OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	高次元系のダイナミクス ： 相空間における運動の強度
Author(s)	新上, 和正
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1998, 109, p. 30-39
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/66292
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

高次元系のダイナミクス:
相空間における運動の強度

新上 和正 (ATR 環境適応通信研究所)[1]

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 (1,2,3) 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 2,3 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 (1,2,3)
§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 3 の運動: 幾つかの性質
§5. 非対称運動 (type 2 と 3)
A. トートロジ
B. 2 つの時間スケール: pushforward と pull-back
C. 運動の強度
D. シミュレションとの比較: 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. 自律運動と最適化問題
A. 最適化問題
B. 結晶化機械
C. 運動の強度と最適化機構
§7. 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 1 の運動には現れないが他の運動の type である 2,3 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解明することである.

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

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

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

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 $d(N\text{-}1)$ (1 は全粒子に対して一様な変位の自由度).)

$V[q_i]$ に唯 1 つの安定領域を持つ系: d=1 の Lennard - Jones (LJ) [3)-5)], Fermi-Pasta - Ulam (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] ネクロショフ評価 [8] など主に KAM (Kolomogorov-Arnold - Moser) トーラスの相空間内の部分的崩壊に関連した問題で, Chirikov[11] や Bennetin[12] 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

[1] 平成 8 年 4 月に「適応的通信システム」の基盤研究所 (期間 7 年間) として発足した. そして, 平成 8 年 7 月に NEC 社の SX-4/8 のスーパーコンピュータを導入した.

(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 はビリアル定理[15] により与えらる. (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 ϵ_K の代りに T を主に使う:

$$T=\frac{2}{3}\epsilon_K. \tag{2.3}$$

運動を主に LJ 型で相互作用する系で調べた.[2] 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,

(2)$V[q_i]$ が多安定領域を有する.

コメント:

(I) vector-parallel 型計算機に向いた計算: この系の粒子数 N は 32, 108, 250, 864 である. 相空間の次元数はそれらを 6 倍した数の 192, 648, 1500, 5184 である. このような極めて多自由度で非線型の強い系の性質を調べるために諸種の量 (Lyapnov 数, basin の構造とサイズ, 拡散係数, 等) を大量に且つ速く計算して行くことが必要である. このため vector 化と並列化のに適したプログラムを書くことに注意を払った. また, 多重 Do loop も可能な限り速く処理するようにに工夫した. これにより vector 化率は大体 95 % 程度になった. 計算時間は 1 週間程度から長いモノで 1ヶ月程度であった. (これは特に vector 化率を上げ易い系であったことが幸いであった. これに反して通信ネットワークのような個別性の強い多種の要素からなるような並列分散系のシミュレーションでは vector 化が容易でない.)

(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 階の微分方程式はと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]

(III) 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, 10^6K/ 秒程度で急冷することで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)

[2]LJ 系では相互作用

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

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×(基本単位系の単位時間)) を単位として選ぶ.

§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従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

$$\lambda_r(T)\simeq 0.075(T-T_0^r),\ (T_0^r\simeq 0.0), \tag{3.1}$$

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

$$\simeq 0.0\ \ (T\leq T_0^c). \tag{3.2}$$

従って,

(1) ストキャスティク転移点 (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 $N\to\infty$ 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 ϵ_K^0($=3T_0^c/2$, 例えば Ar 系で $\simeq$4.3K) で軌道の不安定性が起こる (ストキャスティク転移と呼ばれる) 転移点が存在する (転移点の持つ意味は文献[3),5),27)] を参照). 一方ランダム配置に対応した安定領域ではゼロである. T_0^r($\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'について話す．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 Poincarè の再帰定理[18),19)] による．その平均値の公式は Smolukhovsky[20)] 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[30)] と思われるが)

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

となる．大きな N ではこれは (屡々宇宙の年令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値 V_i で表せば)

$$V_{i+1} = \phi_i V_i \tag{3.4}$$

のシフト写像 $\{\phi_i\}$ を得る．

3. 三つ運動の型 (1,2,3)

