

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年 6月 5日現在

機関番号：13901  
 研究種目：基盤研究(C)  
 研究期間：2008～2011  
 課題番号：20540371  
 研究課題名（和文）  
 保存系カオスの非熱的な揺らぎと相関  
 研究課題名（英文）  
 Non-thermal fluctuation and correlation of chaos in conservative systems  
 研究代表者  
 小西 哲郎 (KONISHI TETSURO )  
 名古屋大学・理学研究科・准教授  
 研究者番号：30211238

研究成果の概要（和文）：

質点がつながった鎖状の系（高分子などの簡単なモデル）を研究した。質点が剛体棒でつながれた系に対しては、各質点の運動エネルギーの熱平衡値が等しくならず末端部で過剰となること、質点がバネでつながれた系に対しては、過渡的に末端部の平均運動エネルギーが過剰となる。等分配までの緩和時間  $\tau$  はバネ定数  $k$  に対して急速に増大し、 Boltzmann-Jeans 理論を用いた評価式  $\tau \propto \exp(c\sqrt{k})$  とよく合致することがわかった。高分子、 DNA, タンパク質、人工構造物などの鎖状系において末端部のエネルギーが過剰となる可能性を示唆している。

研究成果の概要（英文）：

Dynamical and equilibrium properties of chaotic Hamiltonian systems are investigated. In particular, we studied chain-type systems where masses are connected by rigid links or springs. For systems where masses are connected by rigid links, average kinetic energies of masses take excessive large values near the ends of chain. For systems where masses are connected by springs, average kinetic energies near the ends transiently take excessive values. The relaxation time to equipartition  $\tau$  grows rapidly with the increase of the spring constant  $k$ . It is in agreement with the expression  $\tau \propto \exp(c\sqrt{k})$  obtained from Boltzmann-Jeans theory. The results imply that chain-type systems such as polymers, DNA, protein, artificial objects also show excess average energy near ends of the chain.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2009年度	900,000	270,000	1,170,000
2010年度	900,000	270,000	1,170,000
2011年度	600,000	180,000	780,000
総計	3,400,000	1,020,000	4,420,000

研究分野：[数理物理・物性基礎](#)

科研費の分科・細目：

キーワード：[Boltzmann-Jeans 理論](#)、[エネルギー等分配則](#)、[カオス](#)、[多重振り子](#)、[拘束系](#)、[数理物理](#)、[構造形成](#)、[物性基礎論](#)、[非線形物理学](#)

## 1. 研究開始当初の背景

およそ自然界に存在するあらゆる物は力学の法則に従って時間発展する。古典系の場合、その法則はニュートンの運動方程式、あるいは同値であるがハミルトンの正準方程式の形に書かれる。これらの方程式に従う系は数学的には「保存系」あるいは「ハミルトン系」と呼ばれる。これらの中で、調和振動子やソリトンといったごく一部の例外を除けば、大半は非線型性（非可積分性）のために、その解を解析的には得ることが出来ず、運動は複雑になる。例えばモード間にエネルギー交換が生じたり、緩和過程が起きたりするはこのためである。この複雑な運動はカオスと呼ばれる物の一つである。すなわち、カオスはあらゆる分野、あらゆる対象にて発生する、ごく自然な現象である。

さて、発見から半世紀近く経ち、カオスの存在そのものは多分野の研究者に良く知られるようになってきた。しかし、カオスがそれぞれの系で物理的にどのような役割を果たしているのかはいまだ良くわかっていないのが実状である。唯一良く知られているのが古くから馴染のある熱運動である。すなわち、保存系でカオスが生じ、乱雑な運動が発達して熱となる、というものである。熱となってしまうとあとは伝統的な物理的手法が活用できるのでわざわざカオス

