

TR-O-0101

29

多自由度複雑系ダイナミクスの研究
—その理解と利用—

新上 和正

1996. 2.19

ATR光電波通信研究所

多自由度複雑系ダイナミクスの研究 — その理解と利用 —

新上 和正

概論

新しい情報処理ダイナミクスを目指し、多自由度複雑系の研究を行なう。複雑系で発生する問題を解決するための新しい概念と方法が必要であり、得られた概念と方法は(通信ネットワークや並列分散多要素制御系などの)広範囲な系で成り立つと期待される。

ここでは、多自由度を持つ Hamiltonian 系の運動を主に多重安定領域構造 (many basin structure) の形成と関連で調べる。この系では、唯1つしか安定領域を持たない系と違って、KAM トーラスが崩壊する stochastic transition は安定領域の系を構成する要素の空間的配置に依存して現れることを示す。殆どの安定領域内の空間的配置に対して stochastic transition が起こらない(則ち、転移エネルギー $\epsilon_c(N)$ は $N \rightarrow \infty$ でゼロとなる)ことから、相空間の殆どの領域は chaotic sea によって埋め尽くされていることを示唆する。

安定領域間の運動を Bernoulli-like な shift map を使って記述し、三つの運動の形態に分類されることを示す。更に、それらは、非対称的運動 (asymmetric motion) が現れるかどうかによって、二つのクラスに大別される。非対称的運動の力学的起原を'相空間における運動の強度'という概念を導入して説明する。非対称的運動は緩和が終了する前にカノニカルな確率分布が位置空間側に'transient'に形成するために生じることを示す。

相空間における運動の強度を最適化問題の枠組みの中で捉え直し、多自由度系の運動と NP 完全な問題に対し最適化機構を議論する。

目次	----- 3
本報告の構成	----- 4
第1章 多自由度系に潜む複雑さ	----- 4
1.1 始めに	----- 4
1.2 多自由度の系とは: 系が見せる相転移	----- 5
1.3 多自由度系の理解に向けて: 相転移から運動へ.	----- 5
A エネルギー壁の加法性	----- 5
B 安定点数の加法性	----- 6
1.4 モデルと安定点の分布	----- 6
A モデル	----- 6
B 安定点の分布	----- 7
1.5 内の運動	----- 8
1.6 間の運動	----- 8
A 写像と運動の分類	----- 8
B 三つの運動の形態	----- 9
1.7 非対称 (非可逆的) 運動	----- 10
1.8 経路問題と「固体」状態	----- 11
参考 & 文献	----- 12
第2章 多自由度系の運動論	----- 12
2.1 始めに	----- 12
2.2 モデルと幾つかの問題	----- 12
A モデル	----- 13
B 写像と運動の分類	----- 13
C 二つの時間スケールと観測時間	----- 13
D 安定領域間の運動	----- 14
E 安定領域内の運動	----- 14
F 幾つかの問題	----- 15
2.3 運動の強度	----- 15
A トートロジー	----- 15
B 二つの時間スケールと強度	----- 16
C 運動量と位置座標空間での拡散	----- 20
2.4 type 3 の運動	----- 20
A 幾つかの性質	----- 22
B 保存系と散逸系での違い	----- 23
C type 1, 2 との違い: 経路の複雑さ	----- 24
D ルービック・イシゲ・キューブ・ハミルトン	----- 27
参考 & 文献	----- 29
第3章 自律運動と最適化問題	----- 29
3.1 始めに	----- 29
3.2 結晶化機械	----- 30
3.3 運動の強度と最適化機構	----- 31
3.4 最適化の1方法	----- 32
参考 & 文献	----- 43
第4章 結論	----- 44
謝辞	----- 45

本報告の構成

第1章は多自由度 Hamiltonian 系が示すダイナミクスの概観であり、第2章はそのダイナミクスの持つ物理的側面の詳細な記述である。第3章は、ダイナミクスの最適化問題への応用とダイナミクスの持つ最適化機構の説明である。

(以下がもう少し詳しい各章の内容である)

第1章 多自由度系に潜む複雑さ

多自由度からなる Hamiltonian 系が持つ複雑さを概観する。複雑さの研究についてこれ迄の見方を少し述べる。また、この系のダイナミクスに関係する現象を述べる。主として現象で見られる性質と運動を記述する。

第2章 多自由度系の運動論

ここでは、多自由度系のより詳細な記述を行なう。その際の多自由度 Hamiltonian 系に対する問題意識を述べる。その系が示す一般的な系で見られる - 非対称的運動 (asymmetric motion) の力学的起原を '相空間に於ける運動の強度' の概念を導入して詳細な検討を行なう。また、散逸系及び保存系を問わず観測される運動状態を間欠的に遷移する (ここで type 3 と呼ばれる) 運動の特徴を述べる。

第3章 自律運動と最適化問題

非対称的運動を説明するために導入した運動の強度と最適化問題の枠内で捉え直し、NP 完全と呼ばれる解決困難と思われる問題をの関連を議論する。最適化問題に応用した幾つかの例を述べる。

(** 章ごとの読み易さを考えて、各章の内容と引用した文献の幾つかは重複する **)

1.1 始めに

"複雑さ (complexity)" は帰納的な概念である。人は複雑さを言葉にしながらその中身を真に知らない。しかし、「複雑な問題とは、より簡単で理解し易い問題に還元しにくいある種の還元不可能性を持つ問題である」という共通の認識を持っている。複雑な問題は、人に依ってカオスであり、セルオートマトンであり、多自由度系であり、ニューラルネットワークであり、パターン形成である。寧ろ、複雑さはこのような違った領域の問題をメタレベルで関連させる概念である。

また、僕らは複雑な問題、或は、複雑さを定義する一般的方法を持っていない。過去の複雑さの定義の試みは主に計算機科学の概念と方法を利用した。複雑さを、仮想計算機で使用する記憶容量、計算時間、プログラムの最小の長さ (Kolmogorov-Chaitin) で測定する。例えば、スピングラスの基底状態の記述には長いプログラムを必要とするであろう。一方、強磁性や結晶構造は簡単なプログラムで済む。しかし、Kolmogorov-Chaitin の方法では系がランダムであればあるほど高い複雑さを持つことになる。ランダム性は概念的にも物理的な観点からも、かえって興味ない対象である。寧ろ、還元しても還元しても或はモデル化してもモデル化しても尽くせない深さを測定する量が複雑さのメジャーとして適当である。言い替えれば、逆問題を解く試行回数のようなものが複雑さのメジャーとして直感的にふさわしい。

多自由度の系は系を構成する多くの自由度が絡み合って複雑な様相を示し、簡単な要素に還元され難さを持っている。^{1),2)} 多自由度の系の面白さはこの性質から発生し、平衡或非平衡統計力学、エルゴード性、力学系、高次元カオス、ニューロンネットワーク、非線形計画法、計算機科学 (特に NP 困難な問題)、進化、更に、数学基礎論、一方で物質科学で、凝縮物質の生成過程及び結晶成長のダイナミクスの (制御を含めた) 様々な問題を考える訓練の舞台を提供している。³⁾ 特に、著者の興味は、高次元系に於ける (平衡・非平衡系、エルゴード性を含めた) 凝縮物質の動的過程 (制御を含めた経路問題) にあり、多自由度の系理解は不可欠な課題である。

1.2 多自由度の系とは^{1),2)}: 系が見せる相転移

高温でランダムな状態にある多自由度系を外部パラメタの急な変化で、ランダムな状態からその形態が固まったような「固体」状態になる。しばしば、狭い外部パラメタ領域でそのような状態変化が起こるので転移点と呼ぶ。多自由度の系の状態は冷却過程を経て創られ、単にランダムな構造を持つアモルファス状態と区別される。その形成過程は次の三つの実験測定に特徴を持つ。ランダムな状態から「固体」への転移であることを反映して、

- (イ) 体積の外部パラメタ依存性と
- (ロ) 比熱に (温度上昇で) 二次相転移的依存性が現われる、
- (ハ) 粘性は高温からの冷却でゆっくり増大し転移点近傍で急激に増大し転移点の下で発散する。

(下の (2) 式を参照) 物理的に (ハ) は、多自由度系は有限な粘性を持つこと、即ち、その転移が液体と固体の間の真の相転移でないことを意味する。真の相転移ならば固体では粘性が発散し液体で有限になるような非連続性が粘性に現われる。この理由によって、しばしば、その転移を動的転移 (dynamic transition) と呼んでいる。転移点 T_g は、実験的に粘性が 10^{13} poise (粘性の単位) 程度になる温度として決められる。この大きな粘性では、系を構成する要素の隣接要素位置に移動する時間が 10 分 - 1 時間と遅く、僕らが眺めている時間間隔ではあたかも固体であるかのように映る。上で多自由度系の状態に括弧を付けて「固体」であると言ったのはこの理由からである。つまり、系の運動を特徴づける時間と観測時間を各々 τ_i と τ_{ob} で表わすと $\tau_i \geq \tau_{ob}$ の場合に「固体」状態が形成される。転移点近傍の緩やかな粘性の運動を特徴づける経験則は伸びた指数型緩和関数 (stretched exponential)⁴⁾

$$\tau(t) \propto e^{-(t/\tau_i)^\alpha}, \quad (1)$$

(α は余り温度に依存しない定数で、普通 $0.3 < \alpha < 1$)、と粘性 η に対する Vogel-Fulcher-Tamman の経験則⁵⁾

$$\tau_i, \eta \propto e^{\Delta/(T-T_0)}, \quad (2)$$

($T_0 < T$ 、また、 Δ は余り温度に依存しない)、が良く知られている。(1) は単純な指数関数であるデバイ (Debye) の緩和法則に従わない点と (2) は単純な活性型 ($T_0=0$)、つまり、アルヘニウス (Arrhenius) 型でなく有限温度 T_0 で特異点を持つことが異常である。

多自由度系の状態は $\{p_i, q_i\}$ で書け、運動量変数 $\{p_i\}$ は運動に関連した「固体」状態の生成過程や緩和の運動を考えると重要となる。この系の理解の難しさは、要素の配置が運動と密接に絡んでくると、要素配位の特徴づけ⁶⁾ が難しいことがその一因である。

