

鎖状多体系の末端における活発な運動と遅い緩和

名古屋大・理・物理 小西哲郎 (Tetsuro KONISHI¹)

北大・電子研 柳田達雄 (Tatsuo YANAGITA²)

¹ Department of Physics, Nagoya University

² Research Institute for Electronic Science, Hokkaido University

2010 年 10 月 14 日 (木)

数理解析研究所研究集会「非線形波動現象の多様性と普遍性」

概要

質点間が軽い剛体棒でつながれたひも状 (鎖状) の束縛系では、末端部粒子の平均運動エネルギーが大きくなる。また、質点間がばね定数 k のばねでつながれたひも状 (鎖状) の系では、 k が大きいとき、熱平衡 (エネルギー等分配) へ緩和するまでに過渡的に末端部の平均運動エネルギーが大きくなりうる。等分配までの緩和時間は k に対して急速に増大する。緩和時間を Boltzmann-Jeans 理論で評価すると $\exp(c\sqrt{k})$ となり、数値計算結果とよく一致する。

目次

1	はじめに	2
2	例：多重振り子	2
3	エネルギー等分配則	4
4	問題設定	5
5	束縛系 (軽い剛体棒でつながれた質点)	6
5.1	モデル	6
5.2	シミュレーション	7
5.3	解析的アプローチ	9

6	非束縛系 (バネでつながれた質点)	10
6.1	束縛系と非束縛系の違い	10
6.2	モデル	10
6.3	シミュレーション	11
6.4	1 本鎖以外の形状の場合	13
6.5	Boltzmann-Jeans 理論による緩和時間の解析	14
7	まとめと展望	15
	謝辞	16

1 はじめに

多重振り子のようなモデル系や高分子、DNA、メガフロートや宇宙ステーションでの操作アームのように、鎖状の多体系は理論上、実用上数多く見られる。この講演では、こうした鎖状多体系でのエネルギー分配について考察する。

2 例：多重振り子

まず、今回扱う系のなかでよく知られているものとして、多重振り子の運動をみてみる^{*1}。

- 動画 (3 重振り子) : http://www.youtube.com/watch?v=A1R_aQ-JHRY
(YouTube)
- シミュレーション (7 重振り子) : <http://www.youtube.com/watch?v=XSuQYRRkRyQ>
(YouTube)

N 重振り子 ($N = 1, 2, \dots$) において、系の保存量は全エネルギー 1 つだけなので、 $N \geq 2$ で系はカオスの運動を示す。上記の動画でもシミュレーションでも、カオス的な動きがよくわかると思う。印象として、末端の振り子の動きに特徴が感じられないだろうか。これに関連して、今回の共著者の一人である柳田らが、日本物理学会で下記の内容の発表を行っている [OY98, SOY99, SY00] :

- 多重振り子のカオスの運動において運動エネルギーの時間平均が等しくならない

^{*1} 研究集会当日は実物の 3 重振り子を会場に持ち込んでその動きを参加者に見てもらいました。

- しかしそれはエネルギー等分配則に必ずしも矛盾しない

柳田らの計算を再現したのが図 2 である。ここで、多重振り子は図 1 に示すようなものであり、 N 個の質点 m_i , $i = 1, 2, \dots, N$ が軽い剛体棒 (i 番目の長さは l_i) でつながっていて、一様な重力場 (重力加速度 g) 中で鉛直平面内を運動する。図のように角度 φ_i を取ると、 i 番目の質点の座標 (x_i, y_i) は、振り子の支点を原点 $(0, 0)$ に取れば、

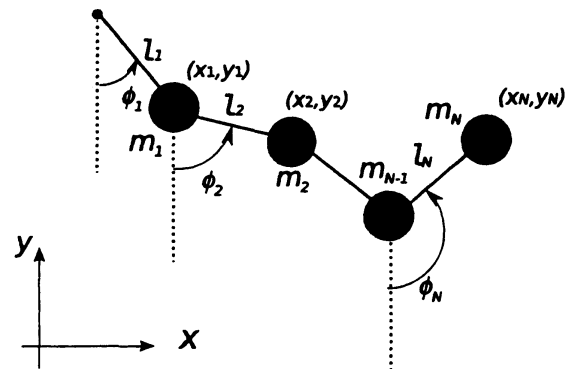


図 1 多重振り子

$$\begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{i-1} \\ y_{i-1} \end{pmatrix} + l_i \begin{pmatrix} \sin \varphi_i \\ -\cos \varphi_i \end{pmatrix} = \sum_{j=1}^i l_j \begin{pmatrix} \sin \varphi_j \\ -\cos \varphi_j \end{pmatrix}$$

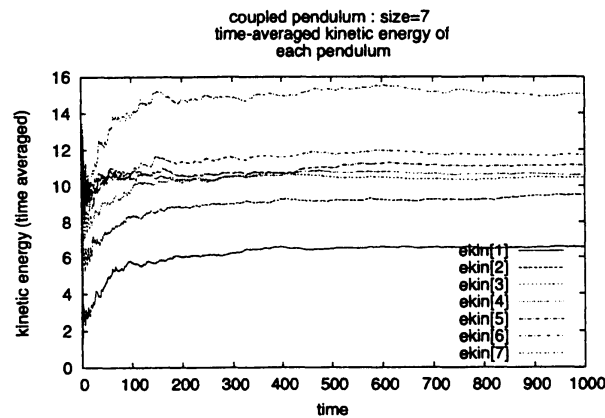


図 2 7 重振り子における各質点の運動エネルギー $K_i(t) \equiv mv_i(t)^2/2$ の時間平均 $\overline{K_i(t)} \equiv (1/t) \int_0^t K_i(t') dt'$

