

相空間における運動の強度 Intensity of Motion in Phase Space

新上 和正 (ATR 光電波通信研究所)[†]

佐々田 友平 (湘南工科大学)

多自由度ハミルトン系での運動とそれが持つ多安定領域構造 (many basin structure: basin とは安定な粒子配置に相当するポテンシャル面の領域を指す) が織り成す多様さを議論する. 領域 (basin) の内部の運動と領域の間の三つの型 (I, II, III) の運動の性質を議論する. そして, 運動量空間での緩和運動と位置空間での拡散運動に関係する概念として運動の強度 (intensity of motion) という言葉を導入する. これによって運動の型 II, III で現れる非対称運動 (asymmetric motion) の力学的起源を明らかにする.

以下の内容¹⁾:

§1. 始めに

§2. ハミルトニアンと多安定領域構造

A. ハミルトニアン

B. 計算方法

§3. 運動の振る舞い

A. 内の運動

B. 間の運動

1. 再帰時間

2. シフト写像と分類

3. 三つの運動の型 (I, II, III)

§4. 運動の性質

A. 相対拡散と絶対拡散: 転移点 τ_c の存在

B. Type III の運動: 幾つかの性質

§5. 非対称運動 (Type II と III)

A. トートロジ

B. 2つの時間スケール: pushforward と pullback

C. 運動の強度

D. シミュレーションとの比較: $N=108$ の系E. 更なるシミュレーションとの比較: $N=32$ の系

§6. 議論

§1. 始めに

保存²⁾ ハミルトン系の運動を特に多安定領域構造 (many basin structure) を土台にして議論しよう. 目的は特に §5. の Type I の運動には現れないが他の運動の Type である II, III に見られる非対称運動が現れる力学的起源を運動の強度という概念を導入して説明することである.

このために, 少し冗長になるけれども多安定領域構造に起因する運動とこれに関わる問題を簡単に議論することにしよう.

§2. ハミルトニアンと多安定領域構造

A. ハミルトニアン

ハミルトン系

$$H[p_i, q_i] = \frac{1}{2} \sum_i \left[\frac{p_i^2}{m} + V[q_i] \right], \quad (2.1)$$

$$V[q_i] = \sum_{j(\neq i)}^N v(q_{ij}). \quad (2.2)$$

 d : 実空間の次元数, N : 粒子総数, ($2dN$: 相空間の次元数), p_i : 運動量, q_{ij} : i と j 番目の粒子の位置間の距離,

$v(q)$: 粒子間相互作用, (ポテンシャル面 $V[q_i]$ の空間の次元数は $d(N-1)$ (1 は全粒子に対して一様な変位の自由度).)

$V[q_i]$ に唯一つの安定領域を持つ系: $d=1$ の Lennard-Jones (LJ)³⁾⁻⁵⁾, FUP^{6),7)} 系など.

これ迄の研究課題: 統計性 (エルゴード性) の現れ,⁸⁾ 等分配の法則, 高い周波数モードが Boltzmann-Jeans 凍結,^{9),10)} アーノルド拡散,⁸⁾ ネクロシヨフ評価⁸⁾ など主に KAM トーラスの相空間内の部分的崩壊に関連した問題で, Chirikov¹¹⁾ や Bennetin¹²⁾ ら一連の仕事がある.

$V[q_i]$ に多安定構造を持つ系: $d=2,3$ の LJ 系など (天体系を除く).

安定領域の数 $M[N]: M[N] \simeq e^{\alpha N}$ ($1 \ll N$). (α は系に依存する定数.)^{13),14)}

これらの系では KAM トーラスは現れ難くなり, 寧ろ多安定領域 (many basin) 構造の出現によって運動は多様になる.

B. 計算方法

(i) 周期的境界条件: $V[q_i] = V[q_i + nL]$ (n : 任意の整数)

(ii) $v(q) > -\infty$,

(iii) $v(q)$ は大きい q で q^{-d} より速く減衰する.

(i) の L はポリアル定理¹⁵⁾ により与えられる. (圧力 P を大気圧に等しくするよう L を調節する. 但し, 調節は初期値を創る時ときのみである. その後は L を固定して運動を追跡する.