1.3 多自由度系の理解に向けて: 相転移から運動へ。

A エネルギー壁の加法性

相転移とは何か? 簡単の為に、強磁性体を例に取り相転移のエッセンスを話す。強磁性体はある温度以上で常磁性でその温度以下で相転移を起こし強磁性になる。強磁性体の全エネルギー関数 $E[N]$ は状態空間 $\{S_i\}$ 上で下向きと上向きのスピン配向に対応した二つの安定点を持つ。その間は N に比例するエネルギー壁 $E_p[N]$ がある。各スピンに温度 (T で表わすが、スピン系で「熱」と呼ぶ運動がどこか来るのか解らないが) が作用する。温度から来るエネルギーは TN である。相転移の描像は、もし温度 T が十分大きく TN がエネルギー壁 $E_p[N]$ を上回れば右と左の安定点間を往来でき二つの状態の混合状態つまり常磁性となる。一方、 TN が $E_p[N]$ に比べ小さい場合は行き来が起り難くなる。この時、一つの安定点から他の安定点に行くのに要する時間は、一つ一つのスピンを逆転する必要があるので、安定点間の距離 N の $e^{\beta N}$ に比例する。十分大きな N では殆ど片方の安定点の状態を観測する。つまり、強磁性状態にある。(正確な議論を展開するにはエントロピー効果を⁷⁾ 考慮する必要があり自由エネルギーで考える必要がある) この議論で重要な点は、温度 T を変化させると、 TN とエネルギー壁 $E_p[N]$ の大小関係に変化が起こるかである、言い替えれば、エネルギー壁 $E_p[N]$ が N に比例する加法性を持つかどうかである。

これを長い間、エネルギー壁が加法的な系を強磁性体のような状態空間に数個の安定点を持つ場合しか知らなかったが、スピングラスの長距離相互作用を持つ SK モデルは安定点間のエネルギー壁に加法性があり、しかも、沢山の安定点を持つ具体例を見せてくれた。⁸⁾ (状態間の順序づけ (ultrametricity) はエネルギー壁の加法性に根拠を持つのであろう) Stein は、相転移点を持つ基底状態を見つける問題は NP 困難であり、SK モデルと同様な $E[N]$ を持つためと推測している。つまり、一旦一つの安定点に入ると他の安定点に移るまでに $e^{\beta N}$ の長時間を要する。⁹⁾ スピングラスの SK モデルは相転移モデルの複雑化である。

B 安定点数の加法性

「粒子数 N を持つ系はどのくらい多くの異なる安定点数 $M[N]$ を持つのか?」。相互作用する (古典的要素からなる) 多自由度系は一般に多くの構造的に安定な配置 (以下、安定点と呼び位相空間の状態と区別する) を持つ。この問いは興味ある基本的問題である。¹⁰⁾ 「多自由度系の安定点数 $M[N] \sim e^{\nu N}$ である」と考えられる。安定点数 $M[N]$ は相互作用の形や系の空間次元数に依存する。三次元系で短距離 (Morse や Lennard-Jones

型で) 相互作用する多自由度系では、この推論は正しい。二次元系は Penrose 格子の様な例もあり否定的である。一次元系の短距離 (Morse や Lennard-Jones 型で) 相互作用する多粒子系は唯一つ安定点を持つのみである。

$M[N] \sim e^{\nu N}$ であれば $M[2N] = M[N]M[N]$ である。物理的には、幾つかの要素の再配列がまた新しい安定な配置を持つと考えられている。^{10),16)} そうであれば安定点間のエネルギー壁が加法性を持たないと結論することが出来る。特に調和項のみの相互作用では唯一つか、縮退した不定な安定線・面点ある。多くの安定点は相互作用に非線形な項を必要とする。では、エネルギー壁に加法性のなければどのようなことが期待されるだろう? スピン系で言えば、温度 T で隣の状態に移動するのに要する時間は $e^{\Delta/T}$ 程度で系のサイズに依存しない。従って (常磁性状態と同様に) 隣の状態間を運動する。同様に、多自由度系では安定点間を運動する。隣の安定点が相転移に拠って分離 (disconnect) するのではなく、その間の運動の複雑さ (connectivity complexity) に目を向けることが多自由度系の運動の理解への出発点である。以下で、安定点の周りと安定点間の運動を議論する。安定点数の加法性を仮定する。(次節以下で考える系では成立している)

1.4 モデル¹¹⁾ と安定点の分布

A モデル

次の Hamiltonian で与えられる多自由度系を考える。

$$H[p_i, q_i] = \sum_i^N p_i^2/2 + (1/2)V[q_i], \quad (3)$$

$$V[q_i] = \sum_j v(q_{ij}), \quad (4)$$

(q_{ij} : i と j 番目の粒子の位置座標間の距離)。 $v(x)$ は相互作用である。 p_i, q_i は i 番目の粒子の三次元空間の運動量と位置座標であり、 $6N$ 次元の位相空間内の運動 (代表点と呼ぶ) を考える。安定点は $3N$ 次元位置座標空間のポテンシャル面 $V[q_i]$ の点である。従って、以下では (??) を $V[q_i]$ での運動としてイメージする。多次元空間のポテンシャル面を平面に無理に描いたのが図 1.1 である。実線が等高線、破線が稜線を表わす。安定点は、周りを破線で囲まれた \cdot である。安定点領域 (basin) は、 \cdot を含み周りを破線で囲まれた領域をいう。

節 1.5 以降の計算では、 $V[q_i] = V[q_i + nL]$ (n : 任意の整数) の周期的境界条件を課している。一つ以上の安定点 (線・面) を持つ。多くの安定点は、Morse や Lennard-Jones 型のような斥力・引力を同時に持つ場合だけでなく、 x^{-12} のような斥力だけの場合にも現われる。安定点の粒子配置を得るには具体的に $v(x)$ を与える必要がある。

B 安定点の分布

分布について幾つかの特徴を挙げる。
 先ず、

- (1) $V[q_i]$ を最小にする (これを $V[q_i^0]$ で表わす) のは粒子の規則正しく並んだ結晶配置である (証明はな

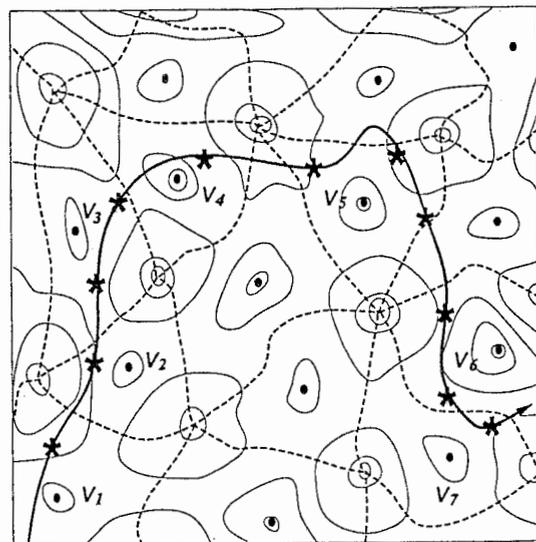


図 1.1 安定領域構造

いが、信じてよい)。一方、アモルファスな粒子配置の $V[q_i^a]$ は、

(2) $V[q_i^a] - V[q_i^c] \propto N$ を満たす。何故なら、局所的にアモルファスな配置を持つ相互作用エネルギーは結晶配列のエネルギーに比べ高い値を持つので、全粒子配置をアモルファス又は結晶配置で敷き詰めて得られる場合の相互作用エネルギー差は系のサイズ・粒子数 N に比例する。ここで安定点数の加法性を用いた。部分的に結晶配置を持ち部分的にアモルファスな配置を持つ場合もあるので

(3) 安定点は $V[q_i^c]$ から $V[q_i^a]$ まで連続的に分布する。更に、

(4) アモルファスな粒子配置の種類は多様であろうが、結晶配置の種類は限られる ((4) は計算機シミュレーションでは確からしい)。

(1)-(4) から、「安定点の分布は、 $V[q_i^a]$ 近傍で非常に大きく、エネルギーが $V[q_i^c]$ に近づくに従って急激に減少する」であろう。 $N = 32$ と粒子数は少ないが $v(x)$ を Lennard-Jones の計算機シミュレーションでは、安定点の殆どが知られており、この安定点分布のプロフィールを支持する。¹²⁾

1.5 内の運動

系 (3) の安定点の内と間の Hamiltonian dynamics をこの節と次の節で調べる。系のサイズは $N = 32, 108$ で、 $v(x)$ は Lennard-Jones 型である。この節では、一つの安定点の周りの運動を議論する。安定点と粒子配置がアモルファス的なから結晶的なまで多種多様である。アモルファスに見える粒子配置を持つ安定点のいくつか選んだ場合と、面心立方の結晶配置をもつ安定点の場合で最大 Lyapunov 数を計算する。計算は、初期値の与え方の難しさもあり、最も真面目な方法である $\{p_i, q_i\}$ と $\{p_i + \delta_i, q_i + \eta_i\}$ ($|\delta_i|, |\eta_i| \ll 1$) の $\{|\delta_i|, |\eta_i|\}$ 運動方程式を書き下し Schmidt の直行化を行なう方法を取った。結果は図 1.2 にある。横軸は (軌道に沿った) 粒子当りの運動エネルギーに相当する量 (T) であり縦軸は最大 Lyapunov 数 (λ) である。 T は $(2/3)$ (一自由度当たりの運動エネルギー) である。また、時間の単位として 10^{-14} 秒が使われる。アモルファス状態での安定点の周りは

$$\lambda_a(T) \simeq 6.3(T - T_0), \quad (T_0 \simeq 0) \quad (5)$$

である。結晶状態の安定点の周りは、

$$\lambda_c(T) \simeq 1.2(T - T_0), \quad (T_0 \simeq 0.023) \quad (6)$$

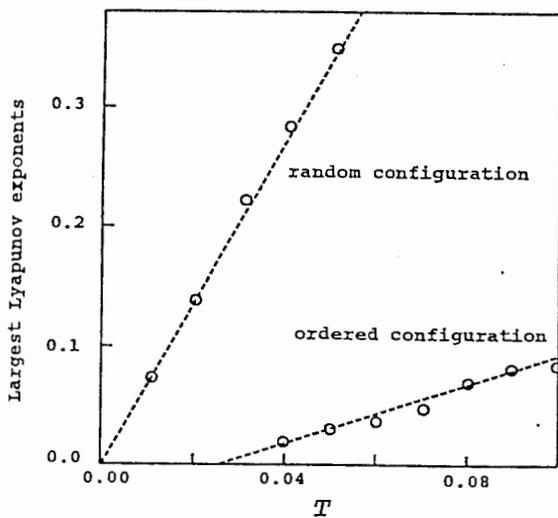


図 1.2 最大リアプノフ数

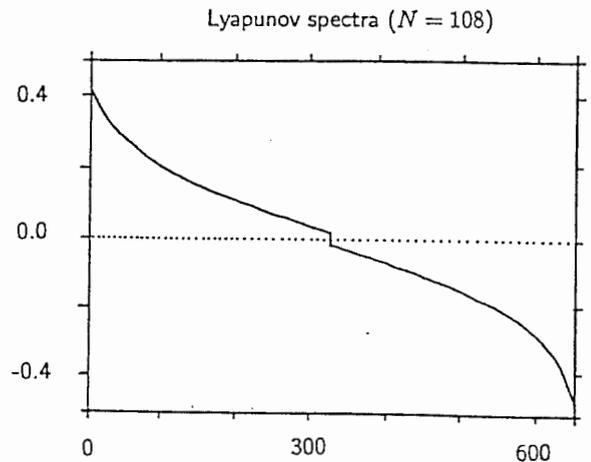


図 1.3 リアプノフスペクトル

である。\$T\$ が大きくなり過ぎると他の安定点に行く。アモルファス状態に対応した位相空間の領域では結晶状態に対応した位相空間領域より強い軌道不安定性を持つことが結論される。図 1.3 はアモルファス状態 (\$N = 108\$) で \$T \simeq 0.05\$ の Lyapunov 数を大きい順に並べた spectra である。\$\lambda=0\$ のギャップは収束不足の為である。スペクトルは \$\lambda > 0\$ で下に凸の性質を持つが、限られた方向に特に軌道不安定性が大きくない。また、\$0.01 \le T \le 0.05\$ で初期値を変えた計算を行なうと、何時でも、ほぼ同じ大きさの最大 Lyapunov 数が得られることはアモルファス状態に対応した位相空間領域で、KAM トーラスが占めている領域は小さいことを意味する。