と書かれるので、ラグランジアンは下記のようなになる：

$$L = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} (\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2) - \sum_{i=1}^N m_i g y_i \quad (1)$$

$$= \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \left(\frac{1}{2} \sum_{i=\max(j,k)}^N m_i \right) \ell_j \ell_k \dot{\varphi}_j \dot{\varphi}_k \cos(\varphi_j - \varphi_k) \\ + \sum_{i=1}^N m_i g \sum_{j=1}^i \ell_j \cos \varphi_j \quad (2)$$

横軸は時間 t 、縦軸は各質点の運動エネルギー $K_i(t) \equiv \frac{mv_i(t)^2}{2}$ の時間平均 $\overline{K_i(t)} \equiv \frac{1}{t} \int_0^t K_i(t') dt'$ である。この量は時間的に収束しているものの、それぞれ異なる値をとっていることがわかる。

柳田らによるこれらの発表が今回の一連の研究の発端である。

3 エネルギー等分配則

この結果は、エネルギー等分配則が破れているように見えるかもしれない。しかし柳田らは、この系ではエネルギー等分配則が $mv^2/2$ が等しい事を意味しないことを指摘した [OY98, SOY99, SY00]。

エネルギー等分配則は、

$$\text{温度 } T \text{ の熱平衡下で 1 自由度あたりの運動エネルギー} = \frac{1}{2} k_B T \quad (3)$$

と書かれるのが普通である。この式は、一般的なハミルトニアン

$$H(q, p) = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} v_i^2 + U(\{q_i\}) \quad (4)$$

に対して熱平均 $\left\langle \frac{m_i v_i^2}{2} \right\rangle$ を計算することで示すことができる。

ところが、ハミルトニアンが

$$H(q, p) = K(q, p) + V(q), \quad K(q, p) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_{ij}(q) p_i p_j \quad (5)$$

のように、運動エネルギーの中に座標が入ってくる系では結果は異なる。このような場合については「一般化されたエネルギー等分配則」が知られており、

$$\langle K_i^{(c)} \rangle \equiv \left\langle \frac{1}{2} p_i \frac{\partial K}{\partial p_i} \right\rangle = \frac{1}{2} k_B T \quad (6)$$

となることが知られている [Tol18, Tol38, 久保 61]。ここで左辺は i についての和は取らない。また、 p_i は座標 q_i に共役な正準運動量であり、 $m\dot{q}_i$ に等しいとは限らない。

柳田らは、多重振り子に対してもこの一般化されたエネルギー等分配則を適用すべきことを指摘した。多重振り子のラグランジアン (2) によれば、その運動エネルギーは

$$K = \frac{1}{2} \sum_{i,j} A_{i,j}(\varphi) \dot{\varphi}_i \dot{\varphi}_j \equiv \frac{1}{2} \vec{\dot{\varphi}}^t A(\varphi) \vec{\dot{\varphi}} \quad (7)$$

であり、 φ に共役な正準運動量は

$$p_n \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}_n} = \ell_n \sum_{k=1}^N \left(\sum_{i=\max(k,n)}^N m_i \right) \ell_k \dot{\varphi}_k \cos(\varphi_n - \varphi_k) \equiv \sum_{k=1}^N A(\varphi)_{nk} \dot{\varphi}_k$$

$$\vec{p} = A(\varphi) \vec{\dot{\varphi}}$$

となる。従って、運動エネルギーは

$$K = \sum_{i,j=1}^N \frac{1}{2} A(\varphi)_{ij} \dot{\varphi}_i \dot{\varphi}_j \equiv \frac{1}{2} \vec{\dot{\varphi}}^t A(\varphi) \vec{\dot{\varphi}} = \sum_{i,j=1}^N \frac{1}{2} (A^{-1}(\varphi))_{ij} p_i p_j \equiv \frac{1}{2} \vec{p}^t A^{-1}(\varphi) \vec{p} .$$

となって、一般化されたエネルギー等分配則 (5) であげた形をしている。

実際、シミュレーションを実行してみると、図 3 に示すように、一般化された等分配則が成立し、同時に、 $\overline{\frac{1}{2}mv^2}$ は根元で小さく、末端で大きな値を示している。

4 問題設定

実は、ここにはまだ未解決の問題があった。すなわち、一般化されたエネルギー等分配則は、 $mv^2/2$ が等しくならなくても良いことは示したが、末端でエネルギーが増大するかどうかはまだわかってない。また、多重振り子以外の一般の系でどのようにエネルギーが分配されるかも不明であった。そこで、類似の系でのエネルギー分配を調べ、その物理的意味を問うのがこの研究の目的である。

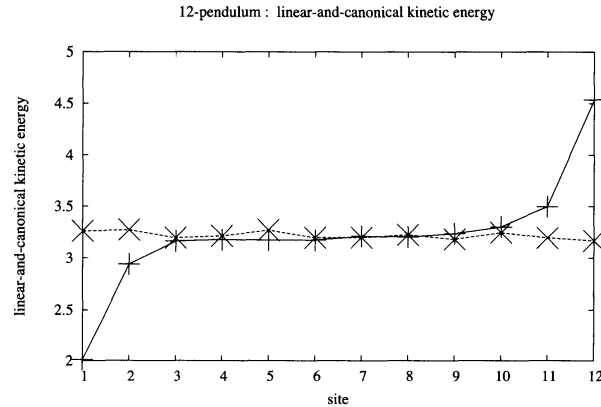


図3 多重振り子 ($N = 12$) での各質点の平均運動エネルギー $\overline{K_i}$ (+印) と「正準運動エネルギー」 $K_i^{(c)}$ (×印)。等分配則は成立しているが、 $1/2mv^2$ は等しくない。