(全エネルギに依存して)

type 1: 高いエネルギ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，

$$s(t) = Nc(T)t \tag{3.3}$$

となる．

type 2: 中間のエネルギ領域では，初めのうちは type 1 と同様に，通過する安定領域の数は $s(t)=N c(T)t$ となる．type 1 と違う点は，type 1 の運動はある時間経過後 ($\tau^*;N$ 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 (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 3: 低エネルギ領域では，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 2 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，

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

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

で定義される．

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

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

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

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

$p'_i(t), q'_i(t)$ 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．

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

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

(*p1*) 位置に関する絶対拡散は，普通，次のように与えられる，

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

(*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,

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

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

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

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. [3]) よって,

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

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

B.type 3 の運動: 幾つかの性質

(0) バースト性 (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.

(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, 小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 2 と 3)

[3]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).

A. トートロジ

type 2,3 の非対称運動は何故現れるのであろうか. 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)

$$\Omega_q \simeq \int \delta(\epsilon - H[p_i, q_i]) \Pi_i dp_i dq_i$$

$$\simeq (\epsilon - V[q_i])^{\frac{dN}{2}-1} \Pi_i dq_i \qquad (5.1)$$

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

$$\gamma = (1 - \frac{\Delta}{\epsilon - V[q_i]})^{\frac{dN}{2}-1}$$

$$\simeq exp[-\frac{\Delta}{\epsilon - V[q_i]}(\frac{dN}{2} - 1)],$$

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

$$\simeq exp(-\frac{\Delta}{T}) \qquad (5.2)$$

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 pullback[23)]

二つの典型的な場合, 即ち, 代表点が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 $\Omega_p \simeq (\epsilon\text{-}V[q_i])^{dN/2-1}$ 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, $\Omega_p \simeq (\epsilon\text{-}V[q_i])^{dN/2-1}$ 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

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

(τ_q と τ_p は上記の二つの時間スケール) で与え,

$$\sigma(T) > 1 \rightarrow type\ 1$$

$$\sigma(T) < 1 \rightarrow type\ 2,3$$

に相当し, $\sigma(T)$=1 の転移点が type 1 と type 2,3 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,

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

この τ_p は Krylov[24] 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を ℓ で表せば (4.7)(4.4)(4.9) より,

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

となる. (5.4)(5.5) を用いると (5.3) は

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

(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い. (5.5) の τ_q を代表点が時間 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,[4] (3.3) を使えば

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

従って[5]

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

D. シミュレションとの比較: 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

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

である (Δ_t は単位時間: 注 1 を見よ). また,

$$\Delta\bar{p} = \frac{h}{L} \tag{5.10}$$

L=1cm(系のサイズ), h=Planck 定数と取れば,[24] $ln(\Delta p) \simeq -18.8850$ 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

[4](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.

[5]逆に (5.5) と (5.7) から安定領域のサイズとして

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

が得られる.

となり, 理論値との一致は良い.

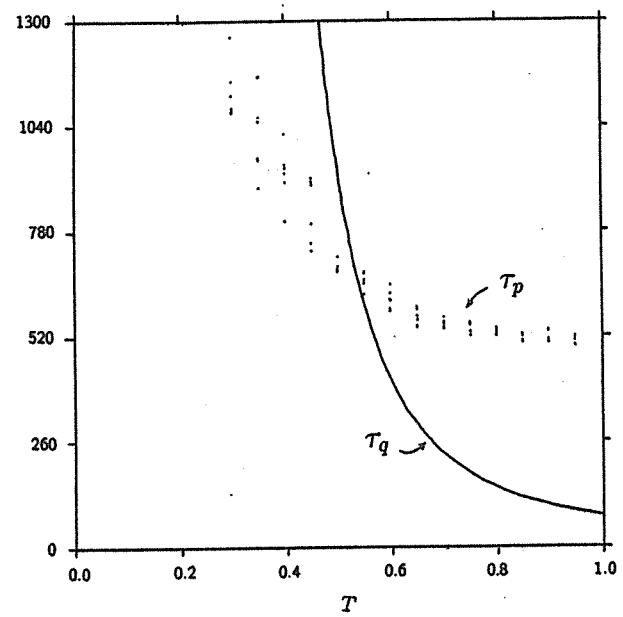

図1. LJ系でのτ_pとτ_qのTの関数形. 粒子数は108である. 縦軸はΔ_tを単位時間に測る. (単位系は注1を見よ). $\sigma(T^*)=\tau_p/\tau_q=1$なる転移点は$T^*\simeq 0.48$である. 転移点の位置は主に, Tに対して急激な関数であるτ_qで決まる.