「固体」状態は空間的にアモルファスな粒子配置を持つ。従って、「固体」状態の運動を調べるために、空間的にアモルファスな粒子配置の初期値から出発した運動を以下で調べる。

1.6 間の運動

A 写像と運動の分類¹¹⁾

代表点の運動は \$6N\$ 次元の位相空間の軌道を描く。運動は時間 \$t\$ に連続な \$\{p_i(t), q_i(t)\}\$ で得られる。運動を安定点間の運動として考えるいくつかの方法がある。一つの方法は一定時間間隔 \$\Delta\$ で \$\{p_i(n\Delta), q_i(n\Delta)\} (n = 1, 2, \dots)\$ の代表点がどの安定点領域 (basin) にいるかで番号を割り振る。安定点領域の番号 \$(1, 2, \dots)\$ の付け方は、最初に現われたものを 1 とし次に現われた (1 と違った) 安定点領域を 2 とし、次々に番号を増やす。これによって時系列 \$\{p_i(t), q_i(t)\} \rightarrow \{n_1, n_2, n_3, \dots\}\$ (\$n_i\$ は正整数)、つまり、

$$n_{i+1} = \psi_i n_i, \quad (7)$$

と定義する写像 \$\{\psi_i\}\$ を得る。また、\$n_i\$ を安定点での相互作用エネルギー値 \$V_i\$ で置き換えれば、

$$V_{i+1} = \psi'_i V_i, \quad (8)$$

の写像 \$\{\psi'_i\}\$ を得る。(7) の方法の面白いのは、連続な時系列 \$\{p_i(t), q_i(t)\}\$ を Bernoulli 列の様な単純な正整数列で置き換え可能で、色々と遊ぶ舞台を提供してくれる点である。(著者は、更に、軌道 \$\{p_i(t), q_i(t)\}\$ と \$\{n_1, n_2, \dots\}\$ が一対一に対応し記号力学系として考えられないかと思う)

B 三つの運動の形態

粒子数 \$N = 108\$ で \$\{p_i(t), q_i(t)\}\$ を実際に計算する。運動は次の三つのタイプに分類される;

type 1: 高いエネルギーでは代表点は色々な安定点を通る。通過する異なる安定点数 \$s(t)\$ は、

$$s(t) \simeq Nc(T)t \quad (9)$$

となる。ここで、\$T\$ は粒子の平均運動エネルギーで \$c(T) \simeq e^{-b/T}\$ (\$b\$: 定数)。通過する安定点は、アモルファス状態に対応する粒子配位を持つ。(図 1.4 の上段) 図 1.4 は (8) で定義される \$V_{i+1} = \psi'_i V_i\$ の運動を示してある。横軸の時間の単位は \$10^{-14}\$ 秒で縦軸は一粒子当りの相互作用エネルギーで 125K(温度に換算して) が単位である。

type 2: 中間のエネルギー領域では、初めの内は type 1 と同様に、通過する安定点数 \$s(t) \simeq Nc(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_c\$) で終わり、最後は、数個の安定点に入る。\$\tau_c\$ はエネルギー \$T\$ が減少するにつれ短くなる。粒子配置を見ると、\$0 \le t \le \tau_c\$ ではアモルファス状態であり \$\tau_c \le t\$ で hcp と fcc 構造が混在したよ

うな結晶状態になる。運動は、常に、相互作用エネルギーを低くする方向に進行する。運動に不可逆性が現われる。(図 1.4 の中段)

type 3: 低エネルギー領域では、初期に数個の安定点に入り、それ以後間欠的 (intermittently) に安定点を変えながら、type 2 と同様に相互作用エネルギーを低くする方向に運動は進行する。type 2 との違いは間欠な運動の変化である。粒子配置は初期にはアモルファス状態であり長時間後には結晶状態になる。(図 1.4 の下段) 更にエネルギーが減少すると、最初に入る安定点に滞在する時間が増大する。その時間の伸びは、エネルギー減少のどの様な関数になるかは初期値依存性が強く解っていない。

この分類は、運動のテンポラルな振舞いに注目して行なわれているのであって、短時間での力学的な振舞いや長時間に渡る平均量には現われない。type 2, 3 と type 1 との違いは、運動に現われる不可逆性である。

1.7 非対称 (非可逆的) 運動

Hamilton 系を扱っているにも関わらず、不可逆性は何故現われるのだろうか? 次のように説明出来ないか。結晶状態で、粒子はほぼ決まった位置座標を取る。又、アモルファス状態では色々な粒子配置を取ることが出来るので結晶状態を取る理由はないように見える。しかし、運動の滞在時間を決めるのは運動量空間 Ω_p と位置座標空間 Ω_q の積で与えられる位相空間 Ω の体積である。運動量空間の体積 Ω_p は、粒子当りの平均運動量エネルギーに相当する量 T で表わせば、 $\Omega_p \simeq T^\gamma N$ (γ

は適当な定数) となる。($\Omega_p \simeq T^{\gamma N}$ と書けるのは 図 1.4 三つの運動の形態 自明ではなく、各粒子の間で運動エネルギーのやり取りが活発に起こる必要がある。このことは、運動量空間での mixing の性質と関係している。計算で、簡単に、また、初期値を色々変えても最大 Lyapunov 指数が求まることから見ても、位相空間で KAM トーラスの占めている領域は非常に小さく、mixing の性質は成り立っているように思える) アモルファス状態と結晶状態で相互作用エネルギー差は、粒子数 N に比例することを (1.4.B) で述べた。type 2, 3 では相互作用エネルギーを低くする方向に運動が進行する。type 2, 3 で運動の初期はアモルファス状態であり終状態では結晶状態である。Hamilton 系であるので、これは運動エネルギーが増大する過程である。つまり、運動の進む過程で $T \rightarrow T + \Delta$ (Δ はアモルファスと結晶状態での粒子当りの相互作用エネルギー差で、 $O(1)$ のオーダーを持つ) となる。つまり、初期と終状態で運動量空間の体積比は $\Omega_p(\text{終状態})/\Omega_p(\text{初期状態}) \simeq e^{\gamma \Delta}$ となる。つまり初期状態での位相空間の体積が終状態の位相空間の体積に比べ小さくなり、終状態への運動に方向性が現われる。type 2,3 の結晶状態に移行する理由はこの性質を反映していると考えられる。この機構に類似のことが摩擦に於けるエネルギー散逸過程で起こっている。¹³⁾

しかし、この考えは、一見すると納得出来そうであるが、次の点で不満である。(1) 運動量空間の体積は増えるが、位置座標空間の体積は減り、掛け合わせた位相空間の体積は増大するのか減るのか?(2) その機構は type 1 でも起こるのではないか? 上で述べた機構は

- (i) 運動量空間での運動が位置座標空間の運動に比べずっと速いとき、また、
- (ii) type 3 のように安定点の basin に長い時間いて、安定点間を跳び移るような場合は理解し易い。

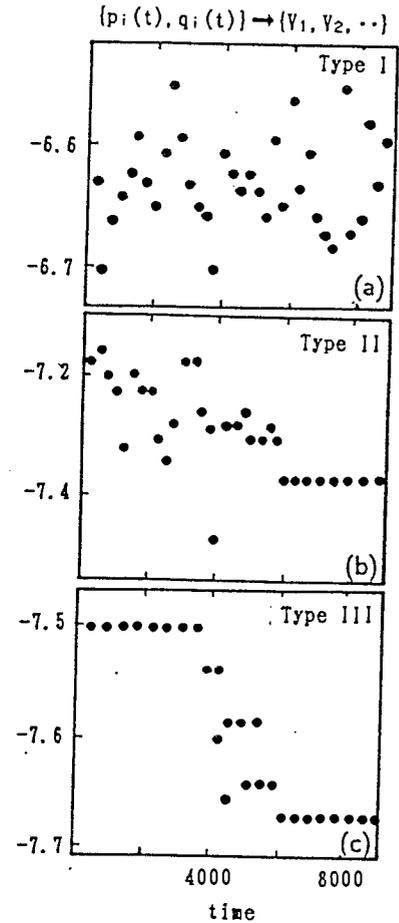


図 1.4 三つの運動の形態

(i) は、運動エネルギーを熱と呼べる運動に変換する極限である。(ii) の場合は、一つの安定状態にいる位相空間の体積の大小を(雑ではあるが)議論できる可能性がある。つまり、安定点の空間的な basin の広さは安定点から粒子の位置座標の拡散の長さ、運動量空間は平均の運動エネルギーの大きさが目安となる。type 1, 2 では実際に位置座標も動いている。(1)-(2) の疑問は「代表点はどのような位相空間のメジャーを眺めながら運動しているのか?」、或は、「運動からエントロピー増大、或は、H 関数をどのように理解するか?」と関係する。不可逆性の現れは粒子数に依存するが、計算機シミュレーションでは $N = 108$ は現われるが $N = 32$ では現われにくい。

1.8 経路問題と「固体」状態

「固体」状態は type 3 にガラス転移は type 2 と 3 の運動を分けるエネルギーとの対応が可能である。

(a) type 2 の初期状態の運動は type 3 の運動と似ている。一方、type 3 では type 1, 2 とは違い、初期の状態ですぐ安定点に入ったままである。この時、系の拡散は小さくなり、系はあたかも「固体」の様に振舞う。