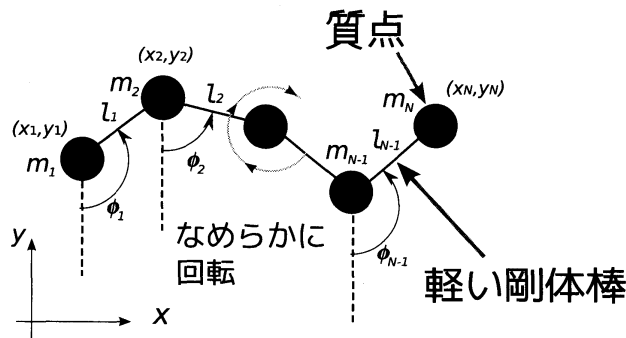


図4 Planar chain モデル

5 束縛系 (軽い剛体棒でつながれた質点)

5.1 モデル

多重振り子におけるエネルギー分配の特異な振舞いの原因は、系内に存在する束縛であった。ここではより一般的な状況を考えるため、もう一つの束縛系のモデル”Planar chain model”を紹介する [KY09, Kra46, Maz96]。このモデルでは、 N 個の質点 m_i , $i = 1, 2, \dots, N$ が軽い剛体棒 (i 番目の長さは l_i) でつながっていて平面内を運動する。末端が固定されていないこと、重力場がかかっていないことが多重振り子と異なる。この系は、高分子などの簡単なモデルと考えることも出来る。実際、この系の3次元版は、Kramers によって導入され [Kra46]、”freely jointed chain” と呼ばれて高分子のモデルとして用いられている [Maz96]。

i 番目の質点の座標を (x_i, y_i) とすれば、系のラグランジアンは下記のように書かれる：

$$L = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} (\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2) - U(\{\vec{r}_i\}),$$

$$\text{束縛条件 } |\vec{r}_{i+1} - \vec{r}_i|^2 - \ell_i^2 = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N-1. \quad (\vec{r}_i \equiv (x_i, y_i))$$

図のように角度 φ_i を取ると、 i 番目の質点の座標 (x_i, y_i) は

$$\begin{pmatrix} x_{i+1} \\ y_{i+1} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix} = \ell_i \begin{pmatrix} \sin \varphi_i \\ -\cos \varphi_i \end{pmatrix} \quad (8)$$

を満たす。これを用いて全運動エネルギー $K \equiv \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} (\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2)$ を角度で書けば、

$$K = \frac{M}{2} (\dot{X}_G^2 + \dot{Y}_G^2) + \frac{M}{2} \sum_{j,k=1}^{N-1} \mu_j^{\leq} \mu_k^{\geq} \cos(\varphi_j - \varphi_k) \ell_j \ell_k \dot{\varphi}_j \dot{\varphi}_k,$$

$$M \equiv \sum_{i=1}^N m_i, \quad \mu_n^{\leq} \equiv \sum_{k=1}^n \mu_k, \quad \mu_n^{\geq} \equiv \sum_{k=n+1}^N \mu_k, \quad \mu_k \equiv \frac{m_k}{M}.$$

となる。運動エネルギーが座標 φ を含んでいることに注意したい。

5.2 シミュレーション

上記のラグランジアンから運動方程式を導出し、数値的に時間発展させる。長時間たてば系は全エネルギー一定 $H = E$ の面上を覆うと考える。ある質点に着目すると、その質点1つは部分系、残りの $N-1$ 個の質点は熱浴と考えて、質点の運動エネルギーを長時間平均したものを計算する。ただし、角度で書いた式は複雑なので、シミュレーションは [デカルト座標] + [束縛] (ラグランジュの未定乗数) にて実行する。すなわち、時間発展の各ステップにおいて、束縛条件を満たすべく拘束力を数値的に計算する。これは分子動力学シミュレーションにて SHAKE や

RATTLE として知られている方法である。計算は2次の symplectic integrator にこの拘束力の計算を取りこみ、それを3段組み合わせた4次の symplectic integrator を用いた [LR04]。

ここで一つ注意が必要である。外場がない場合、系は対称性から全角運動量が保存する。すると、系は全エネルギー一定 $H = E$ と角運動量一定の面 $L = \ell_0$ の共通部分だけ

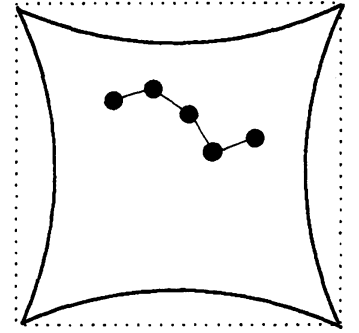


図5 ポテンシャル壁の中の planar chain model

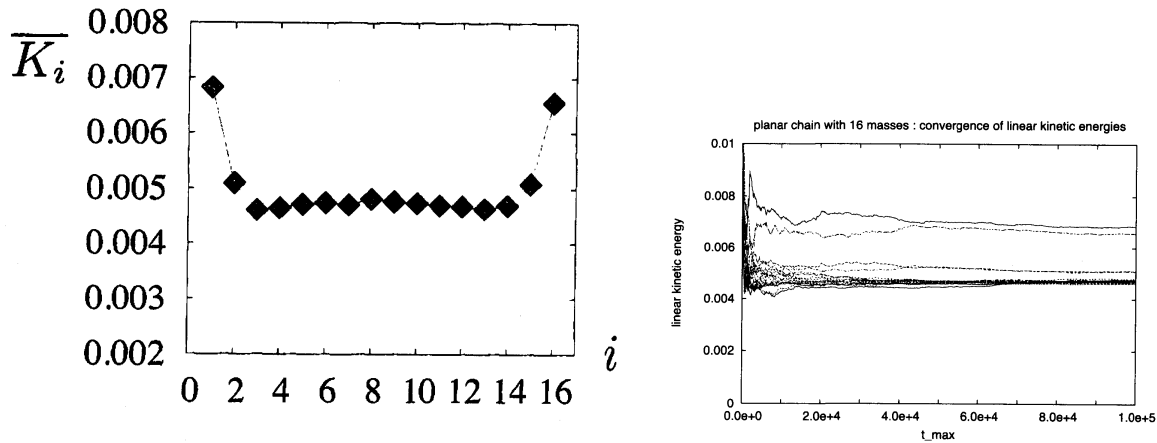


図6 (左) 各質点の運動エネルギー $K_i \equiv \frac{1}{2}m_i(\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2)$ の長時間平均 $\overline{K_i}$, $N = 16$, (右) 収束の様子 [KY09]

