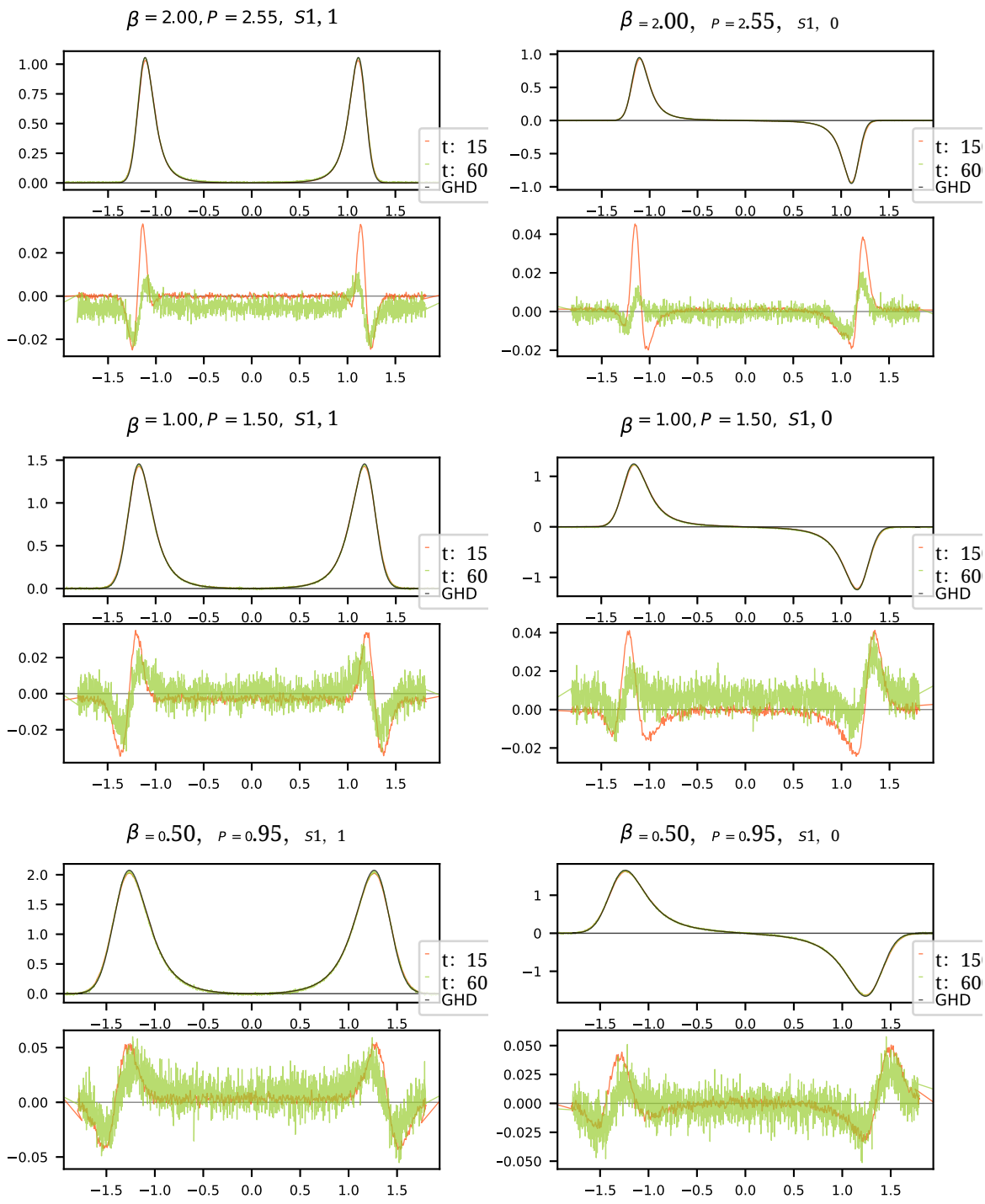


图4：中压及温度逐渐升高（从上到下）时的 Toda 关联函数 $S_{1,\,1}$（左）和 $S_{1,\,0}$（右）。对于每个 β 和 P 值，上方各图展示广义流体动力学的预测与数值模拟的对比，如图1-3所示，但分子动力学是在两个时刻 $t = 150$ 和 $t = 600$ 进行评估的。下方各图展示时刻 $t = 150$（红色）和时刻 $t = 600$（绿色）下，广义流体动力学预测与数值模拟之间的差异。试验次数：3×10^6。