以下一粒子当たりの平均の運動エネルギー ϵ_K の代りに T を主に使う:

$$T = \frac{2}{3} \epsilon_K. \quad (2.3)$$

運動を主に LJ 型で相互作用する系で調べた.¹⁾ 結果は, 以下の条件を有するクラスの相互作用系でも成り立つように思える.

(1) $V[q_i]$ の深い所と高い所の差が N に比例する,

¹⁾ LJ 系では相互作用

$$v(q) = 4\epsilon_0 [(\sigma/q)^{12} - (\sigma/q)^6] \quad (T.1)$$

と書かれるが, 時間を $t = u_t t'$, 長さを $l = u_l l'$, エネルギーを $E = u_E E'$, 質量を $m = u_m m'$ とすれば, $u_t = \sqrt{\{\sigma^2 \epsilon_0 / m\}}$, $u_E = \epsilon_0$, $u_l = \sigma$, $u_m = m$ なる単位系を選べば無次元のモデル系 (E', l', m', t') が得られる. この報告書は, エネルギーと質量と長さに対しこの基本単位系を用いる. しかし, 時間は計算で用いた時間ステップ ($= 0.01 \times$ (基本単位系の単位時間)) を単位として選ぶ.

(2) $V[q_i]$ が多安定領域を有する,

コメント:

(I) 初期値の設定: 計算機では任意の初期値を与えることが可能. 現実の系でも初期値をある程度指定出来る. 例えば, 10^6 K/秒 程度で急冷することによって得られる金属ガラス¹⁶⁾ は人工的に創られた状態である. 計算は主にランダムな粒子配置に対応する初期値から出発する. (§3. の A でのみ規則的配置を扱う)

(II) 計算について: 代表点の軌道は, 粗い時間間隔でも比較的良い近似解が得られる Verlet の方法²⁶⁾ を使って得られる. (n 階の微分方程式とは離散時間で近似すれば, 内部状態に関して n 次の記憶効果を持つ automaton か, 或は n 倍のセル数を持つ通常の記憶を持たない automaton で解かれる).¹⁷⁾

§3. 運動の振る舞い

A. 内の運動

多くの安定領域構造を持つ場合での軌道不安定性を調べる. 最大リアプノフ数がゼロとなるかゼロでない有限な値を取るかは前節で述べた統計性 (エルゴード性) と関係する. 安定領域は大雑把に分けると粒子の配置の仕方によってランダムな配置を持つものと規則正しい (fcc 構造のような) 配置を持つものとに分類される.

$N=108$ の系に対してランダムと規則的な配置の局所安定領域内で計算した最大リアプノフ数は各々 ($0.0 < T \leq 0.05$) の範囲で

$$\lambda_r(T) \simeq 0.075(T - T_0^r), (T_0^r \simeq 0.0), \quad (3.1)$$

$$\lambda_c(T) \simeq 0.012(T - T_0^c), (T_0^c \leq T; T_0^c \simeq 0.023) \\ \simeq 0.0 \quad (T \leq T_0^c). \quad (3.2)$$

従って,

(1) ストキャスティック転移点 (T_0^r, T_0^c) は粒子配置に依存性がある.

(2) ランダム状態では規則状態に比べより強い軌道不安定性を持つ.

(T_0^c の系のサイズ N 依存性を確かめていない. ひょっとすると $N \rightarrow \infty$ で 0 となるかもしれない)

(1) の結果: 規則的配置に対応する安定領域では有限な運動エネルギー $\epsilon_K^0 (= 3T_0^c/2$, 例えば Ar 系で $\simeq 4.3 \text{ K}$) で軌道の不安定性が起こる (ストキャスティック転移と呼ばれる) 転移点が存在する (転移点の持つ意味は文献 3), 5), 27) を参照). 一方ランダム配置に対応した安定領域ではゼロである. $T_0^r (\simeq 0.0)$ はランダム状態に対応した相空間では KAM トーラスが占めている圧倒的に小さいことを示唆する. (構造変化と軌道不安定性は無関係である)

B. 間の運動

1. 再帰時間

運動の分類を何で行なうかという'物差し'についての話. その物差しは再帰時間 t_r であり, この平均の時間に比べ観測時間 t_o が短い時間 ($t_o < t_r$) で運動を眺めたときの分類である.