を動く。この場合、全系がマイクロカノニカル分布を作らないので、部分系の分布もカノニカル分布にならない。これを避けるために、実際の計算では図5の様にポテンシャル壁(カオスのビリヤード)または非調和ポテンシャルの中に入れて対称性を崩している。

具体的なシミュレーションの条件を述べる。各質点の質量は全て等しく $m_i = 1$ ($i = 1, 2, \dots, N$) とし、また、各リンクの長さも全て等しく $\ell_i = 1$ ($i = 1, 2, \dots, N$) とした。時間刻みは $dt = 10^{-3}$ で、全体で $T_{total} = 10^5$ だけ時間発展させた。初期条件は、一直線状にのばした配置で、末端の1つだけ直交方向に初速度、他は逆方向に同じ大きさの初速度を与えた。

結果を図6に示す。各質点の運動エネルギーの長時間平均 $\overline{K_i}$ は、それぞれ異なる値に収束し、末端部で大きな値をとっている事がわかる [KY09]。

また、同じ時系列データを用いて、等分配されるべき「正準運動エネルギー」を計算してみると、これはほぼ等しい値を示している。(図7) すなわち、系が熱平衡状態へ緩和していること、図6でエネルギーが等しくならないのは系が緩和していないためではないことが確認された。

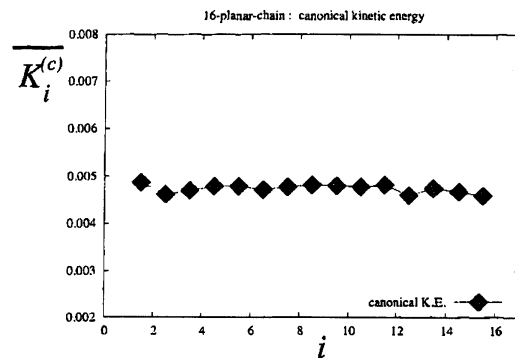


図7 「正準運動エネルギー」の長時間平均 $\overline{K_i^{(c)}}$ 。時系列は図6と同じものを使用。一般化されたエネルギー等分配則が成立していることがわかる。[KY09]

5.3 解析的アプローチ

ここでは、これまで得られた結果を解析的に理解することを試みる。温度 T での熱平均値を

$$\langle \dots \rangle \equiv \frac{1}{Z} \int \dots e^{-\beta H} d\Gamma \quad (9)$$

($\beta \equiv 1/k_B T$) と定義すると、質点 i の運動エネルギーの平均値は

$$\langle K_i \rangle \equiv \left\langle \frac{m_i}{2} (\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2) \right\rangle \quad (10)$$

$$\begin{aligned} &= \left\langle \frac{m_i}{2} (\dot{X}_G^2 + \dot{Y}_G^2) \right\rangle + \left\langle \frac{m_i}{2} \left(\sum_{j,k=1}^{N-1} a_{ij} a_{ik} \cos(\varphi_{jk}) \dot{\varphi}_j \dot{\varphi}_k \right) \right\rangle \\ &= \frac{m_i}{M} k_B T + \frac{m_i}{2} \sum_{j,k=1}^{N-1} a_{ij} a_{ik} \langle \cos(\varphi_{jk}) \dot{\varphi}_j \dot{\varphi}_k \rangle \end{aligned} \quad (11)$$

と求まる。ここで X_G, Y_G は重心の X および Y 座標である。第2項に対して各リンクがそれぞれ統計的に独立に回転すると近似すると、計算の後、 $m_i = m$ (等質量) の場合には

$$\langle K_i \rangle = \frac{m_i}{M} k_B T \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[\sum_{j=1}^{i-1} \left(\frac{j}{N-j} \right) + \sum_{j=i}^{N-1} \left(\frac{N-j}{j} \right) \right] \right\} \quad (12)$$

となり、

$$\langle K_1 \rangle > \langle K_2 \rangle > \dots < \dots < \langle K_{N-1} \rangle < \langle K_N \rangle \quad (13)$$

すなわち、両端ほど平均運動エネルギーが大きいことが示された [KY09]。

分岐がある場合など、一本鎖以外の形状の場合でも、リンクの独立性が仮定できる場合には同様に議論することができる。質点は軽い剛体棒で連結され、質点の位置 $\vec{r}_i$ が重心の位置 $\vec{r}_G$ と各剛体棒の向きを表す単位ベクトル $\vec{s}_j$ を用いて $\vec{r}_i = \vec{r}_G + \sum_{j=1}^{N-1} a_{ij} \vec{s}_j$ と表されたとしよう。(図8) これは係数 a_{ij} の定義である。 a_{ij} は φ を

含まない。このとき、質点 i の平均運動エネルギー $\langle K_i \rangle$ の近似的表式は、上記の係数 a_{ij} および各質点の質量 m_j を用いて

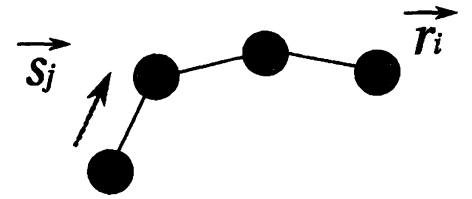


図8 質点の位置 $\vec{r}_i$ と剛体棒の向き $\vec{s}_j$

$$\langle K_i \rangle = \frac{m_i}{M} \cdot \frac{D}{2} k_B T + k_B T \sum_{j=1}^{N-1} \frac{m_i a_{ij}^2}{\sum_{n=1}^N m_n a_{nj}^2} \quad (14)$$

と表される。ここで 1 項目の D は空間の次元であり、重心の運動エネルギーの平均値から来る。この結果は 1 本鎖の場合の式 (12) を含む。

6 非束縛系 (バネでつながれた質点)

