

高次元系のハミルトン ダイナミックス

新上 和正 (ATR 光電波通信研究所)^{††}

多粒子系は、様々な粒子配置を時間的に変えながら運動して行く。この際に生じるダイナミックスを、特に安定な粒子配置に相当する領域 (basin) を振り所にしながら、領域の内部の運動と領域の間の運動に分けて基礎的な性質を議論しよう。

1. 始めに

(保存ハミルトン系の) 高次元系のダイナミックスについて、特に安定領域間の運動に関する基礎的 (rubik-ishige cube を含む) な考え方を議論しよう。¹ この研究の動機は、多粒子系のガラス状態のダイナミックスを理解したいという思いに端を発して、ダイナミックスの全体像を (統計力学の相図で端的に代表されるようにパラメータをいろいろ変えてダイナミックスを分類するというのではなく) そのままの形で理解したいという願いから来ている。その際の具体的な問題意識は §2.E に述べてあり、その節までがこの報告の序論である。

特にここで述べたいのは、ダイナミックスをダイナミックスの形で理解するために運動に '強度' なる考えを導入する点と安定領域間の隣接の仕方の複雑さ、即ち、経路の複雑さを考える点である。経路の複雑さを理解するための Toy Model としてルービック - イシゲ キューブ (rubik-ishige cube) を導入する。以下が各節の項目である。

§2. モデルと幾つかの問題

A. モデル

- B. 写像と運動の分類
- C. 安定領域間の運動
- D. 安定領域内の運動
- E. 幾つかの問題

§3. 運動の強度

- A. トートロジー
- B. 二つの時間スケールと強度
- C. 運動量と位置座標空間での拡散

§4. Type III の運動

- A. 幾つかの性質
- B. 保存系と散逸系での違い
- C. Type I, II との違い: 経路の複雑さ
- D. ハミルトンルービック - イシゲ

キューブ (Hamilton rubik-ishige cube)

§5. 終りに。

高次元系のダイナミックスに関するモデルと記号の約束と幾つかの性質を、又、何を問題にしよ

うとしているのかを説明することから始めよう。高次元系は、自由度の数、サイズ依存性に注視するのが出発点である。²

§2. モデルと幾つかの問題

A. モデル

次の多粒子系のモデルを考よう。³

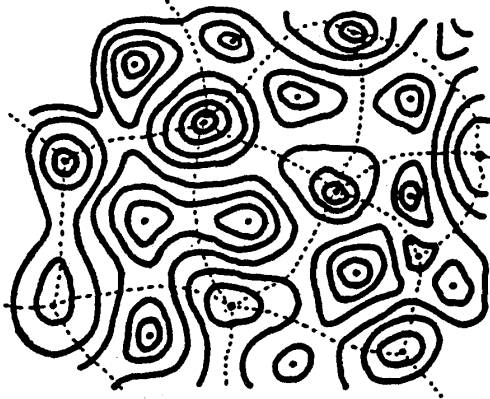
$$H[p_i, q_i] = \sum_i^N p_i^2/2 + (1/2)V[q_i], \quad (2.1)$$

$V[q_i] = \sum_j v(q_{ij})$, (q_{ij} : i と j 番目の粒子の位置座標間の距離). $v(q)$ は粒子間相互作用である。以下考えようとする系の空間の次元数は 3 である。空間の次元性はダイナミックスや力学的性質に大きく影響する。例えば、Lennard-Jones 型⁴ やバネで^{5-7,8} 相互作用する一次元系は、ただ一つの構造的に安定な粒子配置 (局所安定点と呼ぶ) を持ち、且つ、力学的には KAM トーラスが現れ易い系である。他方、空間の次元性が高くなると、沢山の局所安定点が現れ、且つ、KAM トーラスは非常に現れ難くなる。(現れ易いとか難しいとかは、人間にとって意味あるパラメータ領域に現れるかどうかを指す。この性質は、例えば、サイズ依存性、示量性があるかどうかなどと関係する。) p_i, q_i は i 番目の粒子の三次元空間の運動量と位置座標である。 $V[q_i]$ の空間の次元数は $(3N-3)$ (N : 粒子数) である。次元数は、空間の次元数 (3) に粒子数を掛けたものから全粒子に対して一様な変位の自由度 (3) を引くことで与えられる。系の空間のように三の次元数を持つものと $V[q_i]$ のような多数の次元数を持つ空間があらわれ紛らわしいので、以下では区別して系の空間を単に実空間と呼ぶことにしよう。多次元空間のポテンシャル面を平面に無理に描いたのが図 1 である。安定点は $(3N-3)$ 次元位置座標空間のポテンシャル面 $V[q_i]$ の点である。実線が等高線、破線が稜線を表わす。安定点は、周りを破線で囲まれた・で示してある。安定領域 (basin) は・を含み周りを破線で囲まれた領域をいう。

以下で述べる動的性質は、主に三次元実空間の Lennard-Jones 型で相互作用する系で調べられたが、より広いクラスの相互作用 (ポテンシャルの深い所と高い所が系のサイズに比例するような) 系でも成り立つように思える。(この条件については、§5 でまとめておく。) 以下では、 $V[q_i] = V[q_i + n^\alpha L^\alpha]$ (n^α : 任意の整数; $\alpha = x, y, \text{ or } z$) の周期的境界条件を課す。また、(i) $v(q) > -\infty$, (ii) $v(q)$ は大きい q で q^{-d} (d は実空間次元数、こ

ここで $d=3$ より速く減衰するとしよう。この時、 $V[q_i]/N > -\infty$ となり、実空間で偏った粒子分布は排除され大体一様な粒子の配置が安定に現れることになる。また、様々な安定な粒子配位の間でポテンシャルエネルギー値の比較で出来るようになり図1のポテンシャル面が意味を持つようになる。

図1. 多次元空間のポテンシャル面



B. 写像と運動の分類

保存ハミルトン系の代表点 (phase point) の運動は $2(3N-3)$ 次元の位相空間内の軌道を描く。軌道は、運動方程式を解くことによって時間 t に連続な $\{p_i(t), q_i(t)\}$ で得られる。多粒子系がいろいろな粒子配置を変えながら運動するとき、局所安定領域と隣接する安定領域の間の運動に注目するのは自然であろう。(何故ならば、配置を変化させるためには運動して行くためにはいろいろな安定領域を運動して行く必要があるからである。) このような運動を取り出ししかたにいくつかの方法がある。⁹ 一つの方法は一定時間間隔 Δ (Δ に任意性があるが最も運動の違いを取り出すよう選ぶ) で $\{p_i(n\Delta), q_i(n\Delta)\} (n=1, 2, \dots)$ の代表点がどの安定領域 (basin) にいるかで番号を割り振る。安定領域の番号 (1, 2, ...) の付け方は、最初に現われたものを 1 とし次に現われた (1 と違った) 安定領域を 2 とし、次々に番号を増やす。(ポテンシャル面 $V[q_i]$ が沢山の安定領域があること、又、ポテンシャル面はそれらの安定領域領域によってオーバーラップなしに分割されるという事実を使っている。) この方法によって時系列 $\{p_i(t), q_i(t)\} \rightarrow \{n_1, n_2, n_3, \dots\} (n_i: \text{正整数})$, つまり,

$$n_{(i+1)} = \psi_i n_i \tag{2.2a}$$

を定義するシフト写像 $\{\psi_i\}$ を得る。また、 n_i を安定点での相互作用エネルギー値 V_i で置き換えれば同様に

$$V_{(i+1)} = \phi_i V_i \tag{2.2b}$$

のシフト写像 $\{\phi_i\}$ を得る。

C. 安定領域間の運動

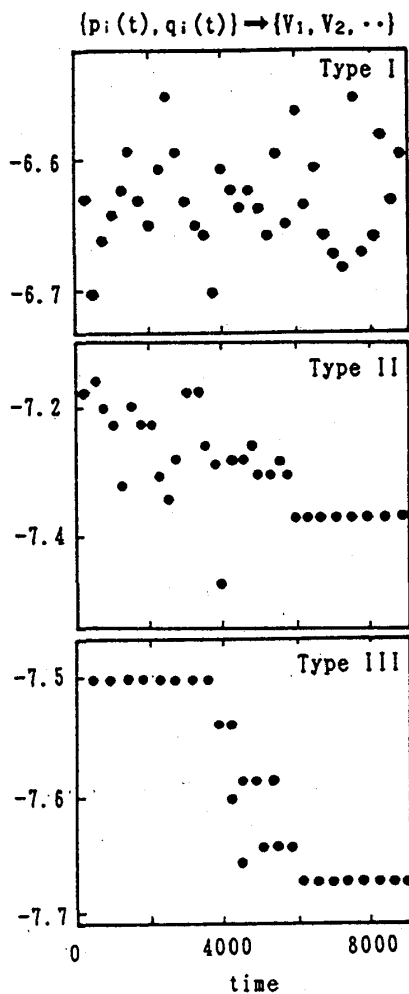
$\{p_i(t), q_i(t)\}$ を実際に計算するとエネルギーの変化に依って運動は次の三つの型に分類される。³ 分類は、運動のテンポラルな振舞いに注目して行なわれているのであって、短時間での力学的な振舞いや長時間に渡る平均量には現われない。(例えば、以下の分類はリアプノフ指数に反映しない。何故なら、分類は安定点の間の運動の時間スケールはリアプノフ数を規定する時間スケールに比べ大きいからである。)