(b) type 2 は色々な安定状態を飛び回る運動があるが、type 3 はそのような運動が抑えられている。この為、比熱は type 2 に比べ type 3 で小さくなる。これは節 1.2.A で述べた(口)のガラス転移の実験的特徴と類似する、等々。(類似した考えが、¹⁴⁾ 粒子の icosahedral ordering の成長を観察することで与えられている)

type 3 はどのような運動なのか? 安定点間をどのように運動するのか? 次の特徴が認められる。^{11),15)}

(0) 安定点間の遷移は速く起こり、安定点の周りで長時間滞在することを繰り返す、

(1) 少数(数個)の粒子が安定点間の運動の要因である、

(2) 少数の粒子運動に他の多くの粒子が追従し、cascade diffusion を起こす、

(3)(1) の運動は連鎖的で、粒子運動は三次元座標空間で線を描くように起こる、

(4) 時々、相互作用エネルギーを高くする安定点に運動する、

(5) 初期値の僅かな違いで異なる安定点間の運動が起こる、

等である。

(1) は安定点間のエネルギー壁が有限であること、

(2) は距離の離れた安定点間を運動する、

(3) 運動の起こり易い方向がある、

(4) 安定点間の運動は、落ち着き先の安定点を見ていない、

(5) 色々な運動の経路(path)がある、ことを意味する。

運動の分類は、エネルギー(運動の強さ)に応じて path の見え方が違うことを示唆する。

一つの安定点内の運動は既に十分にカオス的で複雑である。type 3 の緩和運動は、これらの複雑な運動の遷移として起こり、トーラスの部分的な崩壊で起こるアーノルド(Arnold) 拡散と違う。また、KAM トーラスに長く滞在する誘導現象でもない。既に、十分カオス的である(安定点内の)運動の間の運動であり高次元系に特有なものに見える。

「固体」状態の緩和は、高次元で path をどのように探すか(経路問題)/ 運動の間の運動の複雑さ(connectivity complexity) と関係している。「固体」状態のエルゴード性の破れは相転移ではなく path の複雑さに基づく様に思える。著者は、「固体」状態の運動を多次元空間のルービックキューブを考えている。そのゲームのルールは、なるべく相互作用エネルギーを下げることである。(2) 式の特異点は次元数が ∞ で出て来る筈である。

最後に、type 3 の運動の不可逆性は、「固体」状態の位相空間の体積は結晶状態に比べ非常に小さいことを意味する。「固体」状態は、高いエネルギーではランダム粒子配置を持つ状態が位相空間の大きな体積を持つが、急冷によって、その体積が小さくなった状態である。「固体」状態運動は、低エネルギーで大きな体積を持つ位相空間領域に(結

晶状態)に移行する運動である。この不可逆性は、よく例に出される「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」という通
常の非可逆性と異なり、更に確率の低い強い非可逆的運動である。

参考 & 文献

- (1) in *Science and Technology*, ed. by Uhlmann R. D., and Kreidl N. J. (Academic, New York, 1983)Vol.1; in *Science and Technology*, ed. by Uhlmann R. D., and Kreidl N. J., (Academic, New York, 1985)Vol.3,
- (2) Anderson P. W., *Ill-condensed matter*, Les Houches ed. by Balian R., Maynard R., and Toulouse G., (North Holland, Amsterdam, 1979)p.159,
- (3) *Lectures in the science of complexity* ed. by Stein D. L., (Addison-Wesley, 1989),
- (4) Kohlrusch R., *Ann. Phys. (Leipzig)*43, 393(1847),
- (5) Vogel H., *Z. Phys.*, 22, 645(1921).; Fulcher G. S., *J. Am. Ceram. Soc.*, 8, 339(1925),
- (6) Steinhardt P. J., Nelson D. R., and Ronchetti M., *Phys. Rev. Lett.*, 47, 1297(1981),
- (7) エントロピー効果で相転移を示す例として Braum の、一つの穴とその他の多くの等価な状態をもつゴルフ・コース・モデル(これも NP 困難な問題の一つ、現在数千の NP 困難な問題が知られている)がある,
- (8) Binder K. and Young A. P., *Rev. Mod. Phys.*, 58, 801(1986). スピングラスの文献多数あり,
- (9) Anderson P. W., *Physica*, 140A, 405(1986),
- (10) この問題に対して何人かが考えている。
 - (a) 新上 - 佐々田 (*Prog. Theor. Phys.*, 78, 573(1987)) は一次元格子気体模型で任意の相互距離を持つ二体相互作用する粒子系の基底状態の数、
 - (b) Hafner-Schilling(*Europhys. Lett.*, 8, 129(1989)) は基底状態数が圧力に不連続的に依存することを証明している、
 - (c) LaViolette-Stillinger (*Phys. Rev.*, B35, 5446(1987)) は、多粒子系で $M[N] = e^{\nu N}$ と置き計算機のシミュレーションの結果を使って ν をかなり一般的に推測する方法を与えた。安定点があるエネルギーで非常にシャープな分布すると仮定した、
- (11) Shinjo K., *Phys. Rev.*, B40, 9167(1989); *J. Chem. Phys.*, 90, 6627(1989),
- (12) Stillinger F. H., and Weber T. A., *Science*, 225, 983(1984),
- (13) 新上和正, 平野元久, *物性研究*, 3月号(1991),
- (14) Jonsson H. and Andersen H. C., *Phys. Rev. Lett.*, 60, 2295(1988),
- (15) 正確に言えば、幾つかの粒子の再配列がまた新しい安定な粒子配置を持つことは、 $M[N] \simeq e^{\nu N}$ の必要条件であるが十分条件ではない。 $M[N] \simeq e^{\nu N}$ は $O(N^\alpha)$ や $O(1)$ の項を無視しているからである。重要なのは、運動と関係するのはどの部分なのかである。

多粒子系は、様々な粒子配置を時間的に変えながら運動して行く。この際に生じる運動を、特に安定な粒子配置に相当する領域 (basin) を拠り所にしながら、領域の内部の運動と領域の間の運動に分けて基礎的な性質を議論しよう。

2.1 始めに

(保存ハミルトン系²⁾ の) 高次元系のダイナミクスについて、特に安定領域間の運動に関する基礎的 (rubik-ishige cube を含む) な考え方を議論しよう。この研究の動機は、多粒子系の「固体」状態の運動を理解したいという思いに端を発して、運動の全体像を (統計力学の相図で端的に代表されるようにパラメータをいろいろ変えて運動を分類するというのではなく) そのままの形で理解したいという願いから来ている。その際の具体的な問題意識は 2.2.F に述べてあり、その節までがこの報告の序論である。

特にここで述べたいのは、運動を運動の形で理解するために運動に '強度' (dynamical intensity) なる考えを導入する点と安定領域間の隣接の仕方の複雑さ、即ち、経路の複雑さを考える点である。経路の複雑さを理解するためのトイ・モデルとしてルービック・イシゲ・キューブ (rubik-ishige cube) を導入する。

高次元系の運動に関するモデルと記号の約束と幾つかの性質を、又、何を問題にしようとしているのかを説明することから始めよう。高次元系は、自由度の数、サイズ依存性に注視するのが出発点である。³⁾

2.2 モデルと幾つかの問題

A モデル

次の多粒子系のモデルを考よう。⁴⁾

$$H[p_i, q_i] = \sum_i^N p_i^2/2 + (1/2)V[q_i], \quad (10)$$

$V[q_i] = \sum_j v(q_{ij})$ 、(q_{ij} : i と j 番目の粒子の位置座標間の距離)。 $v(q)$ は粒子間相互作用である。以下考えようとする系の空間の次元数は 3 である。空間の次元性は運動や力学的性質に大きく影響する。例えば、Lennard-Jones 型⁵⁾ やバネで⁶⁾⁻⁸⁾、⁹⁾ 相互作用する一次元系は、ただ一つの構造的に安定な粒子配置 (局所安定点と呼ぶ) を持ち、且つ、力学的には KAM トーラスが現れ易い系である。他方、空間の次元性が高くなると、沢山の局所安定点が現れ、且つ、KAM トーラスは非常に現れ難くなる。(現れ易いとか難しいとかは、人間にとって意味あるパラメータ領域に現れるかどうかを指す。この性質は、例えば、サイズ依存性、示量性があるかどうかなどに関係する。) p_i 、 q_i は i 番目の粒子の三次元空間の運動量と位置座標である。 $V[q_i]$ の空間の次元数は $(3N-3)$ (N : 粒子数) である。次元数は、空間の次元数 (3) に粒子数を掛けたものから全粒子に対して一様な変位の自由度 (3) を引くことで与えられる。系の空間のように三の次元数を持つものと $V[q_i]$ のような多数の次元数を持つ空間があらわれ紛らわしいので、以下では区別して系の空間を単に実空間と呼ぶことにしよう。多次元空間のポテンシャル面を平面に無理に描いたのが図 1.1 であった。安定点は $(3N-3)$ 次元位置座標空間のポテンシャル面 $V[q_i]$ の点である。実線が等高線、破線が稜線を表わす。安定点は、周りを破線で囲まれた・で示してある。安定領域 (basin) は・を含み周りを破線で囲まれた領域をいう。

以下で述べる動的性質は、主に三次元実空間の Lennard-Jones 型で相互作用する系で調べられたが、より広いクラスの相互作用 (ポテンシャルの深い所と高い所が系のサイズに比例するような) 系でも成り立つように思える。(この条件については、2-5 でまと

めておく。)以下では、 $V[q_i]=V[q_i+n^\alpha L^\alpha]$ (n^α : 任意の整数; $\alpha=x, y, \text{ or } z$) の周期的境界条件を課す。また、

(i) $v(q) > -\infty$ 、

(ii) $v(q)$ は大きい q で q^{-d} (d は実空間次元数、 $d=3$) より速く減衰するとしよう。

この時、 $V[q_i]/N > -\infty$ となり、実空間で偏った粒子分布は排除され大体一様な粒子の配置が安定に現れることになる。また、様々な安定な粒子配位の間でポテンシャルエネルギー値の比較で出来るようになり図 1.1 のポテンシャル面が意味を持つようになる。