6.1 束縛系と非束縛系の違い

これまで、各質点の運動エネルギーの平均値 $\overline{K_i}$ が末端で増大することを見てきた。系には

$$|\vec{r}_{i+1} - \vec{r}_i| = \ell_i \quad (15)$$

という束縛条件が課されている。その結果、運動エネルギーに座標が含まれてしまい、エネルギー等分配則が拡張された形になる。すなわち、端的に言えば、 K_i が熱平衡状態でも等しい値をとらないのは、束縛条件 (15) のためである。式 (15) は、質点間をつないでいるのは剛体棒であることを意味する。

ところが、質点間を結ぶのが剛体棒ではなくバネである場合、エネルギー等分配則は、そのばね定数の値にかかわらず、見慣れた

$$\left\langle \frac{m_i}{2} v_i^2 \right\rangle = \frac{1}{2} k_B T \quad (16)$$

となる。すなわち、自然界では、これまで見てきたような末端でのエネルギー過剰は、少なくとも熱平衡状態では見られないことになる。

しかし、緩和の過程で過渡的にエネルギー過剰が見られることはあり得る。以下では、バネで質点が鎖状につながれた系での運動エネルギーを調べていく。

6.2 モデル

図 9 にモデルの概要を示す。 N 個の質点がばねで 1 列につながれており、質点は平面内を自由に動くことができる。これは束縛系のモデルでの剛体棒をばねに置き換えたものである [KY10]。こうして系は束縛がなくなるので「非束縛系」と呼ぶ。

系のラグランジアンは下記のように書かれる。

$$L = \sum_{i=1}^N \frac{m}{2} (\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2) - \sum_{i=1}^{N-1} \frac{k}{2} \{ |\vec{r}_{i+1} - \vec{r}_i| - \ell_i \}^2 - \sum_{i=1}^N U(\{r_i\})$$

$\vec{r}_i \equiv (x_i, y_i)$, $U(\vec{r})$: (外場、角運動量が保存しないように。)

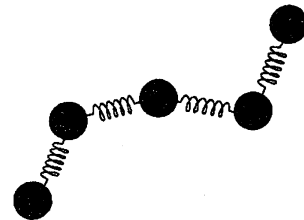


図 9 spring-chain model.

6.3 シミュレーション

シミュレーションは以下の条件で行った：
 $N = 6$ (特に他に記していない場合), 4 次の symplectic integrator、質量はどれも同じ $m_i = 1$ ($i = 1, 2, \dots, N$), 自然長もどれも同じ $l_i = 1$ ($i = 1, 2, \dots, N$)。初期条件は下記の通りである。全てのばねを自然長とし、一直線上に伸ばし

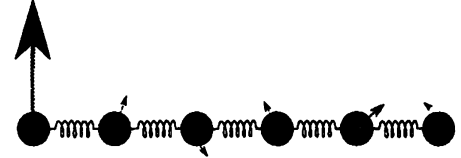


図 10 初期条件

ておいて、末端の 1 粒子にばねと直交する方向に初速度を与えた。他の粒子は静止しているか、または、微小な乱数の初速度を与えた。概要を図 10 に示す。 $N = 8, k = 10^4$ の場合の、各質点の運動エネルギーの平均値を図 11 に示す。初期には束縛系同様に末端で平均エネルギーが大きく、やがて時間が経つと等分配へ近づいていく様子がわかる。

6.3.1 非等分配度

エネルギーが等分配する状態からのずれに関心があるので、「非等分配度」として下記の $\Delta^{(1)}(t)$ および $\Delta^{(2)}(t)$ を計算した [TKG94, TKG96, TKG97, SST00, TMK89]。ここで、 $\langle \dots \rangle_N \equiv \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \dots$ である。エネルギーが等分配されれば $\overline{K_i} = \text{const.} \Rightarrow \Delta^{(1,2)} = 0$ である。

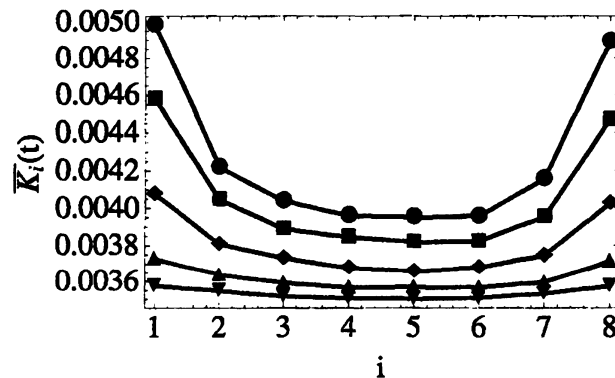
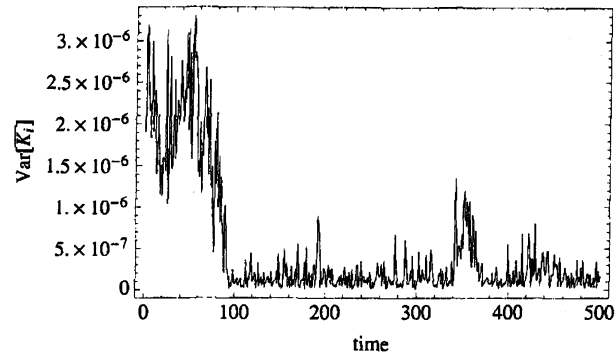


図 11 spring-chain model での運動エネルギーの平均値。 $N = 8, k = 10^4$ 。縦軸： $\overline{K_i}(t) \equiv (1/t) \int_0^t K_i(t') dt'$ 、横軸: 粒子の番号。