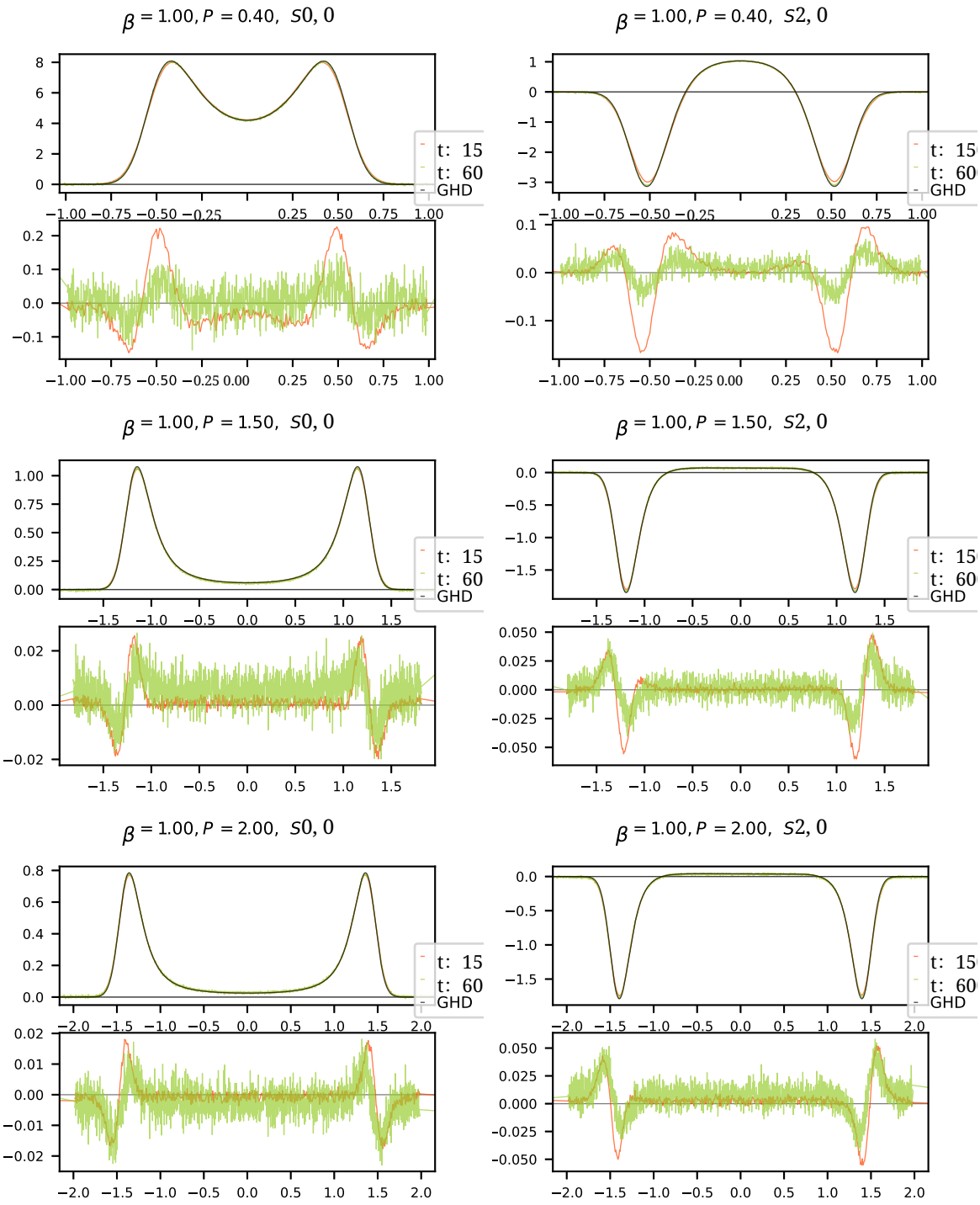


图5：Toda关联函数 $S_{0,0}$ （左）和 $S_{2,0}$ （右），对应 $\beta = 1$ 及逐渐增大的压力（从上到下）。对于每个 β 和 P 的取值，上方各图展示了广义流体动力学预测与数值模拟的对比，如图2所示，但分子动力学是在两个时刻 $t = 150$ 和$t = 600$进行评估的。下方各图展示了时刻 $t = 150$ （红色）和 $t = 600$ （绿色）广义流体动力学预测与数值模拟之间的差值。试验次数： 3×10^6。