再帰時間の存在は Poincaré の再帰定理^{18), 19)} による. その平均値の公式は Smolukhovsky²⁰⁾ によって与えられた (役に立たないが). しかし, この公式では N 依存性が分からない. t_r の N 依存性は (導出については述べないが - 恐らく文献があると思われるが)

$$t_r \simeq e^{\beta N} / N \\ \simeq e^{\beta N} \quad (1 \ll N) \quad (3.3)$$

となる. 大きな N ではこれは (屢々宇宙の年齢より長い時間と比喩される) 非常に大きな値になる.

2. シフト写像と分類

代表点 $\{p_i(t), q_i(t)\}$ を一定時間間隔 Δ_t でどの安定領域 (basin) に属するかで表すことによって²¹⁾ (その安定領域をその領域内の最小エネルギー値 V_i で表せば)

$$V_{i+1} = \phi_i V_i \quad (3.4)$$

のシフト写像 $\{\phi_i\}$ を得る.

3. 三つ運動の型 (I, II, III)

(全エネルギーに依存して)

Type I: 高いエネルギーでは代表点は色々な V_i の値を持つ安定領域を通過する. 時間 t 迄に通過する安定領域の数 $s(t)$ は,

$$s(t) = Nc(T)t \quad (3.3)$$

となる.

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 $s(t) = Nc(T)t$ となる. Type I と違う点は, Type I の運動はある時間経過後 (τ^* ; N に依存する) で終わり, 最後は, 数個の安定領域を遍歴する. 運動は相互作用エネルギー (V_i) を低くする方向に進行する. これを非対称運動 (asymmetric motion) と呼ぶ.

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.

§4. 運動の性質

A. 相対拡散と絶対拡散: 転移点 τ_c の存在

絶対拡散 $a(t)$ と相対拡散 $r(t)$ は各々,

$$a_{p,q}(t) = \sqrt{a_p(t)^2 + a_q(t)^2}, \quad (4.1)$$

$$r_{p,p';q,q'}(t) = \sqrt{r_{p,p'}(t)^2 + r_{q,q'}(t)^2} \quad (4.2)$$

で定義される.

$$a_p(t)^2 = \frac{1}{3N} \sum_i |p_i(t) - p_i(0)|^2, \quad (4.3)$$

$$a_q(t)^2 = \frac{1}{3N} \sum_i |q_i(t) - q_i(0)|^2, \quad (4.4)$$

$$r_{p,p'}(t)^2 = \frac{1}{3N} \sum_i |p_i(t) - p'_i(t)|^2, \quad (4.5)$$

$$r_{q,q'}(t)^2 = \frac{1}{3N} \sum_i |q_i(t) - q'_i(t)|^2. \quad (4.6)$$

$p'_i(t), q'_i(t)$ 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である。定義から三角不等式が厳密に成立する。

$$r_{q,q'}(t) \leq \sqrt{a_q(t)^2 + a_{q'}^2(t) + r_{q,q'}^2(0)}, \quad (4.7)$$

$$r_{p,p'}(t) \leq \sqrt{a_p(t)^2 + a_{p'}^2(t) + r_{p,p'}^2(0)}. \quad (4.8)$$

(p1) 位置に関する絶対拡散は、普通、次のように与えられる、

$$a_q(t)^2 \simeq \frac{1}{2} D(T)t \quad (D(T): \text{拡散係数}). \quad (4.9)$$

(p2) Olesedec の定理²²⁾ より、相対拡散は短い時間間隔 t で指数関数的に増大する。

(p1)(p2) の性質により、

$$0 < t < \tau_c \text{ の時間領域で, } r_{q,q'}(t) \simeq r_{q,q'}(0) \exp[\lambda_r t], \quad (4.10)$$

$$\tau_c < t \text{ の時間領域で, } r_{q,q'}(t) \simeq \sqrt{D(T)t} \quad (4.11)$$

なる転移時間 τ_c が存在する。この τ_c は、運動量空間で相対拡散 $r_{p,p'}(t)$ が

$$r_{p,p'}(\tau_c) = \Delta \bar{p} e^{\lambda_r \tau_c} \simeq \sqrt{2T} \quad (4.12)$$

