

平成 22 年 4 月 30 日現在

研究種目：若手研究（B）  
 研究期間：平成 19 年～平成 22 年  
 課題番号：19740235  
 研究課題名（和文）非ハミルトンダイナミクスにおける統計力学諸概念の力学からの基礎付け  
 研究課題名（英文）Theoretical Study of Non-Hermitian Dynamics on the Basis of the Classical Mechanics  
 研究代表者  
 渡辺 宙志（WATANABE HIROSHI）  
 東京大学・情報基盤センター・特任講師  
 研究者番号：50377777

研究分野：  
 科研費の分科・細目：  
 キーワード：

#### 1. 研究計画の概要

本研究は非ハミルトンダイナミクスにおける熱・統計力学諸概念の力学系からの理解とその応用を目的とする。具体的には Nose-Hoover 法に代表されるような時間反転対称を保持し、かつ決定論的にカノニカル分布を導出するダイナミクスをランジュバン方程式などの確率過程と比較することで力学系の縮約という観点から平衡状態を研究する。さらにリユービル方程式の観点から検討することで、カノニカル分布を導出するダイナミクスの物理的な意味を調べる。このように非ハミルトンダイナミクスの指導原理を探ることでカノニカル分布におけるダイナミクスを理解し、新しい分子動力学法の提案、及び量子系への応用を目指す。

#### 2. 研究の進捗状況

温度制御された系のリユービル演算子について、多様体におけるベクトル場の観点からその性質を論じた。決定論的ダイナミクスの縮約による確率過程の導出と、それに伴う時間反転対称性の破れについての研究を行い、Nose-Hoover 系と一般化 Einstein 関係式の関係性を導出した。また、温度制御された系の時間発展の性質を調べた。

#### 3. 現在までの達成度

おおむね順調に進展している。  
 (理由) 本研究の重要な課題の一つであった、時間反転対称性の破れと情報縮約の関係性については論文にまとめられた。また、定温ダイナミクスに付属するリユービル演算子は必ず非エルミートとなることを証明するなど、一般的かつ有用な知見も得られた。

#### 4. 今後の研究の推進方策

数値計算を援用することで非平衡状態におけるエントロピーなどの熱力学・統計力学諸量の直接測定および定義を行い、さらに量子系へ展開する。

#### 5. 代表的な研究成果

〔雑誌論文〕(計 8 件)

H. Watanabe, Non-equilibrium Relaxation Analysis on Two-dimensional Melting, Prog. Theor. Phys. Suppl., No. 178, 41-48, 査読有

渡辺宙志・能川知昭・伊藤伸泰, 剛体系の固体-流体相転移に与える多分散性の影響について, 日本結晶成長学会誌, Vol. 36, No. 2, 46-54 (2009), 査読有

Marta L. Guerra, M. A. Novotny, H. Watanabe, and N. Ito, Efficiency of rejection-free methods for dynamic Monte Carlo studies of off-lattice interacting particles, Phys. Rev. E, 79, 026706-1 - 026706-6 (2009), 査読有

H. Watanabe and C. K. Hu, Mapping functions and critical behavior of percolation on rectangular domains, Phys. Rev. E, 78, 041131-1 - 041131-6 (2008), 査読有

H. Watanabe, Markovian Approximation for the Nose-Hoover method and H-theorem, J. Phys. Soc. Jpn, 77, 103001-1 - 103001-3 (2008), 査読有

渡辺宙志, 二次元粒子系の融解現象における非平衡緩和解析, 分子シミュレーション研究会会誌「アンサンブル」, Vol. 9, No. 4, (通巻 40 号), 22 (2007), 査読有

H. Watanabe, Isothermal Dynamics and Ergodicity, Proceedings of the 13th Symposium on Simulation of Traffic Flow. pp 61-64, 査読無し

渡辺宙志, 小林礼人, 定温分子動力学法におけるエルゴード性, 日本物理学会誌 第 62 巻第 10 号, 785 (2007), 査読有

[学会発表](計 20 件)