图1-3。另一方面，我们通过展示分子动力学中的时间演化，说明这些差异如何随时间变化。请注意，在我们选定的标度$y \mapsto tS_{m,n}(yt,t)$下，广义流体动力学的预测不随时间变化，见（32）。

在图1-3展示的54组比较中，我们选取了12个具有代表性的案例，它们涵盖了我们观察到的所有现象。图4展示了三种 β取值下中压条件下的关联函数$S_{1,1}$ 和 $S_{1,0}$ （参见表1）。底部面板中显示的小尺度波动源于用经验平均值近似期望值。增加试验次数可以减小这些波动的幅度。请注意， $t = 150$ 和 $t = 600$ 之间波动幅度的差异主要是由我们采用的标度$y \mapsto tS_{m,n}(yt,t)$造成的。这意味着，在较晚时刻，关联函数的数值会乘上一个大4倍的因子。图5中的图也有同样的情况，其中展示了固定 $\beta = 1$ 下的关联函数$S_{0,0}$ 和 $S_{2,0}$ ，并比较了我们对压力的三种不同选择。现将主要发现总结如下：

1. 偏差主要出现在声峰附近，在时间 $t = 600$ 时，偏差幅度为峰值最大值的 1.5%-3.5%。

2. 在所有情况下，声峰的形状似乎都存在较小但系统性的偏差。要确定是否确实存在这种系统性偏差，需要开展分辨率更高的实验，也就是增加格点数，从而延长观测时间并增加试验次数。以我们实验现有的分辨率，无法判断峰形是否存在系统性偏差。

3. 在部分实验中，如果将一个仅取决于 β、 P、 m、 n 数值的常数加到 $S_{m,n}(j,t)$ 的所有数值上，最大偏差会显著减小；例如，参见图5中的关联函数 $S_{0,0}$ 和 $S_{2,0}$ ，其中 $\beta = 1$、 $P = 0.4$ 。这似乎与均值 $\langle r\rangle$、 $\langle p\rangle$ 和 $\langle e\rangle$ 的近似误差有关；在动量 p 的情况下，这些误差似乎不那么明显。我们观察到，随着试验次数增加，这些偏差会减小，因此我们不认为广义流体动力学与分子动力学在这方面存在系统性偏差。

4. 对于 $(\beta;\ P) \in \{(0.5;\ 0.95),\ (0.5;\ 1.21)\}$ ，我们观察到在时间 $t = 150$ 和 $t = 600$ 时，偏差的大小基本相同；而对于 $(\beta;\ P) \in \{(0.5;\ 0.32),\ (1;\ 0.4),\ (2;\ 0.52),\ (2;\ 2.55),\ (2;\ 3.53)\}$ ，较短时间下的偏差则显著更大。其余两种情况 $(\beta;\ P) \in \{(1;\ 1.5),\ (1;\ 2)\}$ 介于两者之间，具体情况还取决于所考察的关联函数，见图5。这表明，$tS_{m,n}(yt,t)$ 向广义流体动力学预测 $S_m^{\mathrm{LL}},_n(y,1)$ 收敛的速度，随 $t \to \infty$ 而变，并取决于 β 和 P 的取值。总的来说，我们观察到，提高温度或压力都会加快收敛速度。

5 结论与展望

如表1所示，我们选取了中间压力，使得 $\nu \simeq 0$。在粒子图像中， $\nu = 0$ 对应于边界条件 $q_1 = q_N$。在热平衡状态下，粒子的位置随后进行无偏随机游走，其典型偏移量约为 $\sqrt{N}$。因此，自由体积约为 $1/\sqrt{N}$。粒子极其密集，连续成对碰撞的图像完全不再适用。因此，人们可能会怀疑，在如此极端的条件下，广义流体动力学是否仍然有效。 $\nu = 0$ 对分子动力学模拟而言没有特别的困难。在广义流体动力学中，因子 $1/\nu$

出现在 v^{eff} 的表达式中，见式（31）。这使数值方案运行缓慢，只有接近 $\nu = 0$ 的取值才可计算。然而，关联函数 S 穿过 $\nu = 0$ 时变化平滑。广义流体动力学也适用于这个看似奇异的点。

与此同时，A. Kundu [21] 发布了一则颇令人费解的说明。他考虑了参数值 $\beta = 1$, $P = 1$。在低阶截断矩阵$C_{m,\,n}$ 和 $A_{m,\,n}$ 后，得到的$S_{m,\,n}$ 由几个以恒定速度移动的 δ-峰组成。经过弹道标度后，它们以极高精度落在广义流体动力学给出的曲线上。似乎缺少相应的理论解释。