から与えられる。 $(\sqrt{2T})$ は 1 粒子当たりの運動量空間のサイズである。²⁾ よって、

$$\tau_c = \frac{1}{2\lambda_r(T)} \ln\left(\frac{2T}{\Delta \bar{p}^2}\right) \quad (4.13)$$

で与えられる ($\Delta \bar{p} = r_{p,p'}(0)$)。

B. Type III の運動: 幾つかの性質

(0) パースト性 (間欠性)

(1) 強い軌道不安定性: 安定点間の遷移は速い。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) はともに時間 t の指数関数的に増大する。つまり、 $a_q(t) \simeq \exp[\lambda_a t]$, $r_{q,q'}(t) \simeq \exp[\lambda_r t]$. λ_a と 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。

²⁾ 粒子の全部の運動量に対して同様の議論を展開出来る (文献 24)。

(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。)

他の散逸系でも間欠的遷移運動は起こる。

5. 非対称運動 (Type II と III)

A. トートロジ

Type II, III の非対称運動は何故現れるのであるうか。非対称性は $V[q_i]$ を通じて、即ち、位置変数を通じて現れる。ミクロカノニカルの場合に位置変数の区間 $(q_i, q_i + dq_i)$ での分布関数 (滞在時間に比例) は (mixing を前提 とすると)

$$\begin{aligned} \Omega_q &\simeq \int \delta(\epsilon - H[p_i, q_i]) \Pi_i dp_i dq_i \\ &\simeq (\epsilon - V[q_i])^{\frac{dN}{2}-1} \Pi_i dq_i \end{aligned} \quad (5.1)$$

となる。 $V[q_i]$ から $(V[q_i] + \Delta)$ に進む運動の前後での相空間体積比

$$\begin{aligned} \gamma &= \left(1 - \frac{\Delta}{\epsilon - V[q_i]}\right)^{\frac{dN}{2}-1} \\ &\simeq \exp\left[-\frac{\Delta}{\epsilon - V[q_i]} \left(\frac{dN}{2} - 1\right)\right], \end{aligned}$$

$1 \ll dN, \epsilon - V = TdN/2$ の時, Canonical 分布

$$\simeq \exp\left(-\frac{\Delta}{T}\right) \quad (5.2)$$

となり $V[q_i]$ が低い方が滞在時間は長くなる。よって、非対称運動が生じることが結論される。

しかし、これは (5.1) を前提で話しを進めていることに矛盾がある。

B. 2つの時間スケール: pushforward と pullback²³⁾

二つの典型的な場合、即ち、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短時間で通過する場合を考えてみよう。前者の場合は、各粒子は色々な運動量を取りながら代表点は色々な状態を巡るであろう。この時、経巡る運動量 $\{p_i\}$ の相空間の体積は上で与えたように $\Omega_p \simeq (\epsilon - V[q_i])^{dN/2-1}$ で与えるだろう。一方後者の場合では、短時間では各粒子の運動量は殆んど変わりがなく一つの安定領域のサイズを拡散する。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、 $\Omega_p \simeq (\epsilon - V[q_i])^{dN/2-1}$ の運動量の相空間の体積をサンプルしないうちに他の安定領域に移動する。

二つの場合は、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、代表点が運動量の相空間の体積をサンプルする (運動量 $\{p_i\}$ の運動と関係する) 時間スケール τ_p と一つの安定領域のサイズを拡散する (これは位置 $\{q_i\}$ の運動と関係する) 時間スケール τ_q である。

このことは次のことを意味する。(5.1) は運動量空間での mixing が完了する時間 τ_p に比べ位置空間で

有意な $V[q_i]$ の変化を与える時間 τ_q に比べ $\tau_p \leq \tau_q$ であるなら (5.1) で表されているように運動量空間に関して測度の push forward が起こる.²³⁾ このような測度の push forward/pull back とそれが運動自身に跳ね返るかどうかの時間スケールが τ_p, τ_q である.