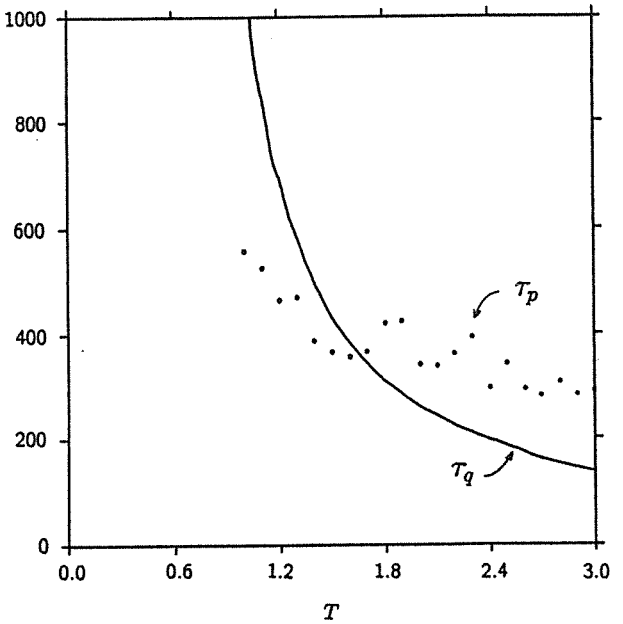

図2. LJ系(相互作用の型は(5.11)に与えられる)でのτ_pとτ_qのTの関数形. 粒子数は32である. (人工的な系である為に秒には直せないが)時間は$\Delta_t=0.01$を単位時間に測る. $\sigma(T^*)=\tau_p/\tau_q=1$なる転移点は$T^*\simeq 1.6$-1.7である.

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

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

(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)

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

(Δ_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^*\simeq$1.6-1.7, また, 計算機シミュレーション$\simeq$1.5である. 驚くほどの一致である.

§6. 自律運動と最適化問題

最適化問題と意味変数に余分な変数を加えた高次元空間で構成することにより得られる自律運動を議論しよう. また, NP完全性問題との関連を議論する.

A. 最適化問題

一見最適化問題に帰着されるように見えながらそうではない問題がある. 例えば, 物質(システム)設計は, ある所望の性質を最大にする物質(材料ではない: 既に機能という性質を含んでいる)を得るための考えと方法を与えることであるが, 「ある所望の性質を最大にする」というところは確かに通常の最適化問題となる. しかし, この問題で更に肝心なことは最適化問題に対する物質変数の取り得る領域を, 実際に合成出来るか自然に存在する物質であるかなどを拠り所として確定することにある.[31] 従ってより一般的に'最適化問題を解く'とは解を求めることと定義域を確定することを共に考えなければならない.

この節の内容は, モデルは自然により模倣され得るのか(普通ならモデルが自然を模倣するとなるであろうが)? 或は, 自然はNP完全問題を解き得るか? という期待と高次元系の運動の理解とクロスした領域での研究の一部である.

ある(特にyes-noで答えられる)問題がNP完全[32]であるとは(1)NP問題である - 非決定性計算モデルで多項式時間計算量で解ける, (2)全NP問題からその問題に多項式時間内で還元可能な写像 /

アルゴリズムが存在するような問題である．この際重要なことは全ての問題(各問題を構成する例題の全部)が対象としている問題(例題の集合)の上に多対1または1対1で写像されることである．つまり，対象とする問題が多項式時間還元可能という条件の下で全てのNP問題の例題を含むような'より広い'問題であるならNP完全である．全て(∀)という意味はあるパラメタ値を持つ問題のある(∃)例題が偶々解くことが出来たからと言ってNP完全問題が解けたことにはならないということを含んでいる．最初のNP完全な問題は充足可能性問題である(Cookの定理).[33] 証明のエッセンスは多項式時間計算量で任意の問題を非決定性チューリング機械で受理する動き(内部状態とテープ上の空白を除く記号列の時間変化)をある型のブール代数式で(模倣する)書けることである．(そのブール代数式は充足可能性問題の部分集合を構成し，多対1になっている)