B 写像と運動の分類

保存ハミルトン系の代表点 (phase point) の運動は $2(3N-3)$ 次元の位相空間内の軌道を描く。軌道は、運動方程式を解くことによって時間 t に連続な $\{p_i(t), q_i(t)\}$ で得られる。多粒子系がいろいろな粒子配置を変えながら運動するとき、局所安定領域と隣接する安定領域の間の運動に注目するのは自然であろう。(何故ならば、配置を変化させるためには運動して行くためにはいろいろな安定領域を運動して行く必要があるからである。)このような運動を取り出しかたにいくつかの方法がある。¹⁰⁾ 一つの方法は一定時間間隔 Δ (Δ に任意性があるが最も運動の違いを取り出すよう選ぶ) で $\{p_i(n\Delta), q_i(n\Delta)\}$ ($n = 1, 2, \dots$) の代表点がどの安定領域 (basin) にいるかで番号を割り振る。安定領域の番号 (1, 2, ...) の付け方は、最初に現われたものを 1 とし次に現われた (1 と違った) 安定領域を 2 とし、次々に番号を増やす。(ポテンシャル面 $V[q_i]$ が沢山の安定点があること、又、ポテンシャル面はそれらの安定領域領域によってオーバーラップなしに分割されるという事実を使っている。)この方法によって時系列 $\{p_i(t), q_i(t)\} \rightarrow \{n_1, n_2, n_3, \dots\}$ (n_i : 正整数)、つまり、

$$n_{(i+1)} = \psi_i n_i \quad (11)$$

を定義するシフト写像 $\{\psi_i\}$ を得る。また、 n_i を安定点での相互作用エネルギー値 V_i で置き換えれば同様に

$$V_{i+1} = \phi_i V_i \quad (12)$$

のシフト写像 $\{\phi_i\}$ を得る。

C 二つの時間スケールと観測時間

多自由度系には、再帰時間と緩和時間という二種類の時間スケールがある。再帰時間は the Poincaré の再帰時間¹¹⁾ である。有限な相空間の体積を持つ系では、位相点はある時間を経て初期点に近い領域に再帰すると。平均の再帰時間 τ_{recur} を求める表式は Smolukhovsky¹²⁾ が得ている。mixing のある系では再帰時間は相空間の体積の大きさに比例する: $\tau_{recur} \simeq e^{\theta N}$ (θ : 観測者の測定精度によって決まる)。マクロ系では再帰時間が非常に大きくなることから、Boltzmann¹³⁾ は運動に非可逆性が現れることを論じた。

他方、緩和時間 τ_{relax} は初期点の集合が近似的に相空間に一様に散らばる時間である。Krylov¹⁴⁾ は緩和時間を完全気体という簡単な系で $\tau_{relax} \simeq mL^2/4h$ (h : Planck 定数; L : 系のサイズ) を得た。しかし、緩和時間はどのような系に対しても有限かどうかかわからない。例えば、ガラス系では非常に長い緩和時間をもっている。以下では、安定領域間の運動を観測時間 τ_{ob} で眺めて運動形態の分類を行なう:

$$0 < \tau_{ob} \leq \tau_{relax} (\ll \tau_{recur}). \quad (13)$$

D 安定領域間の運動

$\{p_i(t), q_i(t)\}$ を実際に計算するとエネルギーの変化に依って運動は次の三つの型に分類される。⁴⁾ ¹⁾ 分類は、運動のテンポラルな振舞いに注目して行なわれているのであ

¹⁾ 初期値に依存する。この場合はランダムな配位に相当する初期値から出発する。

て、短時間での力学的な振舞いや長時間に渡る平均量には現われない。(例えば、以下の分類はリアプノフ指数に反映しない。何故なら、分類は安定点の間の運動の時間スケールはリアプノフ数を規定する時間スケールに比べ大きいからである。)

type 1: 高いエネルギーでは代表点は色々な安定領域を通過する。通過する異なる安定領域の数 $s(t)$ は、 $s(t) \simeq Nc(T)t$ となる。ここで、 T は粒子の平均運動エネルギーで $c(T) \simeq e^{-b/T}$ (b : 定数) の依存性を持つ。(第1章の。) 図 1.2 は (12) で定義される $V_{i+1} = \phi_i V_i$ の運動を示してある。

type 2: 中間のエネルギー領域では、初めのうちは type 1 と同様に、通過する安定領域の数は $s(t) \simeq Nc(T)t$ となる。type 1 と違う点は、type 1 の運動はある時間経過後 (τ^*) で終わり、最後は、数個の安定領域を遍歴する。 τ^* はエネルギー ϵ_k が減少するにつれ短くなる。運動は、相互作用エネルギーを低くする方向に進行する。この運動を非対称運動 (asymmetric motion) と呼ぼう。非対称運動とは、隣接する安定領域間の非対称な遷移運動を意味する。つまり、相互作用エネルギーを低くする遷移は起こりやすいが、エネルギーを高くする遷移運動は現れにくいことをさす。(図 1.2 の中段)

type 3: 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 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。type 2 との違いは運動の変化に現れる間欠性である。(図 1.2 の下段) エネルギーが更に減少すると、安定領域に滞在する時間が増大する。その時間の伸びは、エネルギー減少のどの様な関数になるかは初期値依存性が強く解っていない。

E 安定領域内の運動

代表点が一つの安定領域に留まっているときの最大リアプノフ数 λ_a はその安定領域がどのような粒子配置をとっているかに依存する。しかし、かなり規則正しい粒子配置を除けば大体同じになり λ_a は $\lambda_a(T) \propto (T - T_0)$ 、($T_0 \simeq 0$) となる。ここで、 T は大きくなると隣の局所安定領域に容易に行くようになるので、 T は長い間一つの安定点に滞在しリアプノフ数が収束する程度の小さな値である。従って、リアプノフ数は隣の局所安定領域に行かない程度の時間スケールでの値である。対応した位相空間の領域では強い軌道不安定性を持つことが結論される。また、初期値を変えた計算を行なうと、何時でも、ほぼ同じ大きさの最大リアプノフ数が得られることと $T_0 \simeq 0$ であることは、全エネルギーで位相空間領域で、KAM トーラスが占めている領域は極めて小さいことを意味する。

F 幾つかの問題

(d1) type 1 と type 2, 3 の違い: type 2, 3 と type 1 との違いは、運動に現われる一方向性 (非対称運動) である。この運動は通常の意味で非可逆的であるにも拘らず "非可逆性" という語を使わなかった。この理由は、隣接する安定領域間の遷移の運動に注目し、相互作用エネルギーを低くする方向に運動が進行することを強調したからである。よく例に出される「最初に箱の右半分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」という非可逆性は、系がカオス運動を行なうとき常に現われるからである。¹⁵ この非可逆性は、上の全ての運動の type に共通に見られる。それでは、非対称運動は何故現われるのだろうか。系の短時間の振舞いに、例えば、リアプノフスペクトラムには特にこれらの運動の差異は現われない。type 1 と type 2,3 の運動の違いはどの様な力学的性質の違いから生じるのだろうか。

(d2) type 3 の運動: type 3 の運動は「固体」状態の運動に対応している。¹⁶⁾ 安定領域内では KAM トーラスが占めている領域は極めて小さい。このことは、type 3 の隣の安定領域への遷移運動は、トーラスの部分的な崩壊で起こるアーノルド (Arnold) 拡散ではない。また、KAM トーラスに長く滞在する誘導現象でもない。既に、十分カオス的である (安定点内の) 運動の間の運動であり高次元系に特有なものに見える。(「固体」状態の運動がアーノルド拡散であるという研究者¹⁷⁾ もいる。) type 3 の運動は type 1,2 とどのように違うのであろう。また、type 3 は異なる安定領域を間欠的に遷移する運動

である。このとき、経路問題が課題となる。つまり、どのような隣接する安定領域を繋ぐ遷移経路を運動するのだろうか。

(d3) 安定領域間の構造と運動: 多粒子系は二次相転移に類似したガラス転移を一般に持つ。^{18),19)} これは次の性質と関わりがある。つまり、二つの安定領域間のポテンシャル壁は系のサイズに比例するという加法性の性質を持つか否かである。加法性を持つなら二つの安定領域間は系のサイズが大きくなると disconnect されガラス転移は真の相転移となる。統計力学で記述される相転移は常に系のサイズに比例する量、つまり、測度を問題にしている。(粒子ガラスや特に短距離相互作用を持つスピニングラスのガラス転移が本当に相転移かどうか、また、「固体」状態では多数の「相」が存在するかどうかの論争がある。²⁰⁾)

一方、もし仮に加法性を持たないならば真の相転移でなくなる。この時、加法性を持たない系が疑似相転移を起こす機構はどのようなものであろう。非加法性を持たないにも拘らず二次的相転移に類似したガラス転移が現れるという矛盾を前述の経路問題に於ける経路の複雑さ (path complexity、或いは、connectivity complexity) が解消してくれるのではないだろうか。統計力学で、系の自由度の粗視化をとうして相と相の経路は驚くほど単純化されたのに対し、「固体」状態は系の自由度が粗視化されずむきだしのまま残ってしまうと考えたいのである。(これは期待である。)

これらの問題を、運動を統計力学でよくやるように相図を書いて終りにするのではなく、運動はそれ自身どのような運動の違いを作り出して運動を変えるのかということから考えたい。

2.3 運動の強度

運動に「強度」というものを導入して、type 2,3 の非対称運動が何故現れるのかを考えよう。

A トートロジー

保存ハミルトン系を扱っているにも関わらず、非対称運動は何故現れるのであろうか。この問いに対して以下の(一見もっともらしい)答えがある。

「相互作用エネルギーの低い状態で、粒子は規則正しい配列の粒子位置を取る。又、エネルギーの高い状態では色々な粒子配置を取ることが出来るので規則正しい粒子状態を取る様に運動が進行して行く理由はないように見える。しかし、運動の滞在時間を決めるのは運動量空間 Ω_p と位置座標空間 Ω_q の積で与えられる位相空間 Ω の体積で与えられる。運動量空間の体積 Ω_p は、粒子当りの平均運動量を ϵ_k で表わせば、 $\Omega_p \simeq \epsilon_k^{dN/2-1}$ となる。²⁾ ($\Omega_p \simeq \epsilon_k^{dN/2-1}$ と書けるのは自明ではなく、各粒子の間で運動エネルギーのやり取りが活発に起こる必要がある。これは、運動量空間での mixing の性質と関係している。エネルギーの高い状態と低い状態でエネルギー差は、粒子数 n に比例する。type 2,3 では相互作用エネルギーを低くする方向に運動が進行している。type 2,3 で運動の初期はエネルギーの高い状態であり終状態では低い状態である。ハミルトン系であるので、これは運動エネルギーが増大する過程である。つまり、運動の進む過程で $\epsilon_k \rightarrow \epsilon_k + \Delta$ (Δ はエネルギーの高い状態と低い状態での粒子当りの相互作用エネルギー差で、 $O(1)$ のオーダーを持つ) となる。つまり、初期と終状態で運動量空間の体積比は $\Omega_p(\text{終状態}) / \Omega_p(\text{初期状態}) \simeq e^{\gamma \Delta}$ となる。つまり初期状態での位相空間の体積が終状態の位相空間の体積に比べ小さくなり、終状態への運動に方向性が現れるだろう。]