C. 運動の強度

多様な運動が絡み合うために運動に形態変化が現れる. その変化を表す概念として運動の強度という言葉を導入する. 前節では運動量空間での運動と位置空間での運動が運動に変化を及ぼす. この時, その度合いを

$$\sigma(T) = \frac{\tau_p}{\tau_q}, \quad (5.3)$$

(τ_q と τ_p は上記の二つの時間スケール) で与え,

$$\sigma(T) > 1 \rightarrow \text{Type I}$$

$$\sigma(T) < 1 \rightarrow \text{Type II, III}$$

に相当し, $\sigma(T)=1$ の転移点が Type I と Type II, III の運動の境界であるというのが我々の主張である.

二つの時間スケール τ_q と τ_p を与えよう. τ_p を τ_c と見做せば,

$$\tau_p (= \tau_c) = \frac{1}{2\lambda_r(T)} \ln\left(\frac{2T}{\Delta\bar{p}^2}\right). \quad (5.4)$$

この τ_p は Krylov²⁴⁾ が与えた運動量空間での緩和時間に等価である (彼は全運動量に対する緩和時間を得た).

一方, τ_q は, 代表点が一つの安定領域のサイズを拡散する時間スケールである. 従って, 安定領域の広さを与える長さ ℓ で表せば (4.7)(4.4)(4.9) より,

$$\tau_q = \left(\frac{\ell^2}{3N}\right) \frac{1}{D(T)} \quad (5.5)$$

となる. (5.4)(5.5) を用いると (5.3) は

$$\sigma(T) = \left(\frac{3N}{\ell^2}\right) \frac{D(T)}{2\lambda_r(T)} \ln\left(\frac{2T}{\Delta\bar{p}^2}\right), \quad (5.6)$$

(ℓ : 一つの安定領域の広さを与える長さ; $D(T)$: 拡散係数; $\lambda_r(T)$: 最大リアプノフ数; $\Delta\bar{p}$: 運動量の平均の初期値誤差)

(5.6) の $\sigma(T)$ の表式には安定領域のサイズ ℓ が現れているためにその評価は難しい. (5.5) の τ_q を代表点 $s(t)$ が時間 t の間に通過する局所安定領域の個数 $s(t)$ を使って現象論的に表わす. τ_q の時間で $s(\tau_q) \simeq N$ であることから,³⁾ (3.3) を使えば

³⁾ (5.5) から 1 粒子の各位置変数 (x, y , 又は z) が τ_q の時間に 1 つの安定領域を横切る平均時間程度であることが分かる. 各変数が独立にランダムに (この描像は, 例えば拡散定数の T 依存性からサポートされる) 安定領域を横切ると考えれば τ_q の時間に N 個程度の安定領域を横切ることになる.

$$\tau_q \simeq \frac{1}{c(T)}. \quad (5.7)$$

従って⁴⁾

$$\sigma(T) \simeq \frac{c(T)}{2\lambda_r(T)} \ln\left(\frac{2T}{\Delta\bar{p}^2}\right). \quad (5.8)$$

D. シミュレーションとの比較: $N=108$ の系

$N=108$ の系で $\sigma(T)=1$ を満たす転移点 T^* を計算する. 計算された τ_p, τ_q は図 1 に与えてある. 計算された $c(T)$ は

$$c(T) = \frac{\sqrt{T}}{5.814959} e^{-2.16/T} \Delta_t \quad (5.9)$$

である (Δ_t は単位時間: 注 1 を見よ). また,

$$\Delta\bar{p} = \frac{h}{L} \quad (5.10)$$

$L=1\text{cm}$ (系のサイズ), $h=\text{Planck 定数}$ と取れば,²⁴⁾ $\ln(\Delta\bar{p}) \simeq -18.8850$ となる. $\sigma(T)=\tau_p/\tau_q=1$ なる転移点は $T^* \simeq 0.48$ である.