B. 結晶化機械

自然現象である結晶化とは相互作用する多数の粒子は相互作用エネルギを最小にする(と思える)配置に収斂して行くことである．「結晶配置に比べより低い相互作用エネルギを持つ他の構造配置があるかどうか」という問題が(1)NP問題であることを示すことは容易である．(2)既知のNP完全問題がこの問題の上に多項式時間計算量でチューリング機械によって受理される決定性アルゴリズムがあるか どうかが問題となる．この問題に関して二体力で相互作用する原子系の相互作用エネルギ

$$V_N = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N} v(\vec{q}_i - \vec{q}_j) \qquad (6.1)$$

を最低にする配置を決めることがNP困難であることが既に証明[34]されている(NP困難とはyes-no問題のNP完全性の最適化問題版をいう．但し，$v(q)$の形に少し制限があるのが気になるが)．原子の位置はdigit値のみを取ると仮定した場合の簡単な証明の骨子はグラフ$G=(V,E)$の頂点，頂点間を結ぶ各辺に重み$w(e)$ $(\forall e\in E)$を与えると上記の問題は

$$\frac{1}{2}\sum_{e=(i,j)} w(e) = \text{minimal} \qquad (6.2)$$

にするようなn個の点を多数のメッシュ点上に分配するという既知のNP困難な問題と等価になるということである．より一般的な問題はTS (Travelling salesman)問題の特殊ケースとして書けることを利用して証明される．

にも拘らず結晶配置は最低のエネルギを与えるものであると考えられている．もしそうであるなら，この結晶化機械はこの種の最適化問題を解く上で驚くべき能力を持っていることになる．初期配置から結晶配置までの最短距離は$c_1\sqrt{N}$ (N: 粒子総数)である．また，異なる配置の総数は$c_2 2^{\beta N}$である．結晶化が終了するまでの時間をt_cをすれば，その間に初期配置が変化する距離はノーマル拡散の場合には$d(t)=c_3\sqrt{(Nt_c)}$となるので次の不等式が得られる:

$$c_1\sqrt{N} \le d(t_c)\left(= c_3\sqrt{(Nt_c)}\right) \le c_2 2^{\beta N} \qquad (6.3)$$

(c_1,c_2,c_3,β: Nに依存しない定数)．左側の不等式の等式は結晶化が最短時間で終了する場合に成立する．この時間評価は粒子配置が初期配置から出発して全ての粒子配置を順番に巡るような最悪の場合に成立する．各粒子が各々'独立に'動くような場合には単位時間当りNの配置数を巡る．このとき全ての配置を巡る時間は$t_c=c_2 2^{\beta N}/(c_4 N)$で与えられる．この時間は6.3)の右側の等号から来る時間より短くなる．等式の等式は粒子配置が初期配置から出発して全ての粒子配置を経るような最悪の場合に成立する．結晶化がNP問題であることは初期配置から結晶配置までの最短距離は$c_1\sqrt{N}$とNの多項式で表される事実と関連している．また，NP完全であろうことは不等式の右側の最悪の場合に$t_c=c_2 2^{\beta N}/(c_3\sqrt{N})$となることに関係している(NP問題を決定性チューリング機械で解けばexhaustive searchを反映して$2^{p(N)}$時間要する($p(N)$: Nの多項式)ことを思い浮かべよ)．結晶化がNに依存しないで有限時間内で終わるということは上記の不等式でいえば左側の不等式を使っていることになる．$d(t)$のN依存性と最短距離のN依存性が異なるなら，例えば仮に$d(t)=c_3 N^{\delta}$ $(\delta<1/2)$であるなら大きなNに対する系では結晶化は起こらない筈である．逆に$\delta=1/2$