しかし、このような議論はナンセンスである。type 2,3 のエネルギーの低い状態に移行すると認めた上で位相空間の体積を考えているからである。

B 二つの時間スケールと強度

²⁾ dN は自由度の総数である。

それではどのように考えたら良いだろう。手がかりを得るため、次の二つの典型的な例、つまり、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非常に短時間で通過する場合を考えてみよう。先ず、前者の場合は、各粒子は色々な運動量を取りながら系は色々な状態を巡るであろう。この時、経巡る運動量 $\{p_i\}$ の位相空間の体積は上で与えたように $\Omega_p \simeq \epsilon_k^{dN/2-1}$ で与えるだろう。これは、一つの安定領域内で色々な状態を経て運動量の位相空間の体積が運動と直接関連してくるような例である。後者の例では、短時間で各粒子の運動量は殆んど変わりがなく一つの安定領域を通過する。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、 $\Omega_p \simeq \epsilon_k^{dN/2-1}$ の運動量の位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。この二つの例は、運動に依存して経巡る運動量に関する位相空間の体積がはっきり異なることを教えてくれる。そして、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、代表点の運動量の位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)時間スケールと一つの安定領域を通過する(これは位置座標空間 $\{q_i\}$ の運動と関係する)時間スケールである。(運動量と位置座標空間の運動の時間スケールで単純に考えてしまっても良いのかという疑問が湧くかもしれない。しかし、我々は安定領域間の運動に注目していることと上記の二つの極限の思考例からこのように考えるのは自然である様に思える。)

ここで運動の強さを導入しよう。強さは、運動量の位相空間の体積をサンプリングする運動量空間の運動と代表点の一つの安定領域を通過する位置座標空間での運動のどちらが強いかわるものを与えるものである。運動の強さ $(\sigma(T))$ で表すは

$$\sigma(T) = \tau_p / \tau_q, \quad (14)$$

で定量化される。ここで、 τ_q と τ_p は上記の二つの時間スケールである。添字 q と p は各々位置座標空間と運動量空間に関連することを表す。 $\sigma(T)$ は示強性でなければならないに注意しよう。何故なら、理解しようとする非対称運動の現れは系のサイズ $(N \gg 1)$ の条件で)に依存しないからである。運動の強さ $\sigma(T)$ は次の簡単な意味を持つ: $\sigma(T) < 1$ なら、運動量空間で色々な状態をサンプリングすることによりマルコフ化が現れ運動量空間の体積の大小が運動に反映する。

平たく言えば、運動量が単に‘熱’の役割を演じる場合に相当する。他方、 $\sigma(T) > 1$ では、その逆で、位置座標空間での色々な安定領域をサンプリングする運動である。 $\sigma(T) = 1$ が二つの空間での運動がバランスする転移点である。 $\sigma(T) > 1$ が type 1 に $\sigma(T) < 1$ が type 2,3 に相当し、 $\sigma(T) = 1$ の転移点が type 1 と type 2,3 の運動の境界点であるというのが以下の主張である。主張の正否は、 $\sigma(T) = 1$ が T について一価関数であり、唯一つ転移点を持つのか、また、解いた値が実験で測定された結果や計算機シミュレーションで得られた結果と一致するかどうかから判定される。(正確には、方程式 $\sigma(T) = 1$ が T について一価関数でなければならないという一般的な理由はない。多価である場合には、type 1 と type 2,3 の運動を複数繰り返して現れることになる。単に、これまでのシミュレーションでは現れなかっただけである。)

C 運動量と位置座標空間での拡散

二つの時間スケール τ_q と τ_p を問題にしよう。準備のため、代表点の運動量空間と位置座標空間での拡散運動を調べよう。絶対拡散 $a(t)$ と相対拡散 $r(t)$ は各々、

$$a_{p,q}(t)^2 = a_p(t)^2 + a_q(t)^2, \quad r_{p,p';q,q'}(t)^2 = r_{p,p'}(t)^2 + r_{q,q'}(t)^2, \quad (15)$$

で定義される。ここで、

$$a_p(t)^2 = \frac{1}{3N} \sum_i |p_i(t) - p_i(0)|^2, \quad a_q(t)^2 = \frac{1}{3N} \sum_i |q_i(t) - q_i(0)|^2, \quad (16)$$

$$r_{p,p'}(t)^2 = \frac{1}{3N} \sum_i |p_i(t) - p'_i(t)|^2, \quad r_{q,q'}(t)^2 = \frac{1}{3N} \sum_i |q_i(t) - q'_i(t)|^2 \quad (17)$$

である。 $p'_i(t)$ 、 $q'_i(t)$ 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座標である。定義から判るように、絶対拡散は代表点の一つの軌道上での移動する距離を、相対拡散は二つの軌道が分離する距離を与える。相対拡散と絶対拡散に対して次の三角不等式が厳密に成立する。

$$r_{q,q'}(t)^2 \leq a_q(t)^2 + a_{q'}(t)^2 + r_{q,q'}(0)^2, \quad (18)$$

$$r_{p,p'}(t)^2 \leq a_p(t)^2 + a_{p'}(t)^2 + r_{p,p'}(0)^2, \quad (19)$$

一緒にして、

$$r_{p,p';q,q'}(t)^2 \leq a_{p,q}(t) + a_{p',q'}(t) + r_{p,p';q,q'}(0). \quad (20)$$

拡散は次の二つの性質を持つ:

(p1) 位置座標に関する絶対拡散は、普通、 $a_q(t)^2 \simeq (1/2)D_q(T)t(D_q(T):$ 拡散係数)の時間依存を持つノーマル拡散である。この性質は q に依らない。又、

(p2) Olesedec の定理²¹⁾より、相対拡散は短い時間間隔 t (極端に短い時間を除く) で指数関数で増大する。つまり、 $r_{p,p';q,q'}(t)$ 、 $r_{p,p'}(t)$ 、 $r_{q,q'}(t)$ は $e^{\lambda_a t}$ (λ_a : 最大のリアプノフ数) の時間依存性を持つ。(全ての type で運動はカオス的であったことを思い出そう。)

不等式 (18) は、(p1)(p2) の性質により、二つの異なる時間依存性を持つ時間領域があること、即ち、

$$0 < t < \tau_c \text{ の時間領域で、} r_{q,q'}(t)^2 \simeq r_{q,q'}(0)^2 e^{2\lambda_a t}, \quad (21)$$

$$\tau_c < t \text{ の時間領域で、} r_{q,q'}(t)^2 \simeq r_{q,q'}(0)^2 e^{2\lambda_a \tau_c} + D_q(T)(t - \tau_c), \quad (22)$$

となる転移時間 τ_c が存在することを示す。何故なら、不等式 (18) の左辺は短時間領域で指数関数的発散をする。他方、右辺は t に比例する。ある時間領域以降で左辺の指数関数的発散が止まらなければこの不等式と矛盾するからである。(注 1 を参照。)

この τ_c は何であろうか。運動量空間での相対拡散 $r_{p,p'}(t)$ に注目しよう。位置座標空間で相対拡散との時間的振舞いで著しい違いは、時間領域 $t \gg 1$ で $r_{p,p'}(t)$ 増大は頭打ちになることである。これは、運動エネルギーは正の値であること、全エネルギーが一定の保存系であること、ポテンシャル $V[q_i]/N$ はロアーバウンドであることから結論される。(2.2.A を参照。) $r_{p,p'}(t)$ が頭打ちになる時間 t_c が上記の τ_c に等しいと考えることが出来る(以下の議論を参照)。 $r_{p,p'}(t)$ も短時間領域で $r_{p,p'}(0)e^{\lambda_a t}$ のように指数関数的発散する。 $r_{p,p'}(t)$ が頭打ちになるの時間 t_c で $r_{p,p'}(t) \simeq \sqrt{2T}$ (T : 一粒子当たりの運動エネルギー)となるので

$$\tau_c, t_c \simeq \frac{1}{2\lambda_a} \left[\ln \left(\frac{2T}{r_{p,p'}(0)^2} \right) \right] \quad (23)$$

を得る。

t_c が上記の τ_c に等しいと考えられるのは以下の議論による。二つの運動量の組 $\{p_i(t)\}$ と $(t=0$ で $\{p_i(0)\}$ と僅かに違う) $\{p'_i(t)\}$ を考えよう。短時間のうちでは、 $\{p_i(t)\}$ と $\{p'_i(t)\}$ の差は小さく強い相関を持った運動をする。差は時間と共に大きくなりその差が開いて頭打ちになってくると $\{p_i(t)\}$ と $\{p'_i(t)\}$ の相関は消失する。それ以後は $\{p_i(t)\}$ と $\{p'_i(t)\}$

は'あたかも'独立に振舞う。その効果として、運動量に'マルコフ性'が導入され $r_{q,q'}(t)^2$ にノーマル拡散が現れるようになる。(この辺りを表現するのは難しい。)このことは、実際に計算機シミュレーションで確かめることが出来る。計算で得られた $r_{q,q'}(t)$ と $r_{p,p'}(t)$ の時間的振舞いが対数の目盛で図 2.1 に与えてある。両方とも時間の小さいうちは t に比例して増大する、ある時間(図で $t \approx 280$)で $\ln[r_{p,p'}(t)]$ の増大が止まると同時に $\ln[r_{q,q'}(t)]$

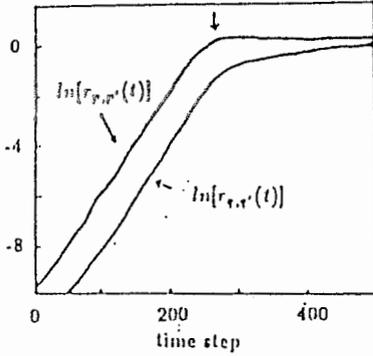


図 2.1 位置座標と運動量空間での相対拡散

が時間 t に $\ln(t)$ に比例して増大することが判る。(図では、 $\ln[r_{q,q'}(t)]$ が頭打ちになっているのではなく増大し続けているところを見て欲しい。)これは、運動量空間の相対拡散の運動の性質が位置座標の運動に質的变化を与える一例である。ここまでは、二つの軌道の相対拡散を考えたが初期値の僅かずつ違う軌道のアンサンブル、例えば、 $\{p_i(t), q_i(t)\}$ を中心とする $\{\Delta p_i, \Delta q_i\}$ だけ異なる初期値を持つ集合の相対拡散についても同様に考えることが出来る。(17)は色々な q, p, q', p' のアンサンブルに対しても成立する。)この時も、 τ_c は運動量空間の相対拡散のみから決まり、結果は

$$\tau_c \approx \frac{1}{2\bar{\lambda}_a} \left[\ln\left(\frac{2T}{r_{p,p'}(0)^2}\right) \right] \quad (24)$$

となる。ここで $\bar{\lambda}_a = (1/6N) \sum_i \lambda_i (>0)$ で自由度当たりの正のリアプノフ数の平均(K.S. エントロピー)であり、 $\Delta\bar{p}$ はアンサンブルに対する各粒子の運動量の平均の初期値差である。以上をまとめると、 $0 < t < \tau_c$ で相対拡散は運動空間でも位置座標空間でも指数関数的に増大し、 $\tau_c < t$ では運動空間での相対拡散は頭打ちになる一方で位置座標空間では時間の \sqrt{t} に比例して増大する。

二つの時間スケール τ_q と τ_p を評価しよう。図 2.1 での $r_{p,p'}(t)$ と $r_{q,q'}(t)$ の時間的振舞いを考えると、 $\{q_i(t)\}$ に注目する時その運動にマルコフ化が生じる時間スケールが τ_c であることを示している。換言すれば、 τ_c の時間スケールで運動を粗視化(course graining)すれば $\{q_i(t)\}$ の運動はマルコフ過程と見なせることを意味する。このことから、 τ_c を τ_p と等しい量であると考えられるだろう。一方、 τ_q は、代表点が一つの(位置座標に関係する)安定領域を通過す時間スケールである。位置座標が拡散する距離は絶対拡散 $a_q(t)^2 (= (N/6)D_q(T)t)$ で規定されるので、安定領域の広さを与える長さを ℓ で表せば、

$$\tau_q = \frac{6\ell^2}{N} \frac{1}{D_q(T)} \quad (25)$$

となる。この二つを用いると、運動の強さ

$$\sigma(T) = \tau_p / \tau_q, \quad (26)$$

$$= \left(\frac{N}{6\ell^2}\right) \frac{D_q(T)}{2\bar{\lambda}_a(T)} \left[\ln\left(\frac{2T}{\Delta\bar{p}^2}\right) \right], \quad (27)$$

(ℓ : 一つの安定領域の広さを与える長さ; $D_q(T)$: 拡散係数; T : 粒子当たりの運動エネルギー; $\bar{\lambda}_a$: 最大 Lyapunov 数; $\Delta\bar{p}$: 運動量の平均の初期値差)。(注 2 を参照。) $\sigma(T)$ の T 依存性は主に $\bar{\lambda}_a(T)$ と $D_q(T)$ から来る。最大のリアプノフ数 $\bar{\lambda}_a(T)$ と $D_q(T)$ が T のどのような関数になるかは図 2.2 と 2.3 に与えてある。 $\bar{\lambda}_a(T)$ はほぼ T に比例する。

また、多数の計算機実験²²⁾からも $D_q(T)$ は $e^{-b/T}$ の依存性³をもつことが確かめられて

図 2.2 最大 Lyapunov 数 v.s. T

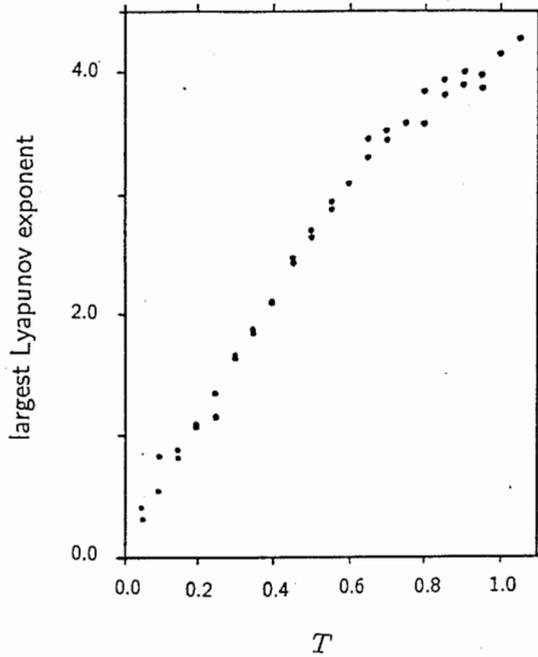
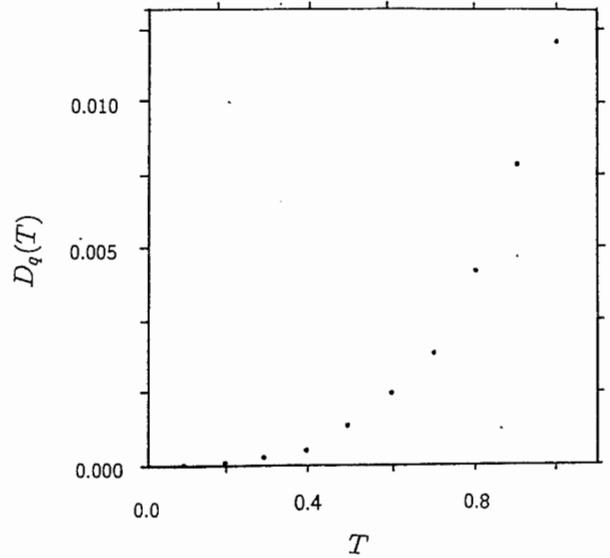


図 2.3 拡散係数 v.s. T



いる。(小さい T を除く。) これらの依存性から、

$$\sigma(T) \simeq \frac{N}{2\ell^2} e^{-b/T} \left[\ln\left(\frac{2T}{\Delta\bar{p}^2}\right) \right] \quad (28)$$

を得る。右辺の因子 $(2\ell^2/N)$ の T 依存性が無視できれば、 $\sigma(T)$ は T の単調増加関数であり、 $\sigma(T) = 1$ を満たす T は唯一つ存在すると結論できる。また、 τ_q は、代表点が時間 t の間に通過する局所安定領域の個数 $s(t)$ を使って表わすことが出来る。 $s(t) \simeq Nc(T)t$ ($c(T) \simeq e^{-b/T}$ (b : 定数)) から、

$$\tau_q = \frac{1}{c(T)}. \quad (29)$$

これを (26) に代入すれば

$$\sigma(\epsilon_k) \simeq \frac{c(T)}{2\lambda_a(T)} \left[\ln\left(\frac{2T}{\Delta\bar{p}^2}\right) \right] \quad (30)$$

となる。この T 依存性は、(27) の $\sigma(T)$ の T 依存性と一致する。(異なる量を使って表したにも拘らず。) (30) の利点は、(27) の ℓ を評価することは難しいが、 $c(T)$ はシミュレーションから直接求めることが出来る点である。

また、(27) と (30) を比較して、basin のサイズとして

$$\frac{\ell^2}{3N} \simeq \frac{D_q(T)}{c(T)}$$

を得る。

³ $D_q(T) \simeq e^{-2.133/T}$ 。

(30) を用いて、 $\sigma(T^*)=1$ を満たす転移点を実際の系で計算してみよう。Lennard-Jones 系で実際に計算した $s(t)$ と $\lambda_a(T)$ を計算した結果と

$$c(T) \simeq \frac{\sqrt{T}}{5.82} e^{-2.16/T},$$

の結果と、また、 $\Delta p \simeq h/L$ (h : Planck 定数; L : 系のサイズ ($\simeq 1\text{cm}$)) を使えば、転移点 $T^* \simeq 0.48$ (この系では 125K が単位のエネルギー) を得る。一方、シミュレーションから得た type 1 と type 2,3 の転移点は $T^* \simeq 0.50$ である。²¹⁾ この一致は偶然か必然か判らないがかなり良い。(数値上的一致というのは、傾向の一致という結果より気味の悪いものである。偶然かどうかは、他の相互作用系で調べることが必要であろう。)

拡散係数は

$$D_q(T) \simeq 0.12\sqrt{T}e^{-2.13/T}$$

であることから、 $l^2/3N \simeq 0.698e^{0.03/T}$ 。 T の依存性を無視すれば 1 自由度当たりの basin サイズとして $l/\sqrt{3N} \simeq 0.8354$ であり、殆ど fcc 構造の最短隣接粒子間隔 ($\simeq 0.77$) に等しい値を得る。

他にも、Truncated Lennard-Jones 相互作用で確かめられている。¹⁾

注 1) τ_c が運動量空間で 'マルコフ化' が起こる時間スケールであることは重要である。このことは更に他の統計力学で現れる関係式で確かめるには必要があるだろう。転移点の上では位置座標空間の運動が強く、転移点以下で運動量空間の運動が強く現れる。ここで安定領域間の運動を対象としている。上で、運動量空間の相対拡散が頭打ちになると位置座標空間での相対拡散に質的変化が現れることを言ったが、逆に、位置座標空間での相対拡散の頭打ちが運動量空間の相対拡散に質的変化をもたらす場合はあるであろうか。これは無いように思える。'思える' というのは、小さな T (≤ 0.2) を除いて運動量空間の相対拡散が頭打ちになると位置座標空間での相対拡散に影響する現象が見える。しかし、小さな T では、運動量と位置座標空間の相対拡散は指数関数にのらないで増大と減少を不規則に繰り返し、また、初期値依存性が強いのでハッキリした結論を下せない。初期値のアンサンブル平均すれば時間依存性がハッキリするだろうが、相対拡散は軌道の (必ずしも小さくない) 分離距離を計算する必要があるために計算機の能力からも不可能である。(このような T に対してリアプノフ数は計算することが出来る。何故なら、リアプノフ数は微小な分離距離のみを考えているために軌道の差に関する最低次の運動方程式を考えれば済むからである。)

注 2) 上で拡散係数やリアプノフ数のような平均化された量を用いた。しかし、代表点がある安定領域から他の隣接するどの安定領域に移行するかを考える時、(運動量と位置座標は力学変数としてお互い独立であるが、) 位置座標を通してポテンシャル値と運動量の大きさは関係している。このため、二つの空間での運動は一つの安定領域から境を接する沢山の隣の安定領域のどの安定領域に行くかの過程では密に絡まっているために、むしろ、各安定領域での平均化しない拡散係数やリアプノフ数に相当する量を使うほうが適当であろう。

2.4 type 3 の運動

type 3 はどのような運動なのだろうか。多自由度ハミルトン系で幾つかの性質と散逸系との比較、又、type 3 の運動のモデル化を議論しよう。

A 幾つかの性質

type 3 は、非対称運動と安定領域間の間欠的遷移が特徴である。更にどのような性質を持つのだろうか。³⁾

(1) 強い軌道不安定性 (strong dynamic instability): 安定点間の遷移は速い。つまり、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) は共に時間 t の指数関数に増大する。つまり、

$$a_q(t) \simeq e^{\lambda_a t}, \quad r_{q,q'}(t) \simeq e^{\lambda_r t}. \quad (31)$$

λ_a や 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。

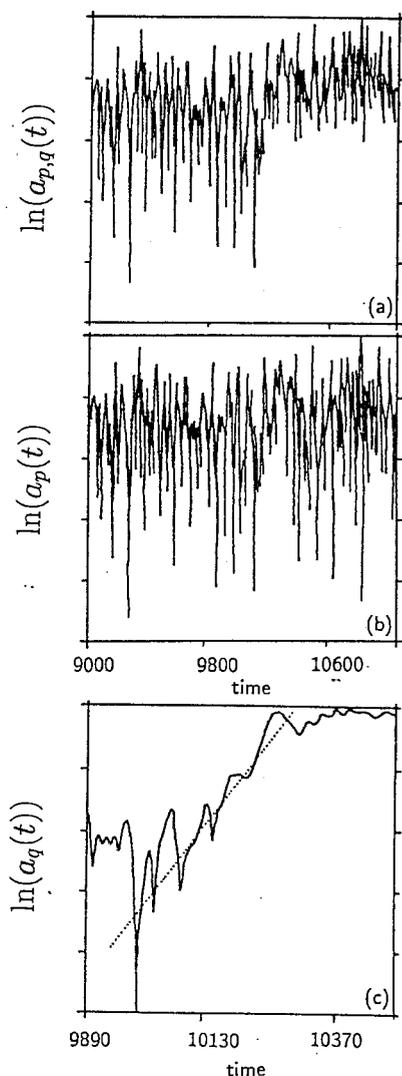
(3) 容易な経路形成 (easy path formation): 遷移過程で、粒子運動は連鎖的で、粒子運動は三次元位置座標空間で線トポロジーを描くように起こる。

(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、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。)

性質 (1) は相対拡散のみならず絶対拡散も指数関数的増大するのが特徴である。遷

図 2.4 相対拡散の時間的振る舞い

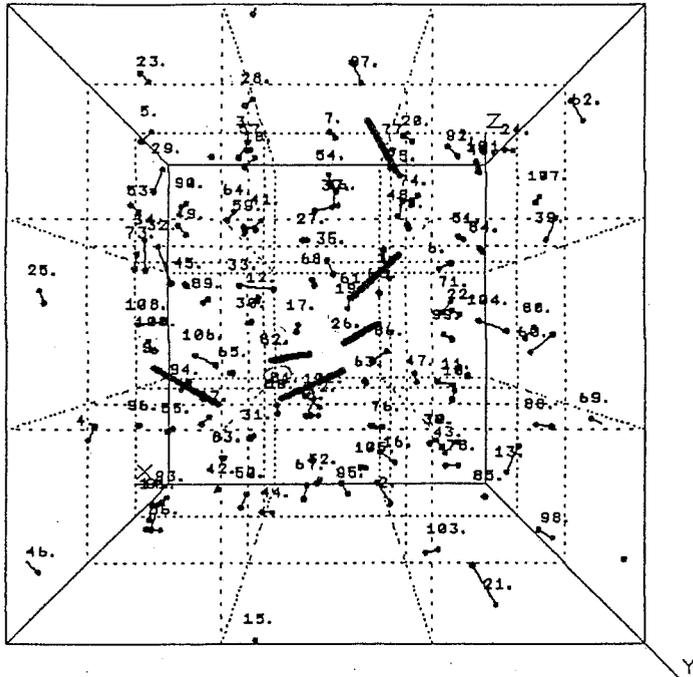


移過程では少数粒子が特に速く運動し、この速さが絶対拡散と相対拡散への指数関数依存性に反映する。この運動は、代表点が (小数自由度に関係した) 不安定多様体に沿って運動した結果と見なすことが出来る。(計算では、エネルギーをもう少し上げると遷移過程での絶対拡散は指数関数的ではなくノーマル拡散に近いのも多く現れる。これは、不安定多様体から離れた所を運動する場合に期待される。) 図 2.4 に、間欠遷移過程で絶対拡散 $a_{p,q}(t)$ ($=\{a_p(t)^2 + a_q(t)^2\}^{1/2}$) が対数目盛で時間の関数として示してある。間欠的遷移は $10000 < t < 10250$ の間で起こる。 $a_{p,q}(t)$ の指数関数的時間依存性は、(時間的に激しく振動する運動量空間の絶対拡散 $a_p(t)$ (図 2.4 の中段) を取り去った部分を見れば、つまり、 $a_q^2(t)$ (図 2.1 の下段)) から明らかになる。

性質 (2) は安定領域内で僅かに初期値の異なる代表点はその後安定領域内の軌道不安定性によって少し時間の後に安定領域のサイズ程度に広がってしまう結果である。性質 (3)(4)(5) は図 2.5 で説明しよう。この図は図 1.4 の下段の t が 3800 付近で起こる間欠的遷移に於ける粒子の (y 方向から眺めた) 配置の変化を示している。但し、図で示してある配置は間欠遷移の前後の安定領域の安定点での粒子配置である。各粒子の位置変化は線で結んである。特に大きい位置変化は太線で小さい位置変化は細線で示してある。太線は線トポロジーを形成する。遷移に参与する粒子は空間的に強い相関をもち、運動の起こり易い方向 (easy path) がある。

各粒子に運動の時間変化を見ると、遷移は以下のように起こっていることがわかる。まず、粒子 81、82 が動く。粒子 9 は 81 が動いて出来た穴を埋めるように、26 は 82 に押し出されるように動く。(粒子 9、26 の運動は 81、82 の運動とほぼ同時であり、どちらの運動が原因で結果なのかわからない。因果律でどちらが原因でどちらが結果なのかわからない。因果律は人間が対象に抱く幻想であり意味である。) 次に、粒子 61、75 が動く。最後に、他の残りの粒子がこれらの粒子の運動に追従して遷移が完了する。

図 2.5 間欠的遷移の前後での粒子位置



この遷移運動は少数の粒子が遷移を引き起こすこと (local trigger)、つまり、遷移のポテンシャル壁はサイズに無関係に有限であること、なだれ崩壊 (cascade collapse)、つまり、遠く離れた安定領域間で遷移が起こり得ることを示唆している。一つの安定域内の運動は既に十分にカオス的で複雑である。type 3 の遷移運動は、これらの複雑な運動の遷移として起こり、トーラスの部分的な崩壊で起こるアーノルド (Arnold) 拡散と違う。また、KAM トーラスに長く滞在する誘導現象でもない。既に、十分カオス的である (安定域内の) 運動の間運動であり高次元系に特有なものに見える。

それでは、間欠的遷移を引き起こす局所的遷移要因 (local trigger) がどのように形成されるのだろうか。他の多くの自由度が準備するのだろうか、それとも、local trigger のすぐ周りの自由度のみが関与するのだろうか。或いは、静的

に眺めれば系がどのように、関係する不安定多様体に沿って運動するのだろうか。前者の立場では因果律が不明瞭になるだろう。

B 保存系と散逸系での違い

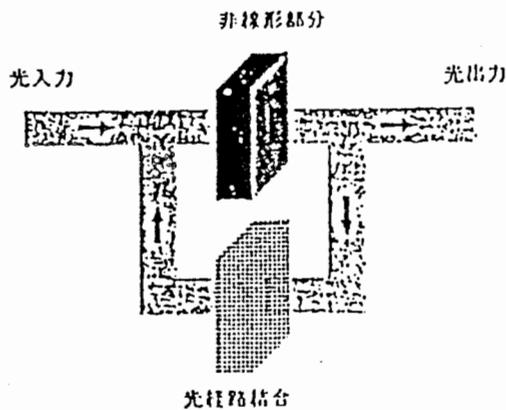
type 3 の間欠的遷移に類似した運動は散逸系にも現れる。保存系と散逸系での運動を比較しよう。(保存系或いは散逸系といっても多種多様である。) ここでは、次の遅延型微分方程式で表される高次元散逸系を考えよう。²³⁾

$$dx(t)/dt = -x(t) + \mu(1 + \sin(x(t - t_r))), \quad (32)$$

図 2.6 のような光非線形媒質を含むループの $x(t)$ に相当する) 光強さは、この方程式によって記述される一つの例である。 μ はレーザー強さに対応する。この系の特徴的時間は光非線形媒質の応答時間 T_m と遅延時間 T_r がある。式 (32) では、時間は T_m で規格化されている、つまり、 $t_r = T_r/T_m$ である。(32) の $x(t)$ の運動をイメージするには、例えば、一定の (応答時間に相当する大体 $O(1)$ の) 幅を持った光パルス (pulse) を $0 \leq t < t_r$ の時間区間に日一杯に詰め込んだパルス列 (パケット) の運動を考えれば良い。(32) で左辺の $dx(t)/dt$ がなければ、パケット内の各パルスは $\mu(1 + \sin(\text{パルス強さ}))$ の一次元非線形写像に従って増幅や減衰が生じる。(写像を作用させる時間間隔は t_r である。) 各パルスはそのままでは独立であるが、 $dx(t)/dt$ の項によりパケット内の隣接するパルス間で相関が現れ、互いに相互作用しながら運動することになる。十分長い遅延時間で、 $1 \ll t_r$ 、この系は (高次元ハミルトン系が持つ性質に) 類似した、或いは、相違する幾つか

の性質を持つ。(この系の詳細には立ち入らない。¹⁷⁾) 例えば、類似した性質は、(s1) 多重領域構造 (multiple basin structure): 状態空間に沢山のアトラクターが共存する。

図 2.6 遅延型ループ系



高次元ハミルトン系で言えば、ポテンシャル面 $V[q_i]$ が沢山の安定領域に分割されるのに対応している。(アトラクターの概念は、ハミルトン系にはない。)(s2) 遍歴的性質 (wandering property): レーザー強さ μ を上げれば、幾つかのアトラクター (mode) は一緒になってより大きなアトラクターを形成する。(ハミルトン系で言えば μ はエネルギーに相当するが、各安定領域内の運動が真に分離されているのかどうかは安定領域間のポテンシャル壁の高さの加法性と関係しており未解決の問題である。) 一方、相違する性質は、(d1) 再帰性 (recurrence) である、つまり、アトラクター間の遷移運動は逆の遷移も同じ程度の '確率' で起こり可逆的である。ハミルトン系では非対称運動が現れ再帰性は起こり難い。

この散逸系の運動を調べる一つの方法は、節 (2.2.B) と同様に、アトラクターをスカラー量で表現することによって実行できる。このシフト写像の方法で軌道を調べると、この散逸系は間欠的遷移運動を生じることが判っている。この散逸系での間欠的遷移運動は、高次元ハミルトン系での性質 (1)-(4) と類似した性質を持つ。即ち、(1) 強い軌道不安定性 (strong dynamic instability): 絶対拡散と相対拡散は共に時間 t の指数関数的に増大する。(2) 複数の経路形成 (multi path formation)、(3) 容易な経路形成 (easy path formation)、(4) 局所的遷移要因 (local trigger) である。 t_r に比べ狭い時間領域でのみ信号 $x(t)$ が変化する。しかし、性質 (5) のなだれ崩壊 (cascade collapse) はこの散逸系では起こらない。換言すれば、'近距離' のアトラクター間でのみ遷移する。(遷移は必ず隣接アトラクター間で起こるが近距離である理由はない。) この性質は、この散逸系が(光パルスの伝搬方向に対応して実空間の次元は) 一次元的であることに起因するように思える。つまり、隣接する光パルス間で強い相関が働くことから、最も空間的に局在した不安定遷移のモード (負のリアプノフ数を持つベクトル) の方向に