図 12 $\Delta^{(1)}$ の時間発展の例

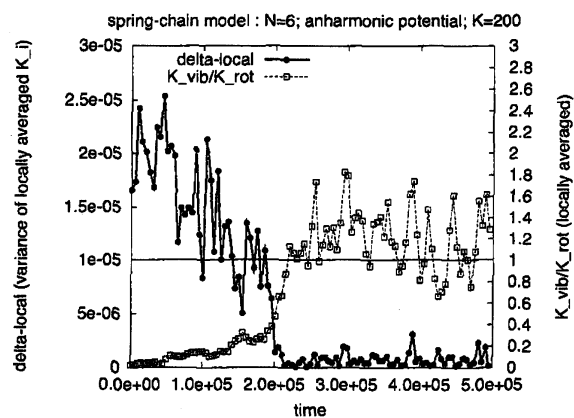
$$\Delta^{(1)}(t) \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\overline{K_i}(t) - \langle \overline{K_j}(t) \rangle_N]^2,$$

$$\Delta^{(2)}(t) \equiv \frac{1}{\tau} \int_t^{t+\tau} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [K_i(t') - \langle K_j(t') \rangle_N]^2 dt'$$

$$\overline{K_i}(t) \equiv \frac{1}{\tau} \int_t^{t+\tau} K_i(t') dt'$$

$$K_i(t) \equiv \frac{m}{2} (\dot{x}_i^2(t) + \dot{y}_i^2(t))$$

初期には等分配されていないが、時間が経つと図 12 のように緩和して等分配することがわかる。

図 13 非等分配度 $\Delta(t)$ (●印、実線) と K_{vib}/K_{rot} (□印、破線) の関係。

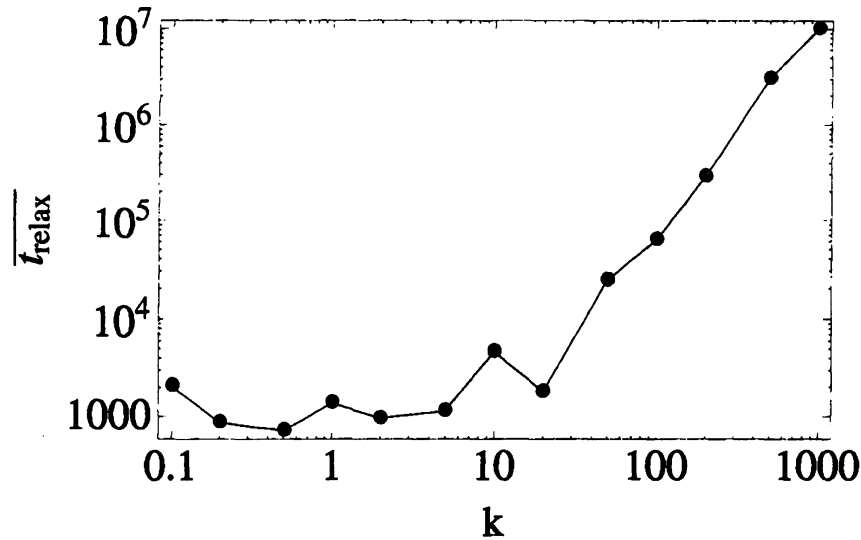


図 14 平均緩和時間のばね定数 k に対する依存性

ハミルトニアンを

$$H = K_{vib}(\{\dot{\ell}_i\}) + K_{rot}(\{\dot{\varphi}_i\}) + H_{int}(\{\dot{\ell}_i\}, \{\dot{\varphi}_i\}) + U$$

のように書いて、振動部分 K_{vib} と回転部分 K_{rot} とを取り出してそれぞれの時間発展を見ると、系が等分配へ緩和するのと並行して、回転から振動へとエネルギーが移行しているのがわかる。(図 13)

6.3.2 平均緩和時間

等分配への緩和時間は初期条件に依存する。図 10 で示す初期条件で、小さな乱数で与えられた初速度を変えてサンプリングすることで、ばね定数の値 k での平均緩和時間を決めることができる。図 14 に、平均緩和時間のばね定数依存性を示す。ばね定数が大きくなり剛体に近づくにつれて、等分配に至るまでの緩和時間が急激に増大する事がわかる。緩和時間が大きいということは、大きなばね定数の場合にはやはり束縛系と同様に末端でのエネルギー過剰が観測される可能性があることを示唆している [KY10]。

6.4 1 本鎖以外の形状の場合

ここまでは質点がばねで 1 次元的に、つまり一本鎖をなすようにしてつながれている系を扱ってきた。実際の高分子などではこれ以外にも分岐があったり環状をなしていたりな

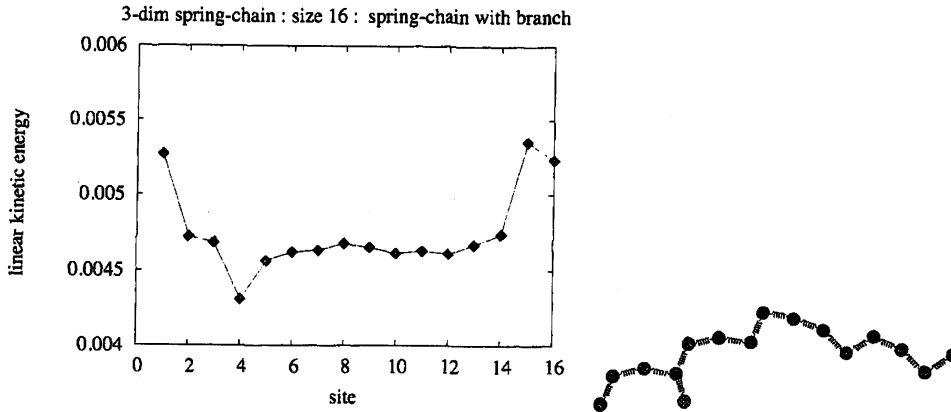


図 15 1 本鎖にもう 1 つ質点を付けた場合: $N = 16$, $k = 10^4$ 。(左) 平均運動エネルギー (右) モデル

どそのトポロジーは様々である。ここではそのような 1 本鎖以外のトポロジーでの場合を簡単に紹介する。

図 15 は、分岐のもっとも単純な場合として、15 個の質点からなる 1 本鎖にもう一つ質点をつけた場合の平均運動エネルギーである。(つまり全粒子数は 16) 付け加えられた質点を $i = N$ としてグラフの一番右端に示す。鎖の両末端とともに、付け加えられた質点でも平均運動エネルギーが増大していることがわかる。また、質点を付け加えられた分岐点にあたる箇所では逆にエネルギーが減少している。分岐点は動きにくくなっていることの反映であろう。