一方計算機シミュレーションでは,

1 回目	$T^*=0.55$
2 回目	$T^*=0.55$
3 回目	$T^*=0.50$
4 回目	$T^*=0.50$
5 回目	$T^*=0.50$

となり, 理論値との一致は良い.

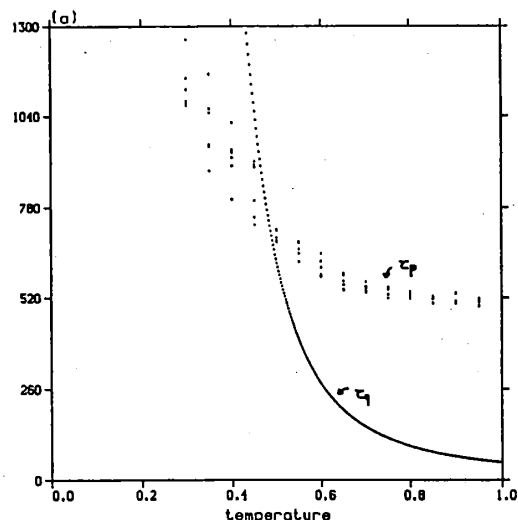


図 1. LJ 系での τ_p と τ_q の T の関数形. 粒子数は 108 である. 縦軸は Δ_t を単位時間に測る. (単位系は注 1 を見よ). $\sigma(T^*)=\tau_p/\tau_q=1$ なる転移点

⁴⁾ 逆に (5.5) と (5.7) から安定領域のサイズとして

$$\ell^2 \simeq 3N \frac{D(T)}{c(T)} \quad (T.2)$$

が得られる.

は $T^* \approx 0.48$ である. 転移点の位置は主に T に対して急激な関数である τ_q で決まる.

E. 更なるシミュレーションとの比較: $N=32$

他の (Stillinger-Weber の) 系での比較を行う.²⁵⁾ 使った系の粒子間相互作用は

$$v(q) = A(q^{-12} - 1)e^{1/(q-q_0)} \quad (0 < q < q_0) \\ = 0 \quad (q_0 \leq q) \quad (5.11)$$

($A=8.805977$; $q_0=1.652194$; 質量 $m=1$) で $N=32$ の場合である. 彼らが計算している (τ_q 自身を直接計算しているのではないが)

$$c(T) = \frac{\sqrt{T}}{126.325} e^{-2.163/T} \Delta_t \quad (5.12)$$

($\Delta_t=0.01$: 単位時間) を使い, τ_p は新たに計算した結果が図 2 に与えてある. この時, 理論値 $T^* \approx 1.6-1.7$, また, 計算機シミュレーション ≈ 1.5 である. 驚くほどの一致である.

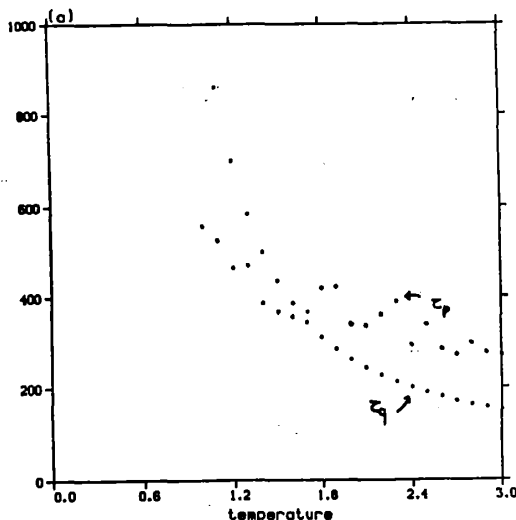


図 2. LJ 系 (相互作用の型は (5.11) に与えられる) での τ_p と τ_q の T の関数形. 粒子数は 32 である. (人工的な系である為に秒には直せないが) 時間は $\Delta_t=0.01$ を単位時間に測る. $\sigma(T^*)=\tau_p/\tau_q=1$ なる転移点は $T^* \approx 1.6-1.7$ である.