在 [22] 中，对 Toda 晶格关联函数进行分子动力学模拟，其势为

$$V_{\mathrm{kd}}(x) = \frac{g}{\gamma}\mathrm{e}^{-\gamma x}$$

具有任意的 γ， $g > 0$。为将其参数与我们的参数区分开来，这里将 [22] 中的变量¯ ¯ ¯记为 $\bar{t}$， $\bar{r}$， P， β。 P为物理压力；比较吉布斯权重后，可得关系式

$$\beta = \frac{g}{\gamma}\bar{\beta}, \qquad P = \frac{1}{\gamma}\bar{P}\bar{\beta}.$$

由运动方程可推得

$$\bar{t} = \frac{1}{\sqrt{\gamma g}}t, \quad r(t) = \gamma\bar{r}(\bar{t}), \quad p(t) = \frac{g}{\gamma}\bar{p}(\bar{t}).$$

因此，换算为我们的单位后， [22] 中报告的分子动力学模拟为：(i) $P = 0.01$, $\beta = 0.01$,$N = 1024$, $t = 400$, (ii) $P = 1$, $\beta = 1$, $N = 1024$, $t = 200$, 300，以及 (iii) $P = 400$, $\beta = 400$,$N = 256$, $t = 80$。事实上，三种情况下的时间尺度都相同，即 $t = t$。由于当时广义流体动力学尚未问世，因此无法进行比较。

情形 (i) 是一条极为稀薄的链。在此极限下， $\nu\rho_{\mathsf{p}}$ 是单位高斯分布。着装函数变为多项式： $\varsigma_0^{\mathrm{dr}}(w) = a_0$、 $\varsigma_1^{\mathrm{dr}}(w) = a_1 w$，以及 $\varsigma_2^{\mathrm{dr}}(w) = a_2 w^2 + a_3$ ，其系数a_0、……、a_3 取决于 (P, β)。注意，对于非相互作用流体， a_3 会消失。因此S_0,0 呈高斯分布，S_1,1 有两个峰，而S_2,2 有两个或三个峰。这与 [22] 非常吻合，也解释了我们为何不打算涉足低密度区域。情形 (ii) 介于我们的 $\beta = 1$, $P = 0.40$ 与 $\beta = 1, P = 1.5$之间。注意，此时S_0,0 在 $w = 0$处有一个局部极小值，这与稀薄区域中的结构截然不同。另一方面，S_2,2 在 $w = 0$处有一个局部极大值，低密度/高温情形也是如此。

最有意思的参数取值是 (iii)，值得进一步深入研究。问题在于 Toda链在极低温下的行为。单纯令 $\beta \to \infty$ 会冻结¯ ¯任何运动。但在固定物理压力 P 下同时取极限 $\beta \to \infty$ 和 $P = P\beta$ 是有意义的，至少在统计意义上如此。在此极限下， $\nu > 0$ 总是成立。此外，态密度收敛于反正弦分布，

$$\lim_{\beta\to\infty} \nu\rho_{\mathsf{p}}(w) = \frac{1}{\pi\sqrt{4\bar{P} - w^2}}, \quad |w| \le 2\sqrt{\bar{P}}.$$

To 为了理解动力学行为，将有效势展开为

$$\mathrm{e}^{-r} + \bar{P}r \simeq \tfrac{1}{2}\bar{P}(r - r_0)^2 + c_0$$

在其最小值处 r_0。由于 β 很大，初始涨落的量级为 $1/\sqrt{\beta}$。因此，动力学可以用具有 $\omega^2 = \bar{P}$的谐振链来近似。平衡时间关联

谐振链的关联函数呈现复杂的振荡行为 [14], , 在 β 趋于无穷的极限下，这种行为应与 Toda 晶格相吻合，案例 (iii) 已部分证实了这一点。显然，广义流体动力学无法重现这些精细特征。不过，在合适的尺度上取平均后，或许能观察到谐振链振荡的整体行为。