の話を持ち出すまでもない。また、古典統計力学も保存系カオスによって熱運動が生じることを基礎としている。

しかし、保存系のカオスが必ず熱運動を生じるのかは自明では無い。それどころか、熱にはならず長時間相関を生じたり (Koyama, Kiuchi and Konishi, (2007, 論文 [1]), 緩和せずに構造形成を起こしたり (Konishi and Kaneko (1992), Konishi (2006, 論文 [3]), Koyama and Konishi (2006, 論文 [4])) するケースすらある。また、分子の変形や衝突は保存系で扱えるが、そこでの化学反応の反応速度に、従来の熱運動を仮定した統計理論では説明できない様子が相次いで発見されてきている (Toda, Komatsuzaki, Konishi, Berry, Rice(eds) (2005, 論文 [6]))。また、自由度が大きな系での緩和の素過程であるところのアーノルド拡散 (Arnold, 1964) にも、実際には強い時間相関が見出されることが申請者によって明らかにされている。(Konishi (2005, 論文 [5]))

カオスの典型例として例題に出される事の多い 2 重振り子や多重振り子ですら、その運動が熱として捉えてよいかどうかは分かっていないのである。(ちなみに、多重振り子は鎖状分子の簡単なモデルでもある。)

これらの背景のもとで、本研究では、いく

つかの保存系でそのカオス的運動における時間相関と空間構造を探ることをめざす。これは、広範に存在する保存系カオスの物理的役割を明らかにするために価値が高いものであり、ぜひとも進めるべき研究であると考えられる。

## 2. 研究の目的

(1) 本研究の目的は、保存系カオスによって生じる相関と緩和、非熱的揺らぎと構造を探ること、自然界における構造形成の物理的および数理的背景を明らかにすることである。(2) より詳しくは、多重振り子などを例題として、多自由度系に生じる保存系カオスの、熱とは異なる揺らぎとその系の相空間構造の関連を探り、多体系のダイナミクスに新たな知見を得ることを目的とする。

## 3. 研究の方法

研究の方法としては主に PCを用いた数値シミュレーションを用いた。数値シミュレーションとしては、一部で拘束系に対するシミュレーションを実行した。これは、ホロノミックな拘束のある系の運動方程式を、ラグランジュの未定乗数法を用いて解くものである。数値計算による時間発展の各ステップでラグランジュ定数を数値的に定めることで拘束を満たす。これは、分子動力学の計算パッケージにおいて Rattle法と呼ばれているものである。

また、数値計算と並行して平衡統計力学での計算も行った。近似的ではあるが、拘束のある系に対して運動エネルギーの平均値が質点ごとに異なり末端部で大きくなることを示すことが出来たのは数値計算結果のサポートとして大きな意義があった。

## 4. 研究成果

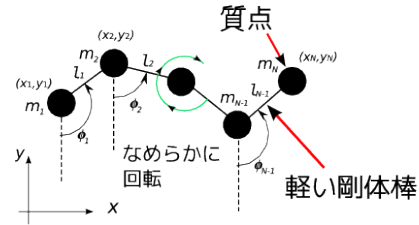


図1：質点が剛体棒でつながれた系

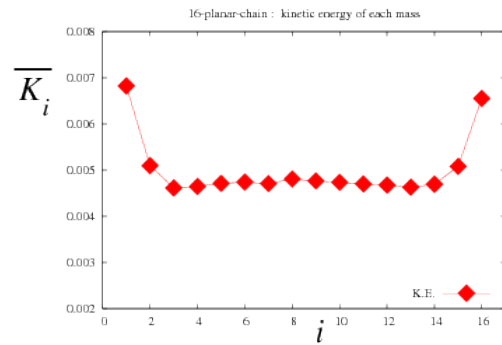


図2：図1のモデルにおける各質点の運動エネルギーの長時間平均値。末端部で過剰となる。

質点が繋がれてできる鎖状多体系での運動エネルギーの分配について著しい結果を得た。まず、質点間が剛体棒でつながっている系においての結果を述べる。質点が1次元的につながっている場合（図1）は、各質点の運動エネルギーの熱平衡での値は等しくならない。これは、隣接する質点間の距離が一定であるという拘束条件により、運動エネルギーの表式の中に座標が含まれ、そのために、エネルギー等分配則が  $\langle (1/2)m_{iv}i^2 \rangle = (1/2)kBT$  とは異なる形を取ることに由る。