§6. 議論

(1) 運動の強度 $\sigma(T)$ で運動量と位置の運動の非対称性について: 運動量空間での運動は mixing, 位置空間では拡散運動である (どちらの空間でも代表点の集合の運動を考えている). 運動量と位置の変数はカノニカル変換で相互に乗り移れる.⁵ 従って運動量と位置空間の運動は $\sigma(T)$ に対称的に入るべきであるように思われる. しかし, 現れる非対称性はハミルトニアンに入る運動量変数と位置変数の関数形の差による.

⁵ 例えば, $\{p_i, q_i\}$ から $\{p'_i, q'_i\}$. ここで $p'_i = -q_i, q'_i = p_i$ なる変数を採用する.

ハミルトニアンでは, $(q_i$ を含む) $V[q_i]$ は一般に複雑な関数形をしている. この関数形の差により q_i は大きく変化してもエネルギーの増大に必ずしも伴わない. よって q_i に比べ p_i は動ける領域が狭くなるために, より速い緩和 (記憶の喪失) が生じる. 緩和の速さの違いが運動の強度の表式に運動空間と位置空間の運動の非対称性を齎した.

仮に運動量変数を含む部分に多安定領域構造が現れ, 位置変数が単調な関数であるようなハミルトニアンを考えれば, τ_q に mixing, τ_p に拡散運動が入ってくる. §4 の τ_c の転移点の存在と運動量空間か位置空間のどちらの運動が τ_c の原因なのか (いまの場合は運動量空間である) は主要な結果の一つである.

(2) Type I の現れるエネルギー領域での水の運動は,^{28), 29)} (一見して) ここで述べた Type III の運動に相当するものようである. 尤も, これはある安定領域の近くに LJ 系のようにより低いエネルギーを持つ安定領域が無いだけで, より長い時間に渡って見れば LJ 系と同じかもしれない.

(3) 非対称運動による位置空間のエントロピー減少: 「最初に箱の右半分に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」の例えで屢々不可逆性が語られる. これは初期状態と終状態でのマイクロ状態数の比は 1 対 2^N (N : 粒子数) と圧倒的に終状態が大きい為に元に戻る確率は小さい.

Type II, III で現れる非対称運動の初期状態はランダムな粒子配置をもつ状態であり, 一方終状態に対応するものは規則的な粒子配置を持つ状態である. この初期と終状態での配置の数の比はラフに $e^{\alpha N}$ (α : 適当な定数) 対 1 となる (ランダムな配置数は規則的な配置数に比べ圧倒的に多い). 上記の不可逆性の例とは逆に配置数の圧倒的に少ない単一方向に運動が進む.

この理由は, ランダムな配置は規則的な配置に比べ配置数は圧倒的に多いにも拘らず, 逆にランダムな配置を持つ状態の運動量は小さく, 規則的な配置では運動量が大きくなる. このために, 位置空間のランダム配置では空間体積は大きい運動量空間での空間体積は小さくなる ((5.1) を参照). 一方, 位置空間の規則的な配置では空間体積は小さい運動量空間での空間体積は大きくなる. 位置空間と運動量空間の体積を掛け合わせたものがランダム配置より規則的な配置を持つ相空間の体積が (圧倒的に) 大きくなるからである.

でも, 何故 '運動の強度 (intensity of motion)' なのか?

† 電子メール: shinjo@atr-rd.atr.co.jp

参考文献

- 1) 新上和正, 物性研究, 12, 269 (1992). (多くの部分を共通する)

2) 他の場合, 例えば摩擦項を含む時には

$$L[\dot{q}_i, q_i] = \sum_i \left(\frac{1}{2} \dot{q}_i^2 - v[q_i] + \dot{q}_i \int_0^t g_i(t') dt' \right)$$