致谢

本研究得到美国国家科学基金会第1440140号资助。2021年秋季学期，五位作者在加利福尼亚州伯克利的数学科学研究所驻留期间开展了本研究。

作者谨向剑桥的艾萨克·牛顿数学科学研究所致谢，感谢其在“色散流体力学：数学、模拟与实验及其在非线性波中的应用”项目期间提供的支持与款待；本文的部分工作是在该项目期间完成的。本研究得到英国工程与自然科学研究委员会资助，项目编号为EP/R014604/1。TG感谢欧盟H2020玛丽·斯克沃多夫斯卡-居里资助（编号778010*IPaDEGAN*）、INdAM/GNFM，以及意大利国家核物理研究所第4组——理论物理的研究项目“非线性物理中的数学方法”（MMNLP）的支持。GM由KAM资助（编号2018.0344）提供经费。KTRM获得英国皇家学会的沃尔夫森访问研究奖学金资助。

参考文献

[1] R. Allez, J. P. Bouchaud, and A. Guionnet, 不变 β 系综与高斯-*Wigner*交叉，*Phys. Rev. Lett., 109 (2012), pp. 1–5.*[2] A. Bastianello, B. Doyon, G. Watts, and T. Yoshimura, 经典可积场论的广义流体动力学：双曲正弦-戈登模型，*SciPost Physics, 4 (2018).*[3] B. Bertini, M. Collura, J. De Nardis, and M. Fagotti, 非平衡 *XXZ*链中的输运：守恒荷与流的精确剖面，*Phys. Rev. Lett., 117 (2016), p. 207201.*
[4] V. B. Bulchandani, X. Cao, and J. E. Moore, 量子与经典 *Toda* 晶格的动力学理论，*Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 52 (2019), p. 33LT01.*
[5] V. B. Bulchandani, R. Vasseur, C. Karrasch, and J. E. Moore, 量子可积系统的可解流体动力学，*Physical Review Letters, 119 (2017).*[6] O. A. Castro-Alvaredo, B. Doyon, and T. Yoshimura, 非平衡量子可积系统中涌现的流体动力学，*Phys. Rev. X, 6 (2016), p. 041065.*[7] A. Das, M. Kulkarni, H. Spohn, and A. Dhar, 可积晶格朗道-利夫希茨自旋链的卡达尔-帕里西-张标度，*Physical Review E, 100 (2019).*[8] B. Doyon, 非平衡可积系统中的精确大尺度关联，*SciPost Physics, 5 (2018).*[9] B. Doyon, 经典*Toda*系统的广义流体动力学，*Journal of Mathematical Physics, 60 (2019), p. 073302*。

[10] M. Dupont and J. E. Moore, 无限温度一维量子磁体中的普适自旋动力学, *Physical Review B, 101 (2020).*[11] H. Flaschka, *Toda* 晶格。*I.* 积分的存在性，*Phys. Rev. B (3), 9 (1974), pp. 1924–1925.*[12] P. J. Forrester and G. Mazzuca, 具有 β 正比于 $1/N$ 的经典 β系综：从环方程到 *Dyson* 无序链，*J. Math. Phys., 62 (2021), pp. Paper No. 073505, 22.*[13] D. Forster, 流体动力学涨落、对称性破缺与关联函数，*1975*年.
[14] T. Grava, T. Kriecherbauer, G. Mazzuca, and K. D. T.-R. McLaughlin, 短程振子链的关联函数，*J. Stat. Phys., 183 (2021), pp. Paper No. 1, 31.*[15] T. Grava, A. Maspero, G. Mazzuca, and A. Ponno, 热力学极限下 *FPUT* 链和 *Toda*链的绝热不变量，*Comm. Math. Phys., 380 (2020), pp. 811–851.*[16] A. Guionnet and R. Memin, 经典 *Toda* 链吉布斯系综的大偏差，*Electronic Journal of Probability, 27 (2022), pp. 1 – 29.*[17] E. Hairer, G. Wanner, and C. Lubich, 哈密顿系统的辛积分，*Springer Berlin Heidelberg*, 柏林, 海德堡, *2006, pp. 179–236.*[18] C. R. Harris, K. J. Millman, S. J. van der Walt, R. Gommers, P. Virtanen,D. Cournapeau, E. Wieser, J. Taylor, S. Berg, N. J. Smith, R. Kern, M. Picus,S. Hoyer, M. H. van Kerkwijk, M. Brett, A. Haldane, J. F. del Río, M. Wiebe,P. Peterson, P. Gérard-Marchant, K. Sheppard, T. Reddy, W. Weckesser,H. Abbasi, C. Gohlke, and T. E. Oliphant, 使用 *NumPy* 进行数组编程，*Nature, 585 (2020), pp. 357–362.*
[19] J. D. Hunter, *Matplotlib*：一个二维图形环境，*Computing in Science & Engineering, 9 (2007), pp. 90–95.*[20] E. Ilievski, J. D. Nardis, M. Medenjak, and T. Prosen, 一维量子格点模型中的超扩散，*Physical Review Letters, 121 (2018).*[21] A. Kundu, *Toda*链的可积流体动力学：小系统的情形，*2022*年.[22] A. Kundu and A. Dhar, *Toda* 链及其他可积模型中的平衡态动力学关联，*Phys. Rev. E, 94 (2016), pp. 062130, 13.*[23] S. K. Lam, A. Pitrou, and S. Seibert, *Numba*：一个基于 *LLVM* 的 *Python* 即时编译器，载于《第二届高性能计算 *LLVM* 编译器基础设施研讨会论文集》，*LLVM '15*，纽约，*NY*，美国，*2015*，计算机协会.[24] L. Landau and E. Lifshitz, 流体力学：第*6*卷，第*v. 6*册，*Elsevier Science*，*2013.*[25] M. Ljubotina, M. Ž nidarič, and T. Prosen, 量子海森堡磁体中的 *Kardar-Parisi-Zhang* 物理，*Physical Review Letters, 122 (2019)*。