図 16 は、5 個の質点がバネでつながれて出来た環に、3 つの質点からなる鎖を付け加えた系である。この系でも、付け加えた鎖の末端部の平均運動エネルギーが増大している。また、分岐点での平均運動エネルギーは減少している。

6.5 Boltzmann-Jeans 理論による緩和時間の解析

話を戻して、図 14 に見た緩和時間 τ のばね定数 k に対する依存性を理解するために、Boltzmann-Jeans 理論を使う。Boltzmann-Jeans 理論^{*2}とは、大まかに言えば、系内に速い運動と遅い運動が共存している場合、例えば高振動数の運動の凍結のように、それらの間のエネルギー交換は遅くなることを述べたものである [Bol95, Jea03, Jea05, BGG87, BGG89, SS99, SIS06, NK00, MK05]。速い運動が調和振動子の場合、エネルギー移動に

^{*2} Boltzmann-Jeans conjecture という呼ばれ方の方がポピュラーであるが、厳密な証明も得られて既に conjecture ではないので、ここでは「理論」と呼ぶことにします。

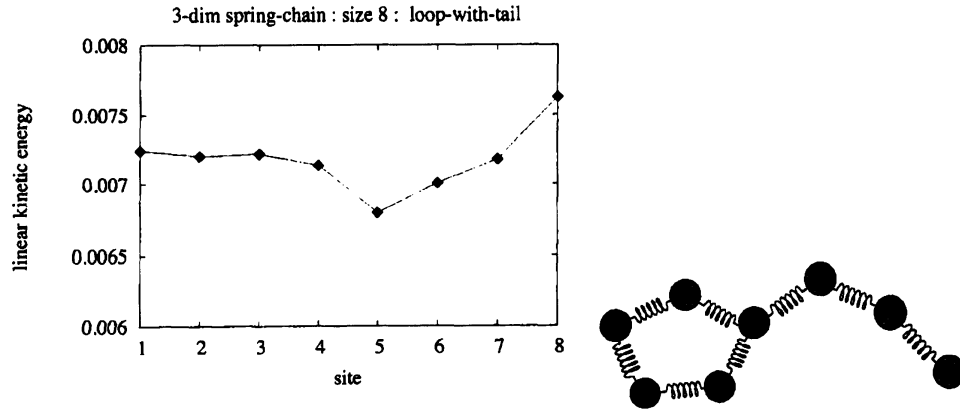


図 16 ループにしっぽがついた場合： $N = 8$, $k = 10^4$ 。(左) 平均運動エネルギー (右) モデル

要する時間を評価することが出来て、タイムスケールの比の指数関数で書くことができる [BGG89] :

$$\text{エネルギー移動に要する時間} \propto \exp\left(\frac{\tau(\text{遅})}{\tau(\text{速})}\right) \quad (17)$$

今の場合、速い運動は硬いバネによる振動なので、そのタイムスケールは $\tau(\text{速}) \sim 1/\sqrt{k}$ と評価できる。遅い運動は系の回転と変形なので、そのタイムスケールを $\tau(\text{遅}) \sim 1$ とする。これから、

$$(\text{緩和時間}) = (\text{束縛系的に振舞う時間}) \propto \exp(c\sqrt{k}) \quad (18)$$

という式が得られる。

この式と図 14 の平均緩和時間とをあわせて描いたのが図 17 である。係数はフィッティングで得た。かなりよく一致しており、 t_{relax} の k 依存性は Boltzmann-Jeans 理論で説明できると言って良い [KY10]。

7 まとめと展望

質点間が軽い剛体棒でつながれたひも状 (鎖状) の束縛系では末端部粒子の平均運動エネルギーが大きくなることを数値的および解析的に示した。

質点間がばね定数 k のばねでつながれたひも状 (鎖状) の系では、 k が大きいとき過渡的に末端部粒子の平均運動エネルギーが大きくなりうる。等分配までの緩和時間は k に対して急速に増大する。Boltzmann-Jeans 理論を用いると緩和時間は $\exp(c\sqrt{k})$ と評価され、数値計算と良い一致をみた。

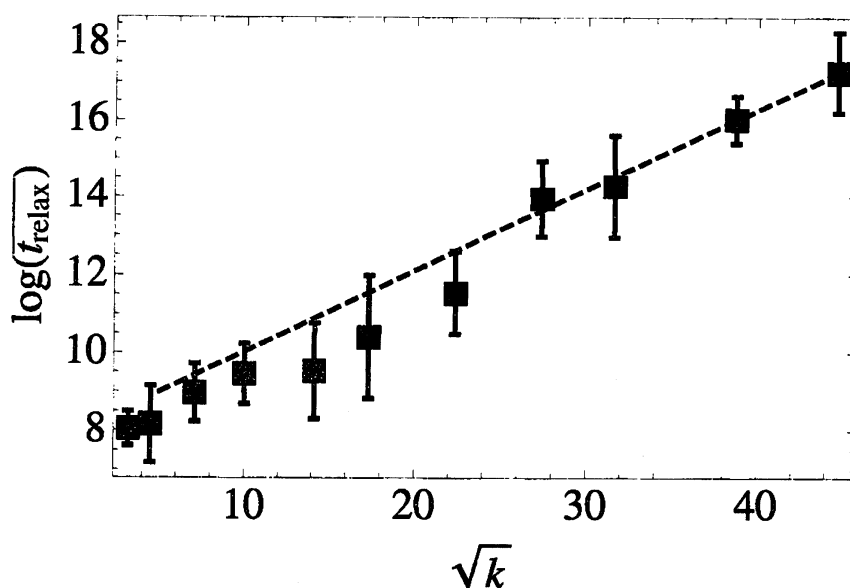


図 17 $N = 6$, サンプル数 15。点線は Boltzmann - Jeans 理論を考えたのフィッティング : $t_{\text{relax}} \sim 5.52 \times 10^4 \exp(0.415\sqrt{k})$ [KY10]