我々は、1次元的につながれた鎖状系 (planar chain model, freely jointed chain) に対しては、末端部分の質点の平均運動エネルギーが他の部分よりも過剰となることを数値計算により発見した (図2)。またこの結果は近似的な解析計算によっても確かめられた。鎖が1次元ではなく分岐を持っている場合には、分岐点での平均運動エネルギーが過剰となることもわかった。結果は学会にて発表され、また、論文 (T. Konishi and T. Yanagita, 2009) としてまとめられた。

一方、実在する系には理想的な剛体は存在しない。傾きが大きなポテンシャル (あるいは大きなバネ定数) を剛体と近似している。従って、バネ定数を大きくした極限が剛体の系と考えられる。しかし、バネでつながれた質点系では、バネ定数がいかに大きくとも有限である限りは、熱平衡状態においては通常のエネルギ一等分配則が成立する。熱平衡状態を設定するという極限操作と、バネ定数を無限大にするという極限操作が交換しない。この場合は、平衡状態ではなく動的な過程を考えるべきである。我々は、質点が1次元的にバネでつながれた系においても、過渡的には末端部分でのエネルギー過剰が観測されることを数値計算により発見した。また、等分配成立までの緩和時間  $\tau$  はバネ定数  $k$  を大きくするとともに長くなり、Boltzmann-Jeans 理論で予想される  $\tau \propto \exp(c\sqrt{k})$  により良くフィットされることを見出した (図3)。

ここで Boltzmann-Jeans 理論とは、系内にタイムスケールを異にする部分系が共存している場合、その2つの部分系間のエネルギー移動が極めて遅く、典型的には  $\exp(c(\text{タイムスケールの比})^\alpha)$  となる、

というものである。以上の結果は学会などで発表され、また論文として出版された (T. Konishi and T. Yanagita, 2010)。

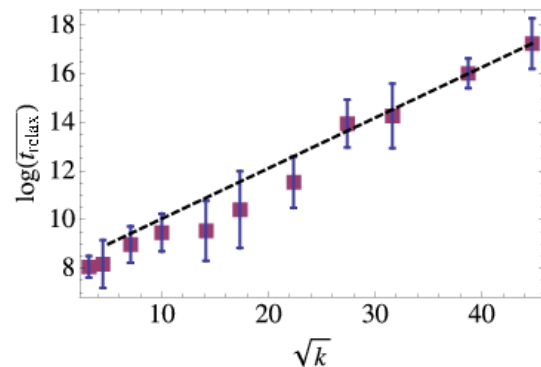


図3： 質点がバネ定数  $k$  のバネでつながれた系における、等分配までの緩和時間のバネ定数依存性。破線は Boltzmann-Jeans 理論によるフィッティング  $\exp(c\sqrt{k})$ 。

エネルギー等分配則の成立は完全な熱化であり、その手前でエネルギー分配の不均一化が見られたことは、本来の目標であった、非熱的なゆらぎと相関が新たな分野で見られたことであり、意義深い一歩である。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 2 件)

[1] "Slow relaxation to equipartition in spring-chain systems",

[Tetsuro Konishi](#) and Tatsuo Yanagita,  
[Journal of Statistical Mechanics](#)  
(2010) P09001 , 査読あり .

[2] "Energetic motion of end-particles  
in constrained dynamical systems",  
[Tetsuro Konishi](#) and Tatsuo Yanagita,  
[Journal of Statistical Mechanics](#)  
(2009) L09001 , 査読あり .

[学会発表] (計 18 件)

[1] 小西哲郎、柳田達雄、「強束縛ひも  
状態のエネルギー分配：溶媒の効果」、  
日本物理学会第 67 回年次大会、2012 年 3  
月 24 日、関西学院大学 (24aAH-6)

[2] 小西哲郎、柳田達雄、「3 次元中  
の強束縛鎖状多体系におけるエネルギ  
ー分配と特異な振舞い」、[基研研究会](#)  
[2011 「非平衡系の物理 - ミクロとマ  
クロの架け橋」](#) 2011 年 8 月 18-20 日、  
湯川記念館パナソニックホール (京都)

[3] 小西哲郎、柳田達雄、「3 次元中  
の強束縛ひも状態：末端と分岐点での運  
動の特異性」、日本物理学会 2011 年  
秋季大会、2011 年 9 月 22 日、富山大  
学 (22pGS-7)