であることは結晶化がほぼ最短距離上を走ることによって起こっていることを意味する．結晶化は不要な粒子配置をスキップする自律運動の機構，即ち，非決定性チューリング機械の各計算ステップで最も効率的な動作の選択に相当する'見えざるswitching'を行う機構 - これが節5.Cの運動の強度の内容である - が内在されていることになる(これはソフト・レベルで対応可能である)．どれ程結晶性が完全かという確認は実験的にはポジトロンを使って行うことが出来て欠陥の存在確率は精度的には10^{-4}%程度以下で確認されているようである．結晶化機械のこの驚くべき能力は，この報告書の副題である'高次元化と自律運動'に関係している．

最適化問題では意味空間に於けるメジャー・ゼロの集合の扱いが重要となる.[35] 結晶化はエネルギを与える粒子配置に対応する意味変数の他に運動量変数を加えて，高次元化された相空間での運動である．一般的には(neural netsでも可能だろう)意味変数の他に余分な変数が加わることによって，意味変数空間で'解'に相当する領域は非常に小さい(大きければ話しが簡単である)にも拘わらず高次元空間では'解'に相当する体積を非常に大きくなる．つまり，意味空間での領域は非常に微細であるにも拘わらず運動量空間で体積が非常に拡大することによって結晶化機械の能力が際立たものとなっている(図3)．逆に運動量空間が収縮していて意味空間が拡大されている場合が粒子ガラスに対応している．この様子は屡々不可逆性の例として持ち出される「箱の左半分に閉じ込められていた初期粒子配置が時間の経過により箱全体に一様分布するように拡散して行く」という言葉に即して言えば(初めと終りでミクロ状態数の比率は1: 2^N となる)，結晶化は箱全体で一様分布な粒子配置から箱の左半分にのみ分布する初期状態に収斂することに例えられる(エントロピ増大の法則は破れている訳ではない)．意味空間で$O(2^{-p(N)})$ ($p(N)$: Nの多項式関数)なるサイズの領域が高次元空間で$O(q(n)^{-1})$ ($q(N)$: Nの多項式関数)のサイズになるならばNP完全な問題は高次元空間に埋め込まれたときクラスPとなると思われる．これはボール(=質点)を壁の幅が2^{-N}(N: 壁を含む全体の系のサイズ)で薄くなる壁の高さすれすれに投げてことによって壁の位置を計算する問題で現れてくる(しかし，この場合にはチューリング機械に類した通常の計算機で動くソフトプログラムでは計算出来ないのだが)．自然現象ではそのハードウエアは相当に制限を受けておりその制限の下で例題を解いていることになる．従ってそのprogramability (或はその architecture)を確保することが重要となる．NP完全性は例題全てという全称記号$\forall$で結ばれた凄さでもある．

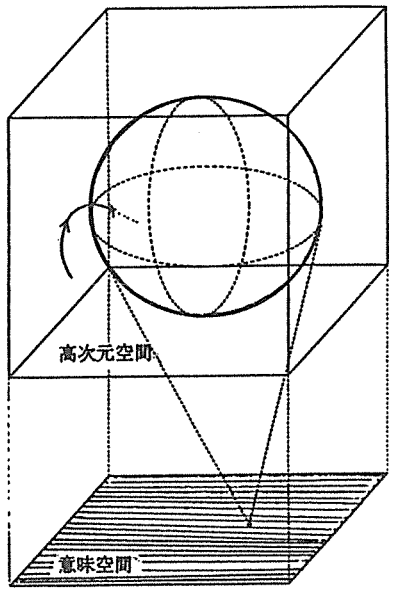

図3. 高次元化と意味空間

C. 最適化機構と運動の強度

意味空間で眺めた運動に関する測度を考えてみよう．運動の再帰時間は大雑把に$t_r \simeq c_2 2^{\beta N}/(c_4 N)$となる．系を観測する時間$t_o$が$t_r \ll t_o$を満たすなら不変測度を考えることが可能となる: ミクロカノニカルの場合に意味変数区間$(q_i, q_i+\Delta q_i)$での分布関数(滞在時間に比例)は(mixingを前提とすると)，(5.1)と同様の式で与えられる:

$$\Omega_q \simeq (\epsilon - V[q_i])^{\frac{dN}{2}-1} \Pi_i \Delta q_i. \qquad (6.4)$$