Type I: 高いエネルギーでは代表点は色々な安定領域を通過する。通過する異なる安定領域の数 $s(t)$ は、 $s(t) \simeq Nc(\epsilon_k)t$ となる。ここで、 ϵ_k は粒子の平均運動エネルギーで $c(\epsilon_k) \simeq \exp[-b/\epsilon_k]$ (b は定数) の依存性を持つ。(図2の上段) 図2は (2.2 b) で定義される $V_{(i+1)} = \phi_i V_i$ の運動を示してある。

Type II: 中間のエネルギー領域では、初めのうちは Type I と同様に、通過する安定領域の数は $s(t) \simeq Nc(\epsilon_k)t$ となる。Type I と違う点は、Type I の運動はある時間経過後 (τ^*) で終わり、最後は、数個の安定領域を遷歴する。 τ^* はエネルギー ϵ_k が減少するにつれ短くなる。運動は、相互作用エネルギーを低くする方向に進行する。この運動を非対称運動 (asymmetric dynamics) と呼ぼう。非対称運動とは、隣接する安定領域間の非対称な遷移運動を意味する。つまり、相互作用エネルギーを低くする遷移は起こりやすいが、エネルギーを高くする遷移運動は現れにくいことをさす。(図2の中段)

Type III: 低エネルギー領域では、初期に数個の安定領域に入り、それ以後間欠的 (intermittently) に安定領域を遷移する。Type II と同様に相互作用エネルギーを低くする非対称運動が現れる。Type II との違いは運動の変化に現れる間欠性である。(図2の下段) エネルギーが更に減少すると、安定領域に滞在する時間が増大する。その時間の伸びは、エネルギー減少のどの様な関数になるかは初期値依存性が強く解っていない。

図2. 写像と分類



D. 安定領域内の運動

代表点が一つの安定領域に留まっているときの最大リアプノフ数 λ_a はその安定領域がどのような粒子配置をとっているかに依存する。しかし、かなり規則正しい粒子配置を除けば大体同じになり λ_a は $\lambda_a(\epsilon_k) \propto (\epsilon_k - \epsilon_k^0)$, ($\epsilon_k^0 \approx 0$) となる。ここで、 ϵ_k は大きくなると隣の局所安定領域に容易に行くようになるので、 ϵ_k は長い間一つの安定点に滞在しリアプノフ数が収束する程度の小さな値である。従って、リアプノフ数は隣の局所安定領域に行かない程度の時間スケールでの値である。対応した位相空間の領域では強い軌道不安定性を持つことが結論される。また、初期値を変えた計算を行なうと、何時でも、ほぼ同じ大きさの最大リアプノフ数が得られることと $\epsilon_k^0 \approx 0$ であることは、全エネルギーで位相空間領域で、KAM トーラスが占めている領域は極めて小さいことを意味する。

E. 幾つかの問題

(d1) Type I と Type II, III の違い: Type II, III と Type I との違いは、運動に現われる一方方向性(非対称運動)である。この運動は通常の意味で非可逆的であるにも拘らず”非可逆性”という語を使わなかった。この理由は、隣接する安定領域間の遷移の運動に注目し、相互作用エネルギーを低くする方向に運動が進行することを強調しなかったからである。よく例に出される「最初に箱の右半分寄せられた多粒子が拡散して行き再び元の状態に戻る確率は非常に小さい」という非可逆性は、系がカオスダイナミクスを行なうとき常に現われるからである。²² この非可逆性は、上の全ての運動の Type に共通に見られる。それでは、非対称運動は何故現われるのだろうか。系の短時間の振舞いに、例えば、リアプノフスペクトラムには特にこれらの運動の差異は現われない。Type I と Type II, III の運動の違いはどのような力学的性質の違いから生じるのだろうか。

(d2) Type III の運動: Type III の運動はガラスのダイナミクスに対応している。¹⁰ 安定領域内では KAM トーラスが占めている領域は極めて小さい。このことは、Type III の隣の安定領域への遷移運動は、トーラスの部分的な崩壊で起こるアーノルド (Arnold) 拡散ではない。また、KAM トーラスに長く滞在する誘導現象でもない。既に、十分カオス的である(安定領域内の)運動の間の運動であり高次元系に特有なものに見える。(ガラスのダイナミクスがアーノルド拡散であるという研究者¹¹ もいる。) Type III の運動は Type I, II とどのように違うのであろう。また、Type III は異なる安定領域を間欠的に遷移する運動である。このとき、経路問題が課題となる。つまり、どのような隣接する安定領域を繋ぐ遷移経路を運動するのだろうか。

(d3) 安定領域間の構造と運動: 多粒子系は二次相転移に類似したガラス転移を一般に持つ。^{12,13} これは次の性質と関わりがある。つまり、二つの安定領域間のポテンシャル壁は系のサイズに比例するという加法性の性質を持つか否かである。加法性を持つなら二つの安定領域間は系のサイズが大きくなると disconnect されガラス転移は真の相転移となる。統計力学で記述される相転移は常に系のサイズに比例する量、つまり、測度を問題にしている。(粒子ガラスや特に短距離相互作用を持つスピンガラスのガラス転移が本当に相転移かどうか、また、ガラス状態では多数の‘相’が存在するかどうかの論争がある。¹⁴)

一方、もし仮に加法性を持たないならば真

の相転移でなくなる。この時、加法性を持たない系が疑似相転移を起こす機構はどのようなものであろう。非加法性を持たないにも拘らず二次的相転移に類似したガラス転移が現れるという矛盾を前述の経路問題に於ける経路の複雑さ (path complexity, 或いは, connectivity complexity) が解消してくれるのではないだろうか。統計力学で、系の自由度の粗視化をどうして相と相の経路は驚くほど単純化されたのに対し、ガラスは系の自由度が粗視化されずむきだしのまま残ってしまうと考えたいのである。(これは期待である。)

これらの問題を、ダイナミックスを統計力学でよくやるように相図を書いて終りにするのではなく、ダイナミックスはそれ自身どのようなダイナミックスの違いを作り出してダイナミックスを変えるのかということから考えたい。

§3. 運動の強度

運動に‘強度’というものを導入して、Type II, III の非対称運動が何故現れるのかを考えよう。

A. トートロジー

保存ハミルトン系を扱っているにも関わらず、非対称運動は何故現われるのであろうか。この問いに対して以下の(一見もっともらしい)答えがある。

「相互作用エネルギーの低い状態で、粒子は規則正しい配列の粒子位置を取る。又、エネルギーの高い状態では色々な粒子配置を取ることが出来るので規則正しい粒子状態を取る様にダイナミックスが進行して行く理由はないように見える。しかし、運動の滞在時間を決めるのは運動量空間 Ω_p と位置座標空間 Ω_q の積で与えられる位相空間 Ω の体積で与えられる。運動量空間の体積 Ω_p は、粒子当りの平均運動量を ϵ_k で表わせば、 $\Omega_p \simeq \exp[\gamma \epsilon_k N]$ (γ はモデルや相互作用に依存するが定数) となる。($\Omega_p \simeq \exp[\gamma \epsilon_k N]$ と書けるのは自明ではなく、各粒子の間で運動エネルギーのやり取りが活発に起こる必要がある。これは、運動量空間での mixing の性質と関係している。エネルギーの高い状態と低い状態でエネルギー差は、粒子数 N に比例する。Type II, III では相互作用エネルギーを低くする方向に運動が進行している。Type II, III で運動の初期はエネルギーの高い状態であり終状態では低い状態である。ハミルトン系であるので、これは運動エネルギーが増大する過程である。つまり、運動の進む過程で $\epsilon_k \rightarrow \epsilon_k + \Delta$ (Δ はエネルギーの高い状態と低い状態での粒子当りの相互作用エネルギー差で、 $O(1)$ のオーダーを持つ) となる。つま

り、初期と終状態で運動量空間の体積比は $\Omega_p(\text{終状態})/\Omega_p(\text{初期状態}) \simeq \exp[\gamma \Delta]$ となる。つまり初期状態での位相空間の体積が終状態の位相空間の体積に比べ小さくなり、終状態への運動に方向性が現われるだろう。」

しかし、このような議論はナンセンスである。Type II, III のエネルギーの低い状態に移行すると認めた上で位相空間の体積を考えているからである。

B. 二つの時間スケールと運動の強度

それではどのように考えたら良いだろう。手がかりを得るため、次の二つの典型的な例、つまり、代表点の一つの安定領域に長時間滞在する場合と一つの安定領域を非常に短時間で通過する場合を考えてみよう。先ず、前者の場合は、各粒子は色々な運動量を取りながら系は色々な状態を巡るであろう。この時、経巡る運動量 $\{p_i\}$ の位相空間の体積は上で与えたように $\Omega_p \simeq \exp[\gamma \epsilon_k N]$ で与えるだろう。これは、一つの安定領域内で色々な状態を経て運動量の位相空間の体積がダイナミックスと直接関連してくるような例である。後者の例では、短時間で各粒子の運動量は殆んど変わりがなく一つの安定領域を通過する。この時、代表点は色々な状態を巡らないうちに、換言すれば、 $\Omega_p \simeq \exp[\gamma \epsilon_k N]$ の運動量の位相空間の体積をサンプリングしないうちに他の安定領域に移動する。この二つの例は、運動に依存して経巡る運動量に関する位相空間の体積がはっきり異なることを教えてくれる。そして、二つの時間スケールの存在することを教えてくれる。つまり、代表点が運動量の位相空間の体積をサンプリングする(運動量 $\{p_i\}$ の運動と関係する)時間スケールと一つの安定領域を通過する(これは位置座標空間 $\{q_i\}$ の運動と関係する)時間スケールである。(運動量と位置座標空間の運動の時間スケールで単純に考えてしまっても良いのかという疑問が湧くかもしれない。しかし、我々は安定領域間の運動に注目していることと上記の二つの極限の思考例からこのように考えるのは自然である様に思える。)