[4] 小西哲郎、柳田達雄、2010 年度 高  
分子計算機科学研究会・高分子ナノテク  
ノロジー研究会合同討論会 (東京大学山  
上会館大会議室) 2010 年 12 月、「鎖状  
多体系における末端部の活発な運動とゆ  
っくりした緩和」

[5] 小西哲郎、柳田達雄、第 24 回 分子  
シミュレーション討論会 (福井県民ホー  
ル、福井市) 2010 年 11 月、「鎖状多体

系のダイナミクス：末端部の活発な運動  
とゆっくりした緩和」

[6] 2010 年 10 月 14 日、小西哲郎 (名  
古屋大・理) 「鎖状多体系の末端におけ  
る活発な運動と遅い緩和」、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」2010 年 10 月 13 日～15  
日 (招待講演)

[7] 小西哲郎、柳田達雄、日本物理学会  
秋季大会 (大阪府立大学) 2010 年 9 月、  
「3 次元中の強束縛ひも状態の末端異  
常」 24pTB-11 (領域 12)

[8] "Partition and relaxation of energy in  
chain-type systems", [Tetsuro KONISHI](#),  
Jun. 13, 2010, in [DDAP6 \(Dynamics  
Days Asia Pacific 6\)](#), Jun.12-14, 2010,  
University of New South Wales, Sydney,  
Australia

[9] 小西哲郎、柳田達雄、第 59 回理論  
応用力学講演会、2010 年 6 月、「剛体  
棒あるいは硬いばねでつながれた鎖状系  
における末端部粒子の活発な運動」、学  
術会議

[10] 小西哲郎、柳田達雄、日本物理学  
会第 65 回年次大会 (岡山大学) 2010 年  
3 月 20 日、「非束縛力学系に現れる  
遅い緩和～束縛運動の陰 II」

[11] [Tetsuro Konishi](#) and Tatsuo  
Yanagita, "Slow relaxation to equi-  
partition in spring chain systems",  
Workshop on dynamical systems theory  
and reaction dynamics toward large  
systems, 2010 年 1 月 5 日、京都大学

[12] 小西哲郎、柳田達雄、日本物理学会  
秋季大会 (熊本大学) 2009 年 9 月 26 日、  
「非束縛力学系に現れる緩和と揺らぎ～

束縛運動の陰」

[13] 小西哲郎、「鎖状系における末端部粒子の活発な運動」、第5回 ILM 勉強会、2009年11月5日、滋賀県立大学

[14] 日本物理学会第64回年次大会(立教大学)2009年3月、28aVB-3 「一般鎖状系のダイナミクスとみかけのエネルギー非等分配 2」、  
小西哲郎A, 柳田達雄B 名大理A, 北大電子研B 領域 12

[15] 第41回天体力学N体力学研究会(国立天文台(三鷹)すばる解析研究棟大セミナー室)、2009年3月13日(金)~14日(土)、(招待講演)「遅い動きと小さな量:カオスと多倍長計算」、小西哲郎

[16] 日本物理学会秋季大会(岩手大学)2008年9月、20pWB-9 「一般鎖状系のダイナミクスとみかけのエネルギー非等分配」、  
小西哲郎A, 柳田達雄B 名大理A, 北大電子研B 領域 12

[17] 日本物理学会秋季大会(岩手大学)2008年9月、23aPS-48 「多重振り子のシミュレーションとみかけのエネルギー非等分配」、小西哲郎A, 柳田達雄B 名大理A, 北大電子研B 領域 11

[18] 小西哲郎(名古屋大学)、  
"Dynamics of planar chain system",  
[Kyoto Dynamics Days 7 "Hamiltonian Systems and Related Topics"](#) Main speaker: Professor Carles Simo (University of Barcelona), 京都大学、2008年6月26日(木)~28日(土)

[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]

ホームページ等

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

小西 哲郎 (KONISHI TETSURO)  
名古屋大学・理学研究科・准教授  
研究者番号: 30211238

### (2) 研究分担者

( )

研究者番号:

### (3) 連携研究者

( )

研究者番号: