

機関番号：12601

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2007～2010

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・物性研究所・助教

研究者番号：50377777

研究成果の概要（和文）：ハミルトン力学に従わない力学系として温度制御下にある分子動力学法の運動方程式、特に Nose-Hoover 法に着目し、その物理的、幾何学的な意味について研究した。Nose-Hoover 法の時間発展を粗視化することで一般化 Langevin 方程式を導き、H 定理との関係を明らかにした。また、運動方程式を一般的な多様体上に構成されるベクトル場として定式化することで温度の幾何学的な意味を考察し、カノニカル分布を定常状態に保つ運動方程式の時間発展が正準変換で表現できないことを示した。

研究成果の概要（英文）：The Nose-Hoover method is studied as a non-Hamilton dynamics system. A stochastic process of the Nose-Hoover method is discussed on the basis of the Markovian approximation. It is proved that the dynamics which achieves Gibbs' canonical distribution must involve non-canonical transformation.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	700,000	0	700,000
2008年度	590,400	180,000	770,400
2009年度	800,000	240,000	1,040,000
2010年度	600,000	180,000	780,000
年度			
総計	2,690,400	600,000	3,290,400

研究分野：統計力学

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：統計物理学・分子動力学法・温度制御

1. 研究開始当初の背景

(1) ハミルトン系は、エルゴード的であれば運動方程式の時間発展の結果としてミクロカノニカル分布を得るが、特に分子動力学法への応用の要請からカノニカル分布を得る決定論的運動方程式が必要とされ、様々な手法が提案されていた。しかし、その多くは運動方程式の修正により変分原理を失っており、その時間発展の数学的な意味が不明瞭であった。

(2) ハミルトン系からカノニカル分布を導出する理論的枠組みとしては森らによる射影演算子の方法がある。系を構成する自由度のうち、速いダイナミクスを粗視化して相関を切るマルコフ近似を行うことで時間反転対称性が破られ、系は H 定理にしたがってカノニカル分布に収束する。同様な枠組みが温度制御のある運動方程式にも期待されるが、系がハミルトン力学に従わないことからその射影演算子の方法の適用は非自明であった。

2. 研究の目的

(1) 非ハミルトンダイナミクス、特にカノニカル分布を定常状態に保つ力学系を生み出す変分原理、指導原理を明らかにする。

(2) 温度制御のある運動方程式の時間発展の意味を明らかにする。特に粗視化され、時間反転対称性が破れた状態における H 定理との関係について調べる。

3. 研究の方法

(1) 温度制御のある運動方程式は、カノニカル分布を定常分布を持つように定められる。そこで逆に、カノニカル分布を定常状態を持つ運動方程式が満たすべき条件について考察する。特に、運動方程式を多様体上に定義されたベクトル場と考え、そのベクトル場を生み出す幾何構造(ハミルトン力学ならシンプレクティック構造)について考察することで、温度制御のある運動方程式系の時間発展の幾何学的な意味について明らかにする。

(2) Nose-Hoover 法、もしくは類する手法は、系に少数の自由度を追加することで温度制御を行う。したがって追加された自由度は熱浴との相互作用を模していると解釈される。そこで、系に追加された自由度を積分することで粗視化し、一般化 Langevin 方程式を導くことで、ハミルトン系における森方程式と比較、検討を行う。特に H 定理の成立について調べる。

4. 研究成果

(1) 温度制御を持つ系の運動方程式を、一般的な多様体上に構成されるベクトル場として定式化することで温度の幾何学的な意味を考察した。定温ダイナミクスを実現するにはリュービル演算子が非エルミートでなくてはならないが、いかなるリーマン計量を導入しても、時間に陽に依存しないラグランジアンから変分原理によって作られたリュービル演算子はエルミートであることがわかった。したがって、通常の意味においての変分原理から、定温ダイナミクスは導くことができないことがわかった。これは、多様体上に定温ダイナミクスを生み出すシンプレクティック形式は定義できないことに対応する。

(2) Nose-Hoover 法の時間発展を粗視化し、一般化 Langevin 方程式とすることでマルコフ近似の意味や時間反転対称性の破れを議論した。射影演算子の方法と同様な手法で Nose-Hoover 法で制御された系の時間発展を粗視化し、確率的 Nose-Hoover 方程式を得た。この際、個々の自由度の運動量に対してエネルギーが十分遅く変化するという断熱近似、

およびエネルギーが短時間の相関しか持たないというマルコフ近似を行ったが、この近似により時間発展対称性が破れることが明示的に示された。さらに自由エネルギーの単調減少(H 定理)を要請することで揺動力を相乗過程として含む一般化された Langevin 方程式が満たすべき条件を得た。この方程式は運動量の任意関数を含むが、この関数を定数とすれば通常の Langevin 方程式、一次関数とすれば確率的 Nose-Hoover 方程式を得る。したがって確率的 Nose-Hoover 法による時間発展はカノニカル分布を絶対安定な平衡状態として持つ。