2010/03/23 "気泡生成過程の微視的仕事と非平衡性", 渡辺宙志, 鈴木将, 伊藤伸泰, 日本物理学会第 65 回年次大会, 岡山大学津島キャンパス

2009/10/12 "気液混相流における熱伝導と核生成", 渡辺宙志, 日本機械学会 第 22 回計算力学講演会, 金沢大学 角間キャンパス, 講演番号 116

2009/09/26 "定温ダイナミクスとその幾何学的理解", 渡辺宙志, 轟木義, 日本物理学会秋季大会, 熊本大学黒髪キャンパス

2009/09/26 "気液混相流における熱伝導と核生成", 渡辺宙志, 鈴木将, 伊藤伸泰, 日本物理学会秋季大会, 熊本大学黒髪キャンパス

2009/09/26 "相境界面運動の分子動力学シミュレーションによる解析", 能川知昭, 伊藤伸泰, 渡辺宙志, 日本物理学会秋季大会, 熊本大学黒髪キャンパス

2009/03/30 "気液混相流の並列分子動力学計算", 渡辺宙志, 鈴木将, 伊藤伸泰, 第 64 回年次大会, 立教学院池袋キャンパス

2009/03/30 "気泡核生成及び気泡成長ダイナミクス", 鈴木将, 渡辺宙志, 第 64 回年次大会, 立教学院池袋キャンパス

2009/02/02 "Efficiency of Rejection-free Monte Carlo Methods", Hiroshi Watanabe, The ACP 6th workshop on Long-time Simulations, Algorithms and Applications, University of Tokyo

2009/01/30 "気液混相流の大規模並列計算", 渡辺宙志, 第 5 回 ACP ワークショップ, 東京大学

2008/09/25 "Isothermal Dynamics and Time Reversibility", Hiroshi Watanabe, US-Japan Bilateral

Workshop, University of California, Berkeley, USA, Large-scale Molecular Dynamics Simulation and Related Topics

2008/09/23 "定温ダイナミクスと、その縮約としての確率過程", 渡辺宙志, 轟木義一, 2008 年秋季大会, 岩手大学上田キャンパス

2008/09/16 "分子動力学計算による気泡生成過程の研究", 鈴木将, 渡辺宙志, 次世代スーパーコンピューティングシンポジウム 2008, MY PLAZA ホール (東京)

2008/05/19 "カノニカルダイナミクスと時間反転対称性", 渡辺宙志, 第 1 回 ACPWS「マルチスケールシミュレーションおよびその周辺」, 東京大学本郷キャンパス

2008/05/02 "Ergodicity of Isothermal Molecular Dynamics Method", Hiroshi Watanabe, 2008 NCTS May Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Academia Sinica, Taipei

2008/03/24 "Ergodicity of Isothermal Molecular Dynamics Method", Hiroshi Watanabe, Nagoya COE and Beijing LHD Joint Workshop, Nagoya University

2008/03/13 "Ergodicity of the Isothermal Dynamics", Hiroshi Watanabe, APS, New Orleans, LA, USA

2007/12/07 "定温分子動力学法とエルゴード性", 渡辺宙志, 第 13 回交通流のシミュレーションシンポジウム, 名古屋大学 VBL (ベンチャーホール)

2007/11/21 "Ergodicity of the Nose Hoover Method", H. Watanabe, WORKSHOP ON COMPUTATIONAL BIOPHYSICS, Noyori Conference Hall, Nagoya University, Japan., Invited

2007/11/01 "定温分子動力学法とエルゴード性", 渡辺宙志, 物性研短期研究会「計算物性物理学の進展」, 東京大学物性研究所, 招待講演

2007/09/21 "Nose Hoover 熱浴とフォック-プランク方程式", 渡辺宙志, 日本物理学会第 62 回年次大会, 北海道大学札幌キャンパス

[図書](計 0 件)

[産業財産権]

出願状況 (計 0 件)

取得状況 (計 0 件)

[その他]

特に無し