ここで運動の強度を導入しよう。強度は、運動量の位相空間の体積をサンプリングする運動量空間の運動と代表点の一つの安定領域を通過する位置座標空間での運動のどちらが強いかを与えるものである。運動の強度 ($\sigma(\epsilon_k)$ で表す) は

$$\sigma(\epsilon_k) = \tau_q / \tau_p, \quad (3.1)$$

で定量化される。ここで、 τ_q と τ_p は上記の二つの時間スケールである。添字 q と p は各々位置座標空間と運動量空間に関連することを表す。 $\sigma(\epsilon_k)$ は示強性でなければならぬに注意しよう。何故なら、理解しようとする非対称運動の現れは系のサイズ($N \gg 1$ の条件で)に依存しないからである。運動の強度 $\sigma(\epsilon_k)$ は次の簡単な意味を持つ： $\sigma(\epsilon_k) < 1$ なら、運動量空間で色々な状態をサンプリングすることによりマルコフ化が現れ運動量空間の体積の大小が運動に反映する。平たく言えば、運動量が単に‘熱’の役割を演じる場合に相当する。他方、 $\sigma(\epsilon_k) > 1$ では、その逆で、位置座標空間での色々な安定領域をサンプリングする運動である。 $\sigma(\epsilon_k) = 1$ が二つの空間での運動がバランスする転移点である。 $\sigma(\epsilon_k) > 1$ が Type I に $\sigma(\epsilon_k) < 1$ が Type II, III に相当し、 $\sigma(\epsilon_k) = 1$ の転移点が Type I と Type II, III の運動の境界点であるというのが以下の主張である。主張の正否は、 $\sigma(\epsilon_k) = 1$ が ϵ_k について一価関数であり、唯一つ転移点を持つのか、また、解いた値が実験で測定された結果や計算機シミュレーションで得られた結果と一致するかどうかから判定される。(正確には、方程式 $\sigma(\epsilon_k) = 1$ が ϵ_k について一価関数でなければならぬという一般的な理由はない。多価である場合には、Type I と Type II, III の運動を複数繰り返して現れることになる。単に、これまでのシミュレーションでは現れなかっただけである。)

C 相対拡散と絶対拡散

二つの時間スケール τ_q と τ_p を問題にしよう。準備のため、代表点の運動量空間と位置座標空間での拡散運動を調べよう。絶対拡散 $a(t)$ と相対拡散 $r(t)$ は各々、

$$a_{p,q}(t) = \sqrt{a_p(t)^2 + a_q(t)^2}, \quad (3.2a)$$

$$r_{p,p';q,q'}(t) = \sqrt{r_{p,p'}(t)^2 + r_{q,q'}(t)^2} \quad (3.2b)$$

で定義される。但し、 $a_p(t)^2 = (1/3N) \sum_i |p_i(t) - p_i(0)|^2$, $a_q(t)^2 = (1/3N) \sum_i |q_i(t) - q_i(0)|^2$, $r_{p,p'}(t)^2 = (1/3N) \sum_i |p_i(t) - p'_i(t)|^2$, $r_{q,q'}(t)^2 = (1/3N) \sum_i |q_i(t) - q'_i(t)|^2$ である。 $p'_i(t)$, $q'_i(t)$ は $p_i(t)$, $q_i(t)$ と時間 $t=0$ で僅かに違う初期値から出発した運動量と位置座標である。定義から判るように、絶対拡散は代表点の一つの軌道上での移動する距離を、相対拡散は二つの軌道が分離する距離を与える。相対拡散と絶対拡散に対して次の三角不等式が厳密に成立する。

$$r_{q,q'}(t) \leq a_q(t) + a_{q'}(t) + r_{q,q'}(0), \quad (3.3a)$$

$$r_{p,p'}(t) \leq a_p(t) + a_{p'}(t) + r_{p,p'}(0), \quad (3.3b)$$

一緒にして、

$$r_{p,p';q,q'}(t) \leq a_{p,q}(t) + a_{p',q'}(t) + r_{p,p';q,q'}(0). \quad (3.3c)$$

拡散は次の二つの性質を持つ：

(p1) 位置座標に関する絶対拡散は、普通、 $a_q(t)^2 \simeq (1/6N) D(\epsilon_k) t$ ($D(\epsilon_k)$: 拡散係数) の時間依存を持つノーマル拡散である。この性質は q に依らない。又、

(p2) Olsedec の定理より、相対拡散は短い時間間隔 t (極端に短い時間を除く) で指数関数で増大する。つまり、 $r_{p,p';q,q'}(t)$, $r_{p,p'}(t)$, $r_{q,q'}(t)$ は $\exp[\lambda_a t]$ (λ_a : 最大のリアプノフ数) の時間依存性を持つ。(全ての Type で運動はカオス的であったことを思い出そう。)

不等式 (3.2a) と (p1)(p2) の性質は相対拡散が、二つの異なる時間依存性を持つ時間領域があること、即ち、

$$0 < t < \tau_c \text{ の時間領域で } r_{q,q'}(t) \propto \exp[\lambda_a t], \quad (3.4a)$$

$$\tau_c < t \text{ の時間領域で } r_{q,q'}(t) \propto \sqrt{D(\epsilon_k)t}, \quad (3.4b)$$

となる転移時間 τ_c が存在することを示す。何故なら、不等式 (3.2a) の左辺は短時間領域で指数関数的発散をする。他方、右辺は \sqrt{t} に比例する。ある時間領域以降で左辺の指数関数的発散が止まらなければこの不等式と矛盾するからである。(注 1 を参照。)

この τ_c は何であろうか。運動量空間での相対拡散 $r_{p,p'}(t)$ に注目しよう。位置座標空間で相対拡散との時間的振舞いで著しい違いは、時間領域 $t \gg 1$ で $r_{p,p'}(t)$ 増大は頭打ちになることである。これは、運動エネルギーは正の値であること、全エネルギーが一定の保存系であること、ポテンシャル $V[q_i]/N$ はローアバウンドであることから結論される。(§2.A を参照。) $r_{p,p'}(t)$ が頭打ちになる時間 t_c が上記の τ_c に等しいと考えることが出来る(以下の議論を参照)。 $r_{p,p'}(t)$ も短時間領域で $r_{p,p'}(0) \exp[\lambda_a t]$ のように指数関数的発散する。 $r_{p,p'}(t)$ が頭打ちになるの時間 t_c で $r_{p,p'}(t) \simeq \sqrt{2\epsilon_k}$ となるので

$$\tau_c, t_c \simeq (1/2\lambda_a) \ln(2\epsilon_k/r_{p,p'}(0)^2)$$

を得る。

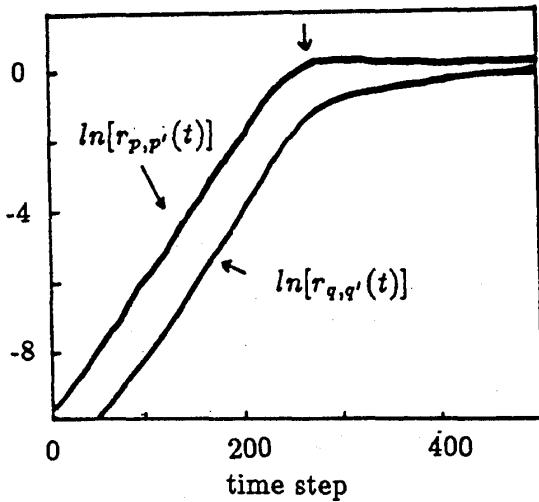


図3. 位置座標と運動量空間の相対拡散

t_c が上記の τ_c に等しいと考えられるのは以下の議論による。二つの運動量の組 $\{p_i(t)\}$ と ($t=0$ で $\{p_i(0)\}$ と僅かに違う) $\{p'_i(t)\}$ を考えよう。短時間のうちでは、 $\{p_i(t)\}$ と $\{p'_i(t)\}$ の差は小さく強い相関を持った運動をする。差は時間と共に大きくなりその差が開いて頭打ちになってくると $\{p_i(t)\}$ と $\{p'_i(t)\}$ の相関は消失する。それ以後は $\{p_i(t)\}$ と $\{p'_i(t)\}$ は‘あたかも’独立に振舞う。その効果として、運動量に‘マルコフ性’が導入され $r_{q,q'}(t)^2$ にノーマル拡散が現れるようになる。(この辺りを表現するのは難しい。)このことは、実際に計算機シミュレーションで確かめることが出来る。計算で得られた $r_{q,q'}(t)$ と $r_{p,p'}(t)$ の時間的振舞いが対数の目盛で図3に与えてある。両方とも時間の小さいうちは t に比例して増大する、ある時間(図で $t \approx 280$)で $\ln[r_{p,p'}(t)]$ の増大が止まると同時に $\ln[r_{q,q'}(t)]$ が時間 t に $\ln(t)$ に比例して増大することが判る。(図では、 $\ln[r_{q,q'}(t)]$ が頭打ちになっているのではなく増大し続けているところを見て欲しい。)これは、運動量空間の相対拡散の運動の性質が位置座標の運動に質的变化を与える一例である。