もともと Nose-Hoover 法は拡張されたハミルトニアンに対するカノニカル分布を不変に保つダイナミクスであったから、マイクロに見れば平衡状態のダイナミクスであった。しかし、時間発展を粗視化すれば興味ある系のハミルトニアンに対して H 定理が成り立つことから、熱浴として働くことが示された。

(3) シンプレクティック形式から温度を制御する手法である Nose-Poincare 法は、実変数へ変換する際に非正準変換を含むために、温度の幾何学的な意味は不明瞭であった。しかし、Nose-Poincare ハミルトニアンの正準形式を変形することにより、Nose-Hoover 法は Nose-Poincare 法に拘束条件をつけた形に対応することが示唆された。これは、エネルギー一定の拘束条件を課した上で極小作用の原理を適用した Gaussian Thermostat 法と同じ構造を持っており、解析力学における温度がなんらかの拘束条件に対応していることが示唆される。

(4) 量子系において非エルミートなハミルトニアンは時間発展に対して確率が保存しない系に対応しており、確率の保存則がハミルトニアンのエルミート性に結びついている。しかし、古典系における定温ダイナミクスの非エルミート性は確率の保存則から導かれるものであるので、量子系で広く研究されている非ユニタリなダイナミクスとは対応しないことが分かった。確率が保存し、かつ時間発展対称性を保ちつつ非ユニタリな時間発展を行う量子系はまだ知られておらず、古典系での定温ダイナミクスに対応する量子系の意味は未だ不明瞭である。

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 12 件)

① Cumulative distribution functions associated with bubble-nucleation processes in cavitation, H. Watanabe,

- M. Suzuki, and N. Ito, Phys. Rev. E 82, 051604 (2010) (査読有)
- ② Dynamical study of a polydisperse hard-sphere system, T. Nogawa, N. Ito, and H. Watanabe, Phys. Rev. E 82, 021201 (2010) (査読有)
- ③ 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, 渡辺宙志・能川知昭・伊藤伸泰, 日本結晶成長学会誌, Vol. 36, No. 2, pp. 46-54 (2009) (査読有)
- ④ Non-equilibrium Relaxation Analysis on Two-dimensional Melting, H. Watanabe, Prog. Theor. Phys. Suppl., No. 178, pp. 41-48 (2009) (査読有)
- ⑤ Efficiency of rejection-free methods for dynamic Monte Carlo studies of off-lattice interacting particles, Marta L. Guerra, M. A. Novotny, H. Watanabe, and N. Ito, Phys. Rev. E, 79, pp. 026706-1 - 026706-6 (2009) (査読有)
- ⑥ Markovian Approximation for the Nose-Hoover method and H-theorem, H. Watanabe, J. Phys. Soc. Jpn, 77, pp. 103001-1 - 103001-3 (2008) (査読有)
- ⑦ Ergodicity of a Thermostat Family of Nose-Hoover type, H. Watanabe and H. Kobayashi, Phys. Rev. E, 75, pp. 040102-1 - 040102-4(R), (2007) (査読有)
- ⑧ 二次元粒子系の融解現象における非平衡緩和解析, 渡辺宙志, 分子シミュレーション研究会誌「アンサンブル」, Vol. 9, No. 4, (通巻 40 号), pp. 22--30 (2007) (査読有)
- ⑨ “定温分子動力学法におけるエルゴード性”, 渡辺宙志, 小林礼人, 日本物理学会誌 第 62 巻第 10 号, 785--788 (2007) (査読有)

[学会発表] (計 47 件)

- ① 2010/09/23 “カノニカル分布を導く運動方程式と変分原理”, 渡辺宙志, 轟木義一, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 大阪府立大学中百舌鳥キャンパス
- ② 2009/09/26 “定温ダイナミクスとその幾何学的理解”, 渡辺宙志, 轟木義一, 日本物理学会秋季大会, 熊本大学黒髪キャンパス
- ③ 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

④ 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

⑤ 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

⑥ 2008/05/02 “Ergodicity of Isothermal Molecular Dynamics Method”, Hiroshi Watanabe, 2008 NCTS May Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Academia Sinica, Taipei

⑦ 2008/03/24 “Ergodicity of Isothermal Molecular Dynamics Method”, Hiroshi Watanabe, Nagoya-COE and Beijing-LHD Joint Workshop, Nagoya University

⑧ 2008/03/13 “Ergodicity of the Isothermal Dynamics”, Hiroshi Watanabe, アメリカ物理学会 (APS), New Orleans, LA, USA

⑨ 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

[図書] (計 1 件)

- ① □金田行雄・笹井理生監修, 笹井理生 編, 共立出版, 超多自由度系の新しい科学, pp. 252 - 282 (2010)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

渡辺 宙志 (WATANABE HIROSHI)

東京大学・物性研究所・助教

研究者番号 : 50377777