[26] S. V. Manakov，离散动力系统的完全可积性与随机化，*Z. ˇEksper. Teoret. Fiz.*，*67*（*1974*），第*543–555*页。[27] G. Mazzuca，与β系综相关的某些矩阵的平均态密度及其在*Toda* 晶格中的应用，*J. Math. Phys.*，*63*（*2022*年），论文编号*043501*，共*13*页。
[28] G. Mazzuca，*Toda*关联函数，*2022*年。见 https://github.com/gmazzuca/TodaCorrelation。[29] G. Mazzuca and T. Grava，*Ablowitz-Ladik*格的广义吉布斯系综、圆周 β系综与双合流*Heun*方程。[30] G. Mazzuca and R. Memin，*Ablowitz-Ladik*格的大偏差与*Schur*流，*2022*年。[31] C. B. Mendl and H. Spohn，一维硬点系统的平衡态时间关联函数，*Phys. Rev. E*，*90*（*2014*），第*012147*页。
[32] C. B. Mendl and H. Spohn，一维离散非线性薛定谔方程的低温动力学，《统计力学杂志：理论与实验》，*2015*（*2015*），第*P08028*页。[33] C. B. Mendl and H. Spohn，经典*Toda* 晶格的高低压畴壁，《*SciPost* 物理》*Core*，*5*（*2022*），第*002*页。[34] F. S. Møller G. Perfetto B. Doyon and J. Schmiedmayer，流体运动下可积系统的欧拉尺度动力学关联，《*SciPost* 物理》*Core*，*3*（*2020*）。[35] M. Opper，*Toda*链经典*Bethe*拟设方程的解析解，*Phys. Lett. A*，*112*（*1985*），第*201–203*页。[36] T. Schneider，晶格动力学模型系统的经典统计力学：转移积分与分子动力学研究，（*1983*），第*212–241*页。
[37] T. Schneider and E. Stoll，*Toda* 晶格的激发谱：一项分子动力学研究，*Phys. Rev. Lett.*，*45*（*1980*），第*997–1002*页。[38] H. Spohn，非谐链的非线性涨落流体力学，*J. Stat. Phys.*，*154*（*2014*），第*1191–1227*页。[39] ，*Kardar-Parisi-Zhang*方程：统计物理学视角，载于《随机过程与随机矩阵：*2015*年*7*月莱苏什暑期学校讲义》，*G. Schehr*、*A. Altland*、*Y. V. Fyodorov*、*N. O'Connell*和*L. F. Cugliandolo*编，第*104*卷，牛津大学出版社，*2017*年，第*177–227*页。[40] ，经典 *Toda* 晶格的弹道时空关联函数，*J. Phys. A*，*53*（*2020*），论文编号*265004*，共*17*页。[41] ，经典 *Toda* 晶格的碰撞率假设，*Phys. Rev. E*，*101*（*2020*），论文编号*060103(R)*，共*4*页。

[42] ——, 经典 *Toda* 链的广义吉布斯系综，J. Stat. Phys.，180（2020），第4–22页。
[43] M. Toda，具有非线性相互作用的链的振动，《日本物理学会志》，22（1967），第431–436页。[44] ，《非线性晶格理论》，Springer 柏林、海德堡，1989年。
[45] T. Yoshimura and H. Spohn，量子可积系统的碰撞率假设，《SciPost 物理》，9（2020），论文编号040，共14页。