ここまでは、二つの軌道の相対拡散を考えたが初期値の僅かずつ違う軌道のアンサンブル、例えば、 $\{p_i(t), q_i(t)\}$ を中心とする $\{\Delta p_i, \Delta q_i\}$ だけ異なる初期値を持つ集合の相対拡散についても同様に考えることが出来る。(3.3)は色々な q, p, q', p' のアンサンブルに対しても成立する。)この時も、 τ_c は運動量空間の相対拡散のみから決まり、結果は $\tau_c \approx (1/2\bar{\lambda}_a) \ln(2\epsilon_k/\Delta\bar{p}^2)$ となる。ここで $\bar{\lambda}_a = (1/6N) \sum_i \lambda_i$ (>0) で自由度当たりの

正のリアプノフ数の平均(K.S. エントロピー)であり、 $\Delta\bar{p}$ はアンサンブルに対する各粒子の運動量の平均の初期値差である。以上をまとめると、 $0 < t < \tau_c$ で相対拡散は運動空間でも位置座標空間でも指数関数的に増大し、 $\tau_c < t$ では運動空間での相対拡散は頭打ちになる一方で位置座標空間では時間の \sqrt{t} に比例して増大する。

二つの時間スケール τ_q と τ_p を評価しよう。図3での $r_{p,p'}(t)$ と $r_{q,q'}(t)$ の時間的振舞いを考えると、 $\{q_i(t)\}$ に注目する時その運動にマルコフ化が生じる時間スケールが τ_c であることを示している。換言すれば、 τ_c の時間スケールで運動を粗視化(course graining)すれば $\{q_i(t)\}$ の運動はマルコフ過程と見なせることを意味する。このことから、 τ_c を τ_p と等しい量であると考えることが出来るだろう。一方、 τ_q は、代表点が一つの(位置座標に関する)安定領域を通過する時間スケールである。位置座標が拡散する距離は絶対拡散 $a_q(t)^2 = (N/6)D(\epsilon_k)t$ で規定されるので、安定領域の広さを与える長さを l で表せば、 $\tau_q = (6l^2/N)(1/D(\epsilon_k))$ となる。この二つを用いると、運動の強度

$$\begin{aligned} \sigma(\epsilon_k) &= \tau_q/\tau_p, \\ &= (6l^2/N)(1/D(\epsilon_k))2\bar{\lambda}_a(\epsilon_k)/\ln(2\epsilon_k/\Delta\bar{p}^2), \end{aligned} \quad (3.5)$$

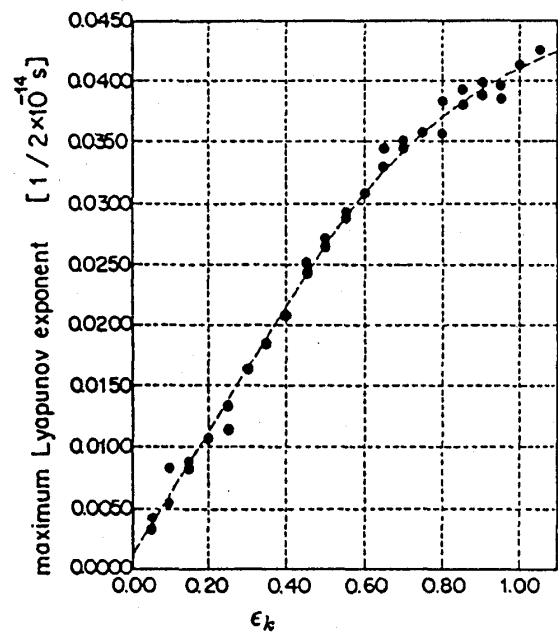


図4 a. 最大liapunov数 vs. 運動エネルギー

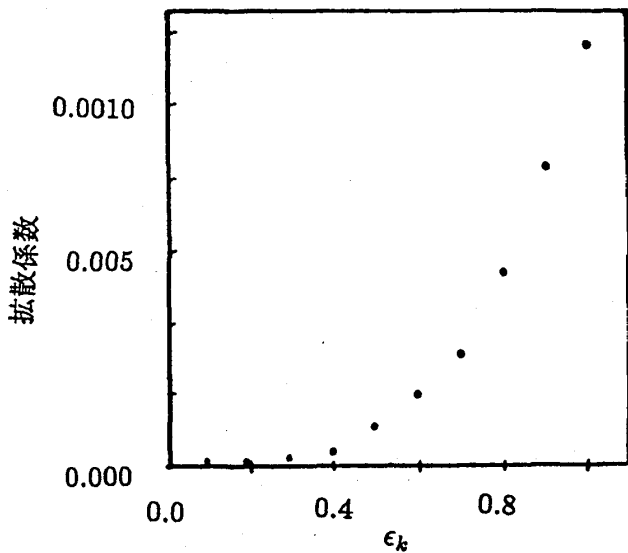


図4 b. 拡散係数 vs. 運動エネルギー

(l : 一つの安定領域の広さを与える長さ; $D(\epsilon_k)$: 拡散係数; ϵ_k : 粒子当たりの運動エネルギー; $\bar{\lambda}_a$: k s エントロピー; $\Delta \bar{p}$: 運動量の平均の初期値差). (注2を参照.) $\sigma(\epsilon_k)$ の ϵ_k 依存性は主に $\bar{\lambda}_a(\epsilon_k)$ と $D(\epsilon_k)$ から来る. 最大のリアプノフ数 $\lambda_a(\epsilon_k)$ と $D(\epsilon_k)$ が ϵ_k のどのような関数になるかは図4に与えてある. $\bar{\lambda}_a(\epsilon_k)$ は大体 $\lambda_a(\epsilon_k)$ の $1/4$ 程度である. $\bar{\lambda}_a(\epsilon_k)$ はほぼ ϵ_k に比例する. また, 多数の計算機実験¹⁵ からも $D(\epsilon_k)$ は $\exp[-b'/\epsilon_k]$ の依存性をもつことが確かめられている. (小さい ϵ_k を除く.) これらの依存性から,

$$\sigma(\epsilon_k) \propto (2l^2/N)\epsilon_k \exp[b/\epsilon_k] / \ln(2\epsilon_k/\Delta \bar{p}^2) \quad (3.6)$$

を得る. 右辺の因子 $(2l^2/N)$ の ϵ_k 依存性が無視できれば, $\sigma(\epsilon_k)$ は ϵ_k の単調増加関数であり, $\sigma(\epsilon_k) = 1$ を満たす ϵ_k は唯一つ存在すると結論できる. また, τ_q は, 代表点が時間 t の間に通過する局所安定領域の個数 $s(t)$ を使って表わすことが出来る. $s(t) \simeq Nc(\epsilon_k)t$ ($c(\epsilon_k) \simeq \exp[-b/\epsilon_k]$ (b は定数)) から, $\tau_q = 1/c(\epsilon_k)$. これを (3.5) に代入すれば

$$\sigma(\epsilon_k) = (1/c(\epsilon_k))2\bar{\lambda}_a(\epsilon_k) / \ln(2\epsilon_k/\Delta \bar{p}^2) \quad (3.7)$$

となる. この ϵ_k 依存性は, (3.6) の $\sigma(\epsilon_k)$ の ϵ_k 依存性と一致する. (異なる量を使って表したにも拘らず.) (3.7) の利点は, (3.6) の l を評価す

ることは難しいが, $c(\epsilon_k)$ はシミュレーションから直接求めることが出来る点である.

(3.7) を用いて, $\sigma(\epsilon_k) = 1$ を満たす転移点を実際の系で計算してみよう. Lennard-Jones 系で実際に計算した $s(t)$ と $\bar{\lambda}_a(\epsilon_k)$ を計算した結果を使えば, 転移点 $\epsilon_k \simeq 0.55$ (この系では 125K が単位のエネルギー) を得る. 一方, シミュレーションから得た Type I と Type II, III の転移点は $\epsilon_k \simeq 0.65$ である.²¹ この一致は偶然か必然か判らないがかなり良い. (数値上的一致というのは, 傾向の一致という結果より気味の悪いものである. 偶然かどうかは, 他の相互作用系で調べることが必要であろう.)

注1) τ_c が運動量空間で 'マルコフ化' が起こる時間スケールであることは重要である. このことは更に他の統計力学で現れる関係式で確かめるには必要があるだろう. 転移点の上では位置座標空間の運動が強く, 転移点以下で運動量空間の運動が強く現れる. ここで安定領域間の運動を対象としている. 上で, 運動量空間の相対拡散が頭打ちになると位置座標空間での相対拡散に質的変化が現れることを言ったが, 逆に, 位置座標空間での相対拡散の頭打ちが運動量空間の相対拡散に質的変化をもたらす場合はあるであろうか. これは無いように思える. '思える' というのは, 小さな ϵ_k (≤ 0.2) を除いて運動量空間の相対拡散が頭打ちになると位置座標空間での相対拡散に影響する現象が見える. しかし, 小さな ϵ_k では, 運動量と位置座標空間の相対拡散は指数関数にのらないで増大と減少を不規則に繰り返し, また, 初期値依存性が強いのでハッキリした結論を下せない. 初期値のアンサンブル平均すれば時間依存性がハッキリするだろうが, 相対拡散は軌道の (必ずしも小さくない) 分離距離を計算する必要があるために計算機的能力からも不可能である. (このような ϵ_k に対してリアプノフ数は計算することが出来る. 何故なら, リアプノフ数は微小な分離距離のみを考えているために軌道の差に関する最低次の運動方程式を考えれば済むからである.)