ひも状、鎖状の系において末端部で異常が見られることは、例えば高分子では末端効果として良く知られている。今後は、今回得られた結果とこれらの物理現象との関連、溶媒を含む系での検証、末端でのエネルギー過剰を起こしやすくするためのデザインなどについて考えたい。

謝辞

研究集会世話人の角畠様、研究集会に参加して講演を聞いてくださった皆様、ありがとうございました。いくつか貴重なコメントも頂きました。お礼を申し上げます。名古屋大学全学技術センター河合利秀様には、研究集会当日持参した3重振りを製作して頂きました。ありがとうございました。

参考文献

[BGG87] Giancarlo Benettin, Luigi Galgani, and Antonio Giorgilli. Exponential law for the equipartition times among translational and vibrational degrees of freedom. *Physics Letters A*, Vol. 120, pp. 23–27, 1987.

- [BGG89] G. Benettin, L. Galgani, and A. Giorgilli. Realization of homoclinic constraints and freezing of high frequency degrees of freedom in the light of classical perturbation theory. Part II. *Comm. Math. Phys.*, Vol. 121, pp. 557–601, 1989.
- [Bol95] L. Boltzmann. On certain questions of the theory of gases. *Nature*, Vol. 51, p. 413, 1895.
- [Jea03] J. H. Jeans. On the vibrations set up in molecules by collisions. *Phil. Mag.*, Vol. 6, p. 279, 1903.
- [Jea05] J. H. Jeans. On the partition of energy between matter and aether. *Phil. Mag.*, Vol. 10, p. 91, 1905.
- [Kra46] H. A. Kramers. The behavior of macromolecules in inhomogeneous flow. *J. Chem. Phys.*, Vol. 14, pp. 415–424, 1946.
- [KY09] T. Konishi and T. Yanagita. Energetic motions of end-particles in constrained dynamical systems. *Journal of Statistical Mechanics*, p. L09001, 2009.
- [KY10] T. Konishi and T. Yanagita. Slow relaxation to equipartition in spring-chain systems. *Journal of Statistical Mechanics*, p. 09001, 2010.
- [LR04] B. Leimkuler and S. Reich. *Simulating Hamiltonian Dynamics*. Cambridge Univ. Press, 2004.
- [Maz96] Martinal Mazars. Statistical physics of the freely joined chain. *Phys. Rev. E*, Vol. 53, pp. 6297–6319, 1996.
- [MK05] Hidetoshi Morita and Kunihiro Kaneko. Roundabout relaxation: Collective excitation requires a detour to equilibrium. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 94, p. 087203, 2005.
- [NK00] Naoko Nakagawa and Kunihiro Kaneko. Energy storage in a hamiltonian system in partial contact with a heat bath. *J. Phys. Soc. Jpn.*, Vol. 69, pp. 1255–1258, 2000.
- [OY98] Yoshihito Oyama and Tatsuo Yanagita, 1998. talk at the meeting of the Physical Society of Japan.
- [SIS06] A. Shudo, K. Ichiki, and S. Saito. Origin of slow relaxation in liquid-water dynamics: A possible scenario for the presence of bottleneck in phase space. *Europhys. Lett.*, Vol. 73, pp. 826–832, 2006.
- [SOY99] N. Saitoh, Yoshihito Oyama, and Tatsuo Yanagita, 1999. talk at the meet-

ing of the Physical Society of Japan.

- [SS99] 首藤啓, 斎藤真司. 内部自由度をもつハミルトン系の遅い緩和の起源. 物性研究, Vol. 73, pp. 63–83, 1999.
- [SST00] Diane E. Sagnella, John E. Straub, and D. Thirumalai. Time scales and pathways for kinetic energy relaxation in solvated proteins: Application to carbonmonoxy myoglobin. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 113, , 2000.
- [SY00] N. Saitoh and Tatsuo Yanagita, 2000. talk at the meeting of the Physical Society of Japan.
- [TGK96] T. Tsuchiya, N. Gouda, and T. Konishi. Relaxation processes in one-dimensional self-gravitating many-body systems. *Phys. Rev*, Vol. E 53, pp. 2210–2216, 1996.
- [TGK97] T. Tsuchiya, N. Gouda, and T. Konishi. Chaotic itinerancy and thermalization in one-dimensional self-gravitating systems. *Astrophysics and Space Science*, Vol. 257, pp. 319–341, 1997.
- [TKG94] T. Tsuchiya, T. Konishi, and N. Gouda. Quasiequilibria in one-dimensional self-gravitating many body systems. *Physical Review*, Vol. E 50, pp. 2607–2615, 1994.
- [TMK89] D. Thirumalai, Raymond D. Mountain, and T. R. Kirkpatrick. Ergodic behavior in supercooled liquids and in glasses. *Physical Review A*, Vol. 39, pp. 3563 – 3574, 1989.
- [Tol18] Richard C. Tolman. A general theory of energy partition with applications to quantum theory. *Physical Review*, Vol. 11, pp. 261–275, 1918.
- [Tol38] Richard C. Tolman. *The Principles of Statistical Mechanics*. Oxford University Press, Oxford, 1938.
- [久保 61] 久保亮五他. 大学演習 熱学・統計力学, 第 6 章 カノニカル分布の応用 例題 [1]. 裳華房, 1961.