ϵは全エネルギ，$V[q_i]$は意味変数q_iを変数とするコスト関数とする．$V[q_i]$から$(V[q_i]$-$\Delta)$に進む運動では前後での分布関数比

$$\gamma = (1 + \frac{\Delta}{\epsilon - V[q_i]})^{\frac{N}{2}-1} \qquad (6.5)$$

となり $V[q_i]$ が低くなる方が滞在時間が長くなる.

しかし, 系の次元数が非常に大きい時には再帰時間 t_r は大きくなり $t_o \ll t_r$ となる. この時 ($t \leq t_r$ の運動では) (6.4) が成立するとは期待されない. しかし, (6.4) は運動量空間での mixing が完了する時間 τ_p に比べ意味空間で有意な $V[q_i]$ の変化を与える時間 τ_q に比べ $\tau_p \leq \tau_q$ であるなら (6.4) 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. 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ことに関係する概念として運動の強度[36),37)] という言葉を導入した. その度合い σ は (5.6) 又は (5.8) で与えられた. $\sigma<1$ で運動量空間での mixing が速く起こり (6.4) で与えられる γ が 1 以上になる方向 ($V[q_i]$ を下げる方向に) に運動が進む. 一方 $\sigma>1$ なら (6.4)(6.5) が意味を失うために $V[q_i]$ の構造を反映しない運動となる. 最適化問題では σ を外部から操作することに図 3 のような特に高次元な空間での構造を生成したり消去することが出来る.

§7. 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.[6]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違いよる.

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. この関数形の違いにより q_i は大きく変化してもエネルギ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.

[6]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.

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 1 の現れるエネルギ領域での水の運動は,[28),29)](一見して) ここで述べた type 3 の運動に相当するもののようである. 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値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」の例えで屡々不可逆性が語られる. これは初期状態と終状態でのミクロ状態数の比は 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 2,3 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が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が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.

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

† 電子メール: shinjo@acr.atr.co.jp

参考文献

1) Shinjo K., Sasada T., Phys. Rev. E, 54, 4685('96); 物性研究, 12, 269(1992), 物性研究, 64, 390('95), Phys. Rev. B40, 9167('89), J. Chem. Phys., 90, 6627('98).

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. 結果は

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

となる. Lagrangian か, $(d/dt)(\partial L/\partial \dot{q}_i)=\partial L/\partial q_i$ から得られる運動方程式と, 正準方程式, $\dot{q}_i=\partial H/\partial p_i=p_i - \int_0^t g_i(t')dt'$, $\dot{p}_i = -\partial H/\partial q_i=f_i$ は一致する. 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. Ciccotti 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) Bennetin 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) $3PL^3=<\sum_i^N p_i \cdot \frac{\partial H}{\partial p_i}>-<\sum_{i<j}^N q_{ij} \cdot \frac{\partial H}{\partial q_{ij}}>$.

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, Annallen d. Physik, 21, 756(1906).

21) Stillinger F. H. and Weber T. A., Phys. Rev. A25, 978(1982); Sceince 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) 大峰巌, 物性研究, 56, 269(1991).

30) Boltzmann L., Wiedemann Annalen 57, 773(1896).

31) Ohtawara K. and Shinjo K.., Jp. J. Appl. Phys., 9, 19(1994),

32) Garey M.R. and Johnson D. S., *Computers and Intractability* (Freeman W. H. and Company, 1979),

33) Cook S. A., Proc. 3rd Ann. ACM Symp. on *Theory of computing, association for computing machinery*, New York, 151(1971),

34) Wille L.T., Vennik J., J.Phys. A:Math. Gen., 18, L419(1985),

35) Baum E., Phys. Rev. Lett., 59(1987)374,

36) Klossowski P., ニーチェと悪循環 (哲学書房, 1989),

37) 新上和正, 特許 (出願番号: 平成 05 年特許願第 252907 号).