注2) 上では, 拡散係数やリアプノフ数のような平均化された量を用いた. しかし, 代表点がある安定領域から他の隣接するどの安定領域に移行するかを考える時, (運動量と位置座標は力学変数としてお互い独立であるが,) 位置座標を通してポテンシャル値と運動量の大きさは関係している. このため, 二つの空間での運動は一つの安定領域から境を接する沢山の隣の安定領域のどの安定領域に行くかの過程では密に絡まっているために, むしろ, 各安定領域での平均

化しない拡散係数やリアブノフ数に相当する量を使うほうが適当であろう。

§3. Type III の運動

Type III はどのような運動なのだろうか。高次元ハミルトン系で幾つかの性質と散逸系との比較、又、Type III の運動のモデル化を議論しよう。

A. 幾つかの性質

Type III は、非対称運動と安定領域間の間欠的遷移が特徴である。更にどのような性質を持つのだろうか？

(1) 強い軌道不安定性 (strong dynamic instability): 安定点間の遷移は速い。つまり、遷移過程では、絶対拡散と相対拡散 (各々を $a_q(t)$ と $r_{q,q'}(t)$ で表そう) は共に時間 t の指数関数に増大する。つまり、 $a_q(t) \simeq \exp[\lambda_a t]$, $r_{q,q'}(t) \simeq \exp[\lambda_r t]$. λ_a や λ_r は安定領域内部の運動の軌道不安定性に比べ数倍大きい。

(2) 複数の経路形成 (multi path formation): 初期値の僅かな違いで異なる安定領域間の運動が起こる。

(3) 容易な経路形成 (easy path formation): 遷移過程で、粒子運動は連鎖的で、粒子運動は三次元位置座標空間で線トポロジーを描くように起こる。

(4) 局所的遷移要因 (local trigger): 少数の粒子が安定点間の遷移運動の要因である。

(5) なだれ崩壊 (cascade collapse): 少数の粒子運動に他の多くの粒子が追従し、遷移が完了する。(但し、少数の粒子のみが運動し他の残りの粒子は余り動かない場合もある。)

性質 (1) は相対拡散のみならず絶対拡散も指数関数的増大するのが特徴である。遷移過程では少数粒子が特に速く運動し、この速さが絶対拡散と相対拡散への指数関数依存性に反映する。この運動は、代表点が (少数自由度に関係した) 不安定多様体に沿って運動した結果と見なすことが出来る。(計算では、エネルギーをもう少し上げると遷移過程での絶対拡散は指数関数的ではなくノーマル拡散に近いのも多く現れる。これは、不安定多様体から離れた所を運動する場合に期待される。) 図5に、間欠遷移過程で絶対拡散 $a_{p,q}(t) (= \{a_p(t)^2 + a_q(t)^2\}^{1/2})$ が対数目盛で時間の関数として示してある。間欠的遷移は $10000 < t < 10250$ の間で起こる。 $a_{p,q}(t)$ の指数関数的時間依存性は、(時間的に激しく振動する運動量空間の絶対拡散 $a_p(t)$ (図5の中段) を取り去った部分を見れば、つまり、 $a_q^2(t)$ (図5の下段)) から明らかになる。

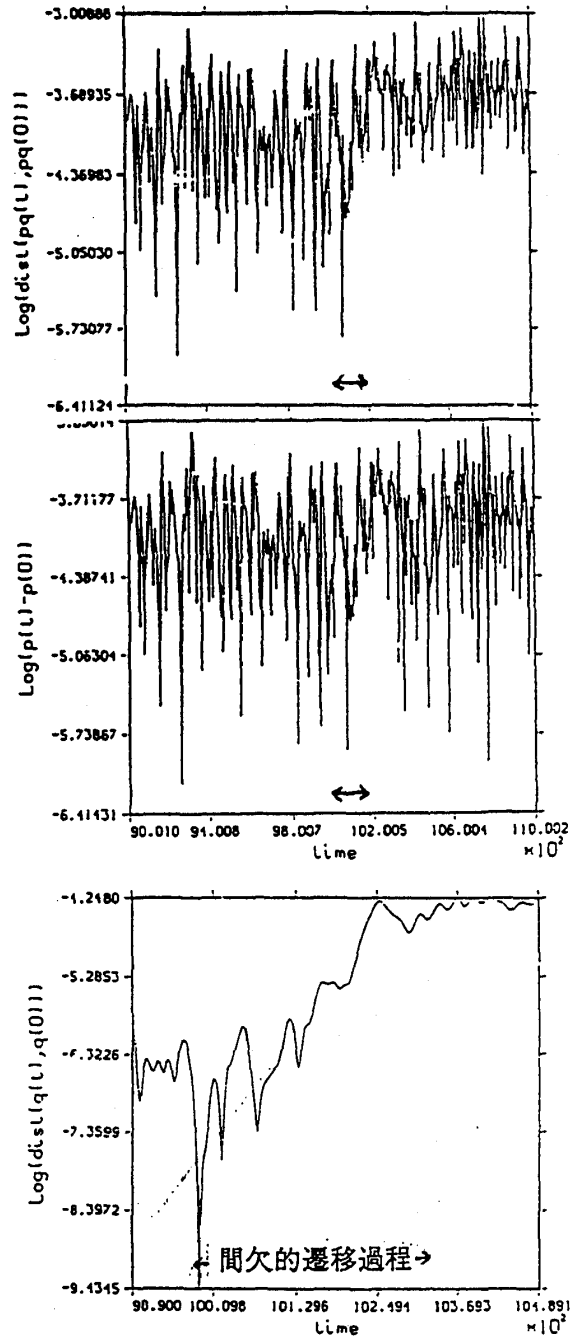


図5. 相対拡散の時間的振舞い

性質 (2) は安定領域内で僅かに初期値の異なる代表点はその後安定領域内の軌道不安定性によって少し時間の後に安定領域のサイズ程度に広がってしまう結果である。性質 (3)(4)(5) は図6で説明しよう。この図は図2の下段の t が 3800 付近で起こる間欠的遷移に於ける粒子の (y 方向から眺めた) 配置の変化を示している。但し、図

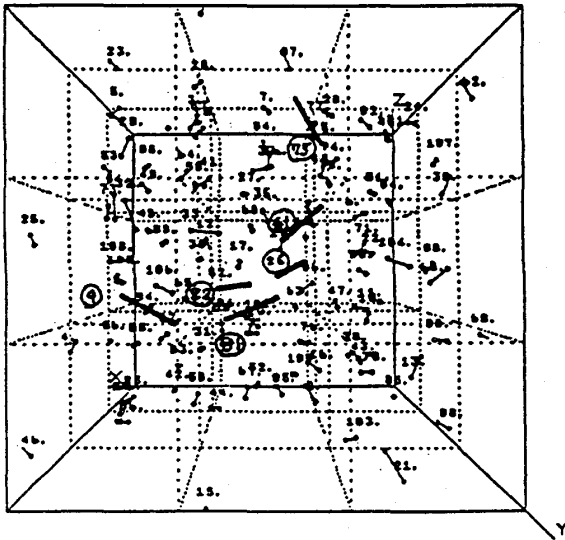


図6. 間欠的遷移の前後の粒子配置

で示してある配置は間欠遷移の前後の安定領域の安定点での粒子配置である。各粒子の位置変化は線で結んである。特に大きい位置変化は太線で小さい位置変化は細線で示してある。太線は線トポロジーを形成する。遷移に関与する粒子は空間的に強い相関をもち、運動の起こり易い方向(easy path)がある。各粒子に運動の時間変化を見ると、遷移は以下のように起こっていることがわかる。まず、粒子81, 82が動く。粒子9は81が動いて出来た穴を埋めるように、26は82に押し出されるように動く。(粒子9, 26の運動は81, 82の運動とほぼ同時であり、どちらの運動が原因で結果なのは不明である。そもそも因果律でどちらが原因でどちらが結果なのかの区別はない。因果律は人間が対象に抱く幻想であり意味である。)次に、粒子61, 75が動く。最後に、他の残りの粒子がこれらの粒子の運動に追従して遷移が完了する。この遷移運動は少数の粒子が遷移を引き起こすこと(local trigger)、つまり、遷移のポテンシャル壁はサイズに無関係に有限であること、なだれ崩壊(cascade collapse)、つまり、遠く離れた安定領域間で遷移が起こり得ることを示唆している。一つの安定点内の運動は既に十分にカオス的で複雑である。Type IIIの遷移運動は、これらの複雑な運動の遷移として起こり、トーラスの部分的な崩壊で起こるアーノルド(Arnold)拡散と違う。また、KAMトーラスに長く滞在する誘導現象でもない。既に、十分カオス的である(安定点内の)運動の間の運動であり高

次元系に特有なものに見える。

それでは、間欠的遷移を引き起こす局所的遷移要因(local trigger)がどのように形成されるのだろうか。他の多くの自由度が準備するのだろうか、それとも、local triggerのすぐ周りの自由度のみが関与するのだろうか。或いは、静的に眺めれば系がどのように、関係する不安定多様体に沿って運動するのだろうか。前者の立場では因果律が不明瞭になるだろう。これは今調べている。