($\dot{q}=dq/dt$) の Lagrangian から導かれる。これから $(d/dt)(\partial L/\partial \dot{q}_i) = \partial L/\partial q_i$, 即ち $\dot{q}_i + g_i(t) - f_i = 0$ ($f_i = -\partial v/\partial q_i$). Hamiltonian は $H = \sum_i \dot{q}_i p_i - L[\dot{q}_i, q_i]$ ($p_i = \partial L/\partial \dot{q}_i = \dot{q}_i + \int_0^t g_i(t') dt'$) で与えられる。 H を計算すると

$$H = \sum_i \left(\frac{1}{2} (p_i - \int_0^t g_i(t') dt')^2 + v[q_i] \right).$$

従って, 正準方程式は $\dot{q}_i = \partial H/\partial p_i = p_i - \int_0^t g_i(t') dt'$, $\dot{p}_i = -\partial H/\partial q_i = f_i$. これは Lagrangian から得られた運動方程式と一致する。摩擦項が速度に比例する場合は $g_i(t) = \lambda \dot{q}_i(t)$ である。

- 3) Bocchieri P., Phys. Rev., A2, 2013 (1970).
- 4) Carotta M. C., Ferrario C., Lo Vecchio G., and Galgani L., Phys. Rev. A17, 786 (1978).
- 5) Casartelli M., Diana E., Galgani L., and Scotti A., Phys. Rev. A13, 1921 (1976).
- 6) Fermi E., Pasta J., and Ulam S., in *Ulam S.: Sets, Numbers, and Universes* ed. Berger W.A. et al. (MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1974) p490; Lect. Appl. Math., 15, 143 (1974).
- 7) Galgani L. and Lo Vecchio G., Nuovo Cimento B52, 1 (1979).
- 8) Benettin G., Proc. Inter. School Phys. - Enrico Fermi Course XCVII, ed. G. Ciccoliti and W. Hoover, 15 (1988).
- 9) Boltzmann L., Nature 51, 413 (1895).
- 10) Jeans J.H., Philos. Mag. 6, 279 (1903); Philos. Mag., 10, 91 (1905).
- 11) Izrailev F.M. and Chirikov B.V., Sov. Phys.-Dokl., 11, 30 (1966).
- 12) Benettin G., Prog. Theor. Phys. Suppl., No. 116, 207 (1994). (多数の文献あり)
- 13) Amar F.G. and Berry R.S., J. Chem. Phys. 85, 5943 (1986).
- 14) Jellinek J., Adv. Chem. Phys. 70, (Part 2), 75 (1988).
- 15) $3PL^3 = \langle \sum_i^N p_i \cdot \frac{\partial H}{\partial p_i} \rangle - \langle \sum_{i < j}^N q_{ij} \cdot \frac{\partial H}{\partial q_{ij}} \rangle$.
- 16) 例えば, 北田正弘, 未来をひらく新材料 - アモルファス (日経サイエンス社, 1984).
- 17) Automaton については, 例えば, Minsky M. L., 計算機の数学的理論 (近代科学社, 1967).
- 18) Hagihara Y., in *Celestial Mechanics V, 2* (Japan Society for the Promotion of Science, 1976) p1245.
- 19) ザスラフスキー G.M., 'カオス' (現代好学社, 東京, 1989).
- 20) Smolukhovsky M. von, Annalen d. Physik, 21, 756 (1906).
- 21) Stillinger F. H. and Weber T. A., Phys. Rev. A25, 978 (1982); Science 225, 983 (1984).

- 22) Olesedec V. I., Ttrans. Moscow, Mathy. Soc., 19, 197 (1978).
- 23) Guillemin V. and Sternberg S., in *Geometric Asymptotics* (American Mathematical Society, 1977) p303.
- 24) Krylov N. S., in *Works on the Foundations of Statistical Physics* (Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1979) p200.
- 25) Stillinger F.H. and Weber T.A., Phys. Rev. A28, 2408 (1983).
- 26) Verlet L., Phys. Rev. 159, 98 (1967).
- 27) Pelti M., Phys. Rev. E47, 828 (1993).
- 28) Ohmine I. and Tanaka H., Chem. Rev. 93, 2545 (1993).
- 29) 大峰巖, 物性研究, 56, 269 (1991).