B. 保存系と散逸系での違い

Type IIIの間欠的遷移に類似した運動は散逸系にも現れる。保存系と散逸系での運動を比較しよう。(保存系或いは散逸系といっても多種多様である。)ここでは、次の遅延型微分方程式で表される高次元散逸系を考えよう。

$$dx(t)/dt = -x(t) + \mu(1 + \sin(x(t - t_r))), \quad (4.1)$$

図7のような光非線形媒質を含むループの($x(t)$ に相当する)光強度は、この方程式によって記述

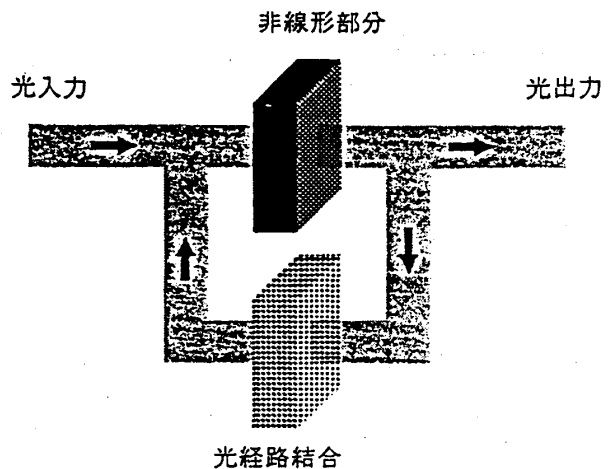


図7. 光遅延ループ系

される一つの例である。 μ はレーザー強度に対応する。この系の特徴的時間は光非線形媒質の応答時間 T_m と遅延時間 T_r がある。式(4.1)では、時間は T_m で規格化されている、つまり、 $t_r = T_r/T_m$ である。(4.1)の $x(t)$ の運動をイメージするには、例えば、一定の(応答時間に相当する大体 $O(1)$ の)幅を持った光パルス(pulse)を $0 \leq t < t_r$ の時間区間に目一杯に詰め込んだパルス列(バケット)の運動を考えれば良い。(4.1)で左辺の $dx(t)/dt$ がなければ、バケット内の各パルス

は $\mu(1 + \sin(\text{パルス強度}))$ の一次元の非線形写像に従って増幅や減衰が生じる。(写像を作用させる時間間隔は t_r である。) 各パルスはそのままでは独立であるが, $dx(t)/dt$ の項によりバケット内の隣接するパルス間で相関が現れ, 互いに相互作用しながら運動することになる。

十分長い遅延時間で, $1 \ll t_r$, この系は(高次元ハミルトン系が持つ性質に)類似した, 或いは, 相違する幾つかの性質を持つ。(この系の詳細には立ち入らない.¹⁷⁾ 例えば, 類似した性質は, (s1) 多重領域構造 (multiple basin structure): 状態空間に沢山のアトラクターが共存する。高次元ハミルトン系で言えば, ポテンシャル面 $V[q_i]$ が沢山の安定領域に分割されるのに対応している。(アトラクターの概念は, ハミルトン系にはない。)(s2) 遍歴的性質 (wandering property): レーザー強度 μ を上げれば, 幾つかのアトラクター (mode) は一緒になってより大きなアトラクターを形成する。(ハミルトン系で言えば μ はエネルギーに相当するが, 各安定領域内の運動が真に分離されているのかどうかは安定領域間のポテンシャル壁の高さの加法性と関係しており未解決の問題である。) 一方, 相違する性質は, (d1) 再帰性 (recurrence) である, つまり, アトラクター間の遷移運動は逆の遷移も同じ程度の '確率' で起こり可逆的である。ハミルトン系では非対称運動が現れ再帰性は起こり難い。

この散逸系の運動を調べる一つの方法は, 節 (2.B) と同様に, アトラクターをスカラー量で表現することによって実行できる。このシフト写像の方法で軌道を調べると, この散逸系は間欠的遷移運動を生じることが判っている。この散逸系での間欠的遷移運動は, 高次元ハミルトン系での性質 (1)-(4) と類似した性質を持つ。即ち, (1) 強い軌道不安定性 (strong dynamic instability): 絶対拡散と相対拡散は共に時間 t の指数関数的に増大する。(2) 複数の経路形成 (multi path formation), (3) 容易な経路形成 (easy path formation), (4) 局所的遷移要因 (local trigger) である。 t_r に比べ狭い時間領域でのみ信号 $x(t)$ が変化する。しかし, 性質 (5) のなだれ崩壊 (cascade collapse) はこの散逸系では起こらない。換言すれば, '近距離' のアトラクター間でのみ遷移する。(遷移は必ず隣接アトラクター間で起こるが近距離である理由はない。) この性質は, この散逸系が(光パルスの伝搬方向に対応して実空間の次元は) 一次元的であることに起因するように思える。つまり, 隣接する光パルス間で強い相関が働くことから, 最も空間的に局在した不安定遷移のモード

(負のリアプノフ数を持つベクトル) の方向に遷移が起こりやすくなる。また, そのような遷移は遷移過程でリアプノフベクトルの方向を余り変化しないだろう。この為, 遷移は近距離のアトラクター間で完了する。これは, 一つの自由度はその周囲のより多くの自由度と強い相関を持ちながら運動する空間的により高い次元性を持つ場合と比較すべきである。実空間の次元性が高い系では遷移過程でリアプノフベクトルは大きく方向を変える場合がある。その例は, 図5で運動量の絶対拡散は遷移過程で激しく振動していることから判る。これまで調べた範囲では, この散逸系ではなだれ崩壊が起こるような例はない。この理由は, 多数のアトラクターが共存するパラメータ μ の領域が狭いためであるように思える。粒子系では, 二準位系 (two levels system) での粒子運動に対比されるだろう。

他の散逸系でも間欠的遷移運動は起こるが, これらについては文献を参考にして欲しい。

C. Type I, II との違い: 経路の複雑さ

Type III の運動は, 高次元ポテンシャル空間で隣接する安定領域の遷移経路の複雑さ (path complexity, 或いは, connectivity complexity) と関係していることをこの節で示そう。以前, 代表点 (phase point) を $(3N-3)$ 次元数の多次元空間のポテンシャル面 $V[q_i]$ の上の運動としてイメージできることを述べた。多次元空間のポテンシャル面は多数の安定領域に分割され, 代表点の軌道はこれらの安定領域の上に射影 (onto mapping) することで表された。一つの安定領域は多数の他の安定領域が隣接している。図8は経路の複雑さと Type III の運動を模式的に二次元平面に描いたものである。始め, 安定領域 a にいとうしよう。Type III の運動では, 代表点は安定領域 a 内で長い時間で滞在し, 次に隣接する他の安定領域 b に遷移する。注目すべき点は安定領域 a と b を繋ぐ経路の '複雑さ' である。Type III の運動と経路の複雑さが関連していることを示めすことが出来る。図9は計算で実際に起こった間欠的遷移過程の前後の安定領域の安定点を結ぶ直線上の点がどの安定領域に属しているかを示している。計算は前後の安定領域の安定点を結ぶ直線上の位置座標がどの安定領域に属するかを調べず計算を行なった。直線上の点は安定領域内の安定点でのポテンシャルエネルギー値 $V[q_i]$ に射影してある。図9では間欠的遷移の前後の安定領域の間に他の二つの領域が入り込んでいる。破線は直線上のポテンシャル値である。これに対

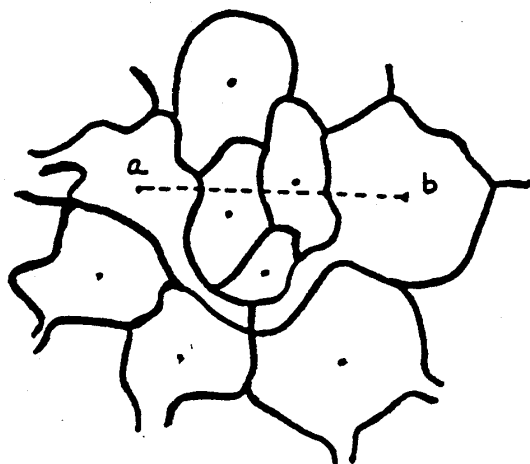


図 8. 経路の複雑さ

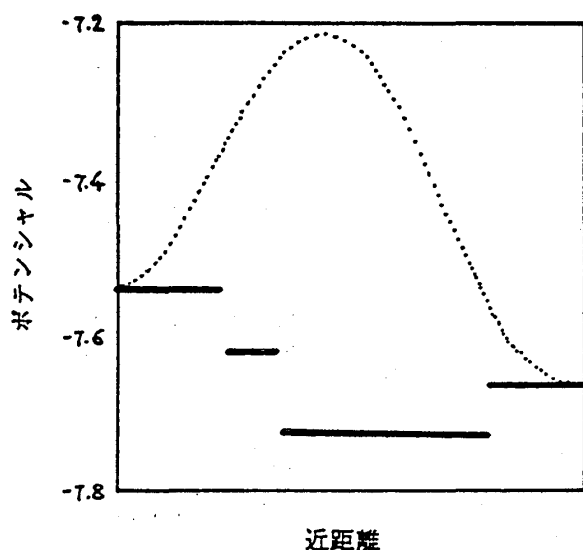


図 9. 間欠的遷移上の安定点分布

して、Type I, II の運動では、殆どどの場合遷移する二つの安定領域の安定点を結ぶ直線上には他の安定領域は入り込まない。

Type III の運動で間欠的遷移は (i) 局所的遷移要因 (local trigger) で引き起こされる。このことは、Type III の遷移は、図 8 に示したようなポテンシャル空間で限られた方向を持つ遷移経路を運動することを示している。次元数は local trigger の自由度数と同程度でなければならない。ポテンシャル面の空間の次元数 $(3N-3)$ から比べ

れば非常に少ない経路の次元数である。また、複数遷移経路の形成 (multi path formation) はこの様な経路は一つだけではないことを示している。Type I, II と Type III での実際に遷移する二つの安定領域の間の構造の違いは、エネルギーに応じて遷移する経路が違うことを意味している。

経路の複雑さ (path complexity, 或いは, connectivity complexity) はどの様に定量化され Type III の運動と関連しているのだろうか。このことを行なうには、経路の複雑さに関する '手続き' を導入する必要がある。しかし、これについて今の所よい方法はない。

D. ハミルトン ルービック - イシゲ キューブ (Hamilton rubik-ishige cube)

Type III の運動の重要さは (著者にとって) 二つある。一つは、(1) Type I, II, III を含めた運動の全体像を創ることである。ダイナミクスはそれ自身どのようなダイナミクスの違いを作り出してダイナミクスを変えるのかということの問題にしている。非対称運動の現れの解釈はその一例である。もう一つは (2) Type III の運動はガラスのダイナミクスに対応していることである。(この点は余り述べなかった。) 視点は、節 (2.D) の問題 (d3) から来ている。つまり、安定領域間の構造と運動との問題で、系の '非統計力学性' と二次相転移に類似したガラス転移の存在との矛盾を経路問題に於ける経路の複雑さ (path complexity) が解消してくれるのではないかという期待からである。Type III の運動の特徴は、(i) 安定領域間の間欠的遷移、(ii) 隣接する安定領域の遷移経路の複雑さ (path complexity)、(iii) 限られた方向を持つ遷移経路、(iv) 非対称運動の現れ。特に遷移過程では、(v) 強い軌道不安定性 (strong dynamic instability): 絶対拡散も時間 t の指数関数的に増大する、(vi) 複数の経路形成 (multi path formation)、(vii) 容易な経路形成 (easy path formation)、(viii) 局所的遷移要因 (local trigger)、(ix) なだれ崩壊 (cascade collapse) の現れ、等々である。

この節では「同時に大きな変化しうるのは少数の自由度のみである制限付きの運動は間欠的遷移を産む。即ち、(iii) の限られた方向を持つ遷移経路は (i) の間欠的遷移運動を引き起こす」ことをハミルトン ルービック - イシゲキューブ (rubik-ishige cube の Hamilton 系) でデモンストレーションしよう。ルービック - イシゲ キューブをこのためだけなら使わなくてもよいが、Type III の運動の Toy モデルとしての役割を期待しているからである。

ルービック - イシゲ キューブはマジック キューブ (magic cube) とも呼ばれる。18,19,20 1975 年にハンガリーのルービック (Ernö Rubik) と 1976 年に日本の石毛照敏によって独立に発明され、三次元空間で $3 \times 3 \times 3$ の立方体の中の小立方体を色が揃うようにもってゆくゲームである。(図 10 を見よ。) このキューブがどう構成されているかを理解するのも難しい(これを機構問題というらしい)。実際に製作することが出来るかどうかの問題を別にすれば、キューブの実空間の次元数を三以上の高次元に拡張したり、更に $n \times n \times n$ (n : 任意の正整数 (≥ 2)) のもの考えることができる。以下では、 $n \times n \times n$ の三次元空間のキューブを考えよう。キューブの色のパターンは $n=3$ で 43,252,033,274,489,856,000 ($\approx 4 \cdot 10^{19}$) 個、 $n=2$ で数百万個もある。このパターンの多さは、ルールを知らないで、又は、ルールを自分で科学し習得してゆかなければルービック - イシゲ キューブは解くことは出来ないことを意味している。

ルービック - イシゲ キューブで小立方体を色が揃うようにもってゆくための回転の操作は三種類ある。実空間の次元数に等しい三つの軸に垂直な回転である。(図 10 を見よ) 各回転は更に n 個の異なる回転に分解できる。これらの回転操作を記号 r_i^α ($i=1, 2, \dots, n; \alpha=1, 2, 3$) で表そう。キューブの 6 面からなる表面は、(各面は色の付いた $n \times n$ 個の四角形からなるので) $6n^2$ 個の

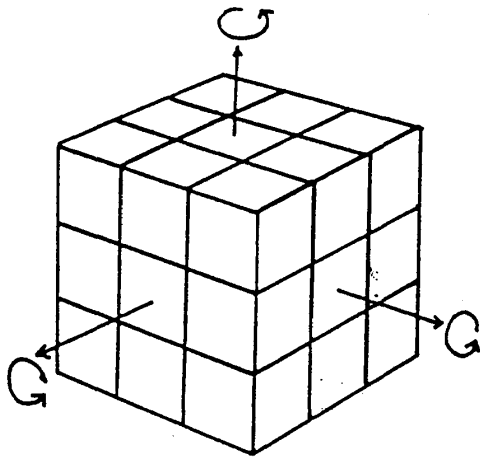


図 10 .rubik-ishige cube

四角形でカバーされる。一つの回転操作はこれら $6n^2$ の四角形の色を置き換えることに対応している。この事実から、各回転操作は $(6n^2, 6n^2)$ の行列で表すことができる。例えば、

$$r_i^\alpha \rightarrow (a_{s,t}), \quad (4.2)$$

$a_{s,t}$ ($s, t=1, 2, \dots, 6n^2$) は行列要素である。(ここでは具体的な行列の形には触れない) 逆回転操作 $(r_i^\alpha)^{-1}$ は r_i^α の逆行列として得られる。逆行列は r_i^α の適当な行列積で書ける。色が揃うようにもってゆくための回転操作の列は r_i^α の、例えば、 $r_3^1 r_2^3 r_1^2 \dots r_3^1 r_2^3$ のような行列積で表現される。形式的には群論で記述できるが、群の要素数はパターンの数に等しくなるために実行不可能である。解く手続きは、始めのパターンを指定する $6n^2$ 個の要素からなるベクトル (A_i) に上の回転操作の行列を掛けて最後に目的のパターンをベクトル (A_0) を得ることで完了する。即ち、 $A_0 = r_3^1 r_2^3 r_1^2 \dots r_3^1 r_2^3 A_i$ となる行列を作用させる手順を見い出すことである。等価であるが、 A_0 に作用させて A_i を得る行列を B_i 、 A_0 に作用させて A_0 を得る行列を I 、即ち、単位行列とすれば、 $I = r_3^1 r_2^3 r_1^2 \dots r_3^1 r_2^3 B_i$ となる。逆に言えば、ルービック - イシゲ キューブを解くことは、 $B_i = (r_3^1)^{-1} (r_2^3)^{-1} \dots (r_1^2)^{-1} (r_3^1)^{-1} (r_2^3)^{-1} (r_3^1)^{-1}$ を求めること、つまり、与えられた B_i を r_i^α (或いは、 $(r_i^\alpha)^{-1}$) を要素として積分解することである。

ルービック - イシゲ キューブをハミルトン形式で表そう。(正確に言えば、ルービック - イシゲ キューブをハミルトン形式でモデル化することである。モデルに適当な解釈を与えればルービック - イシゲ キューブの回転操作をシミュレートすることである。) この方法は、幾つかの条件が与えられたとき、これらの条件を厳密に満たす(拘束条件のある)非ホロノーム系の、或いは、これらの条件を(近似的に)満たすようにダイナミクスが進行するハミルトン関数を簡単に構成できることを利用している。ここでは、後者の場合を扱う。(非ホロノーム系については、例えば、E. T. Whittaker, 解析力学, 1972 講談社を参照。) n 個の条件式 $f_n[q_i] = 0$ ($n=1, 2, \dots, M; i=1, 2, \dots, N$) を満たすようなダイナミクスは、

$$H[p_i, q_i] = F_\kappa[p_i] + V[q_i], \quad (4.3)$$

$$F_\kappa[p_i] = (1/2) \sum_i^N p_i^2 (1 + (\kappa/N) \sum_{j \neq i} p_j^2),$$

$$V[q_i] = \sum_{i,n}^{N,M} w_n f_n(\{q_i\})^2, (w_n : \text{適当な重み関数})$$

から得られる。しばしば、系にカオスダイナミクスが必要とする場合がある。この時、位置座標空間でカオスダイナミクスを起こさない場合に、例えば、ポテンシャル $V[q_i]$ が q_i に関して、線形であるような場合には、 $\kappa \neq 0$ で運動量空間での相互作用を通じてカオスダイナミクスを起させることが出来る。この時、 κ はカオスが現れる強さをコントロールするパラメータ (stochastic parameter) となる。(スペースの都合でより詳細な説明は行なわない。) ルービック-イシゲキューブは (4.3) の例である。ルービック-イシゲキューブでの条件は、(1) 回転操作は一回、二回.. というように整数であることと、(2) 異なる回転を同時に実行出来ないという排他律に従うことである。更に、(3) 色が揃うように回転することである。これらは、次のモデルで表すことが出来る、

$$H[p_i^\alpha, r_i^\alpha] = F_\kappa[p_i^\alpha] + v_1[r_i^\alpha] + v_2[r_i^\alpha] + v_3[r_i^\alpha]. \quad (4.4)$$

p_i^α は r_i^α の正準共役変数である。 $v_1[r_i^\alpha]$ は条件 (1)、 $v_2[r_i^\alpha]$ は条件 (2)、 $v_3[r_i^\alpha]$ は条件 (3) をシミュレートするポテンシャルである。これらの関数の選択には任意性がある。以下で、用いられる具体的な形は、

$$v_1[r_i^\alpha] = \kappa_1 / (2\pi) \sum_{i,\alpha} \sin\{2\pi(r_i^\alpha - 1/4)\}, \quad (4.5a)$$

$$v_2[r_i^\alpha] = (\kappa_2 / 6n^2) (1/2\pi) \sum_{(i,\alpha) \neq (j,\beta)} [\sin\{2\pi(r_i^\alpha - 1/4)\} + 1][\sin\{2\pi(r_j^\beta - 1/4)\} + 1]. \quad (4.5b)$$

κ_1, κ_2 はパラメータである。モデルの説明をしよう。 r_i^α は回点操作を表現する実数である。(上で、回点操作とその表現を与える行列を同じ記号 r_i^α で表した。ここでは、同じ記号を使って、回転操作の一回、二回.. というような整数の回転数を表す。回転数は整数値を取るが実数値も取れるように拡張した。) 条件 (1) は、 $v_1[r_i^\alpha]$ でシミュレートされる。 $\kappa \neq 0$ で $v_2=0, v_3=0$ の時の (4.4) の運動はポテンシャル $v_1[r_i^\alpha]$ を最小にする r_i^α の値は...、-1, 0, 1, 2.. のような整数値である。 $\kappa \neq 0$ に起因するカオスは $r_i^\alpha(t)$ の滞在時間を $r_i^\alpha(t)$ が整数値をとりポテンシャルを下げる所で大きくする。条件 (2) は、同様に、 $v_2[r_i^\alpha]$ でシミュレートされる。ポテンシャル $v_2[r_i^\alpha]$ を下げる場合は、一つの r_i^α 以外の全てが $r_i^\alpha \simeq$ 整数である場合である。これから、モデルは、回転操作は整数値を取り排他的に

起こるダイナミクスをシミュレートすると期待できる。(実際に起こるかどうかは、パラメータ κ_1, κ_2 の選びに依る。) モデルは、小数の(ここでは一つの)自由度のみが同時に大きな変化する制限を持つ運動を行なう。(元々のルービック-イシゲキューブはこの性質を自然に持っている。) このモデルが間欠的遷移を起こすことは図 11 に示してある。図は $n=2$ の三次元キューブの各回転(三種類の回転を p_i, q_i, r_i ($n=1, 2$) で表す)の時間的振舞いを示してある。始めに適当な運動エネルギーを与えている。カオスダイナミクスは $v_2 (\neq 0)$ から起こるので、(4.4) で $\kappa=0$ と置いてある。 $p_i(t), q_i(t), r_i(t)$ は整数値の周りで揺れている。そして、時々、-1 (逆回転) か +1 (正回転) だけ違う値に飛び移ることが判る。この遷移が起こる時には、他の遷移が起こることはない。つまり、回転は同時に二つ以上起こることはない。回転しない状態が長く続き時々飛び移る間欠的遷移運動を起こっている。局所安定点は全ての p_i, q_i, r_i ($i=1, 2$) が整数値を取る点であり、安定領域はこの点を囲む $-0.5 \leq p_i < 0.5, -0.5 \leq q_i < 0.5, -0.5 \leq r_i < 0.5$ の区間である。

以前の多粒子系のダイナミクスとの違いは、ここでは非対称運動が現れないことである。この非対称運動は、 $v_3[r_i^\alpha]$ から、つまり、色が揃うように回転する運動を創り出すポテンシャルから現れる。(しかし、この構成の仕方はここでは触れない。)

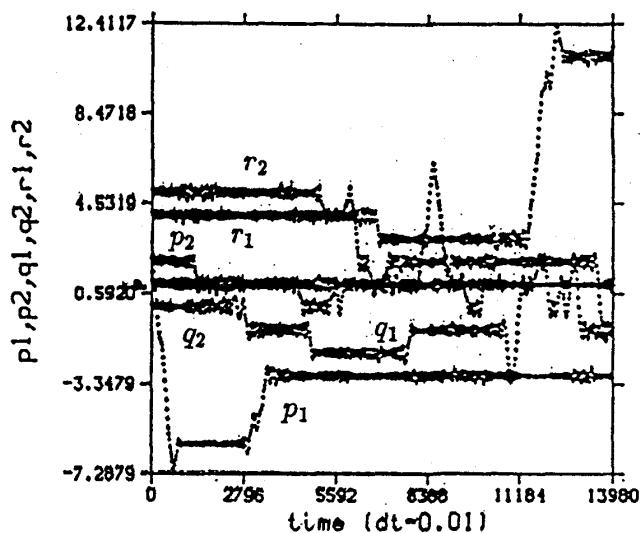


図 11. 回転操作の時間的振舞い

§. 5. 終りに

これまで、多粒子系のダイナミクスの理解について述べてきた。これと同じ位に、他の話題に触れてみたかったが時間に関係で諦めざるを得ない。他の話題の項目だけをリストアップすれば、ハミルトンダイナミクスの利用:

- A. 非対称運動 (asymmetric dynamics) と機能,
- B. 不変測度の設計と制御アルゴリズム,
- C. 幾つかの例: 混合通信と複雑系の方法論について,

である。

最後に、§2と§3で述べたダイナミクスが成り立つ条件をリストアップしておく:

- (1) ポテンシャルの深い所と高い所が系のサイズに比例する,
- (2) テンシャル面 $V[q_i]$ が沢山の安定点があること.

である。

謝辞. P. Davis に§4.B節についての議論について感謝致します。

††ATR 光電波通信研究所

〒619-02 京都府相楽郡精華町光台2丁目

e-mail:shinjo@atr-rd. atr. co. jp

文献

- 1) 内容は、京大基研での‘複雑系’の研究会での講演の一部である。
- 2) 新上和正, 数理科学, ‘ガラスに潜む複雑さ’, 35(1991). 局所安定点数やポテンシャル壁の加法性の議論がある。
- 3) K. Shinjo, Phys. Rev. B40, 9167(1989); J. Chem. Phys. 90, 6627(1989).
- 4) L. Galgani and G. LoVecchio, Nuovo Cimento, B52, 1(1979).
- 5) E. Fermi, J. Pasta, and S. Ulam, Lett. Appl. Math. , 15, 143(1974).
- 6) F. M. Izrailev and B. V. Chirikov, Sov. Phys. Dokl. , 11, 30(1966).
- 7) P. Bocchieri, A. Scotti, B. Bearzi, and A. Longeri, Phys. Rev. , A2, 2013(1970).
- 8) 他の文献は、例えば、G. Benettin, Proc. Inter. School Phys. -Enrico Fermi Course XCVII, ed. G. Ciccotti and W. Hoover,

15(1988).

- 9) シフト写像は考えていないが, F. H. Stillinger and T. A. Weber, Science, 225, 983(1984).
- 10) H. Jonsson and H. C. Andersen, Phys. Rev. Lett. , 60, 2295(1988).
- 11) D. Thirumalai, R. D. Mountain, and T. R. Kirkpatrick, Phys. Rev. , A39, 3563(1989).
- 12) 例えば, Science and Technology, ed. by R. D. Uhlmann and N. J. Kreidl (Academic, New York, 1983) Vol. 1; Science and Technology, ed. by R. D. Uhlmann and N. J. Kreidl (Academic, New York, 1985) Vol. 3.
- 13) P. W. Anderson, Ill-condensed matter, Les Houches ed. by R. Balian, R. Maynard, and G. Toulouse (North Holland, Amsterdam, 1979) p. 159.
- 14) C. M. Newman and D. L. Stein, Phys. Rev. , B46, 973 (1992).
- 15) L. V. Woodcock and C. A. Angell, and P. Cheeseman, J. Chem. Phys. , 65, 11(1977).
- 16) 会田田人, P. Davis, ‘光カオスに内在する新機能に関する研究’, 日本応用物理学会誌, 37(1991).
- 17) K. Ikeda and K. Matsumoto, Physica, D29, 223(1987).
- 18) 例えば, D. R. Hofstadter, ‘メタマジックゲーム’ 白揚社, 1990; サイエンス, 5月号, 8(1981).
- 19) C. Bandelow, ‘Inside Rubik’s cube and beyond’, Birkhäuser, 1982.
- 20) G. Marx, E. Gajzago, and P. Gnädug, Eur. J. Phys. 39(1982).
- 21) シミュレーションと一致は k.s. エントロピー $\bar{\lambda}(\epsilon_k)$ より最大リアプノフ数を使う方が良い。最大リアプノフ数を使った場合では転移点 0.65 をうる。
- 22) 熱力学での非可逆性とカオスダイナミクスでの非可逆性の意味は異なる。前者では粗視化した状態で使われるが後者では粗視化されないままの全自由度に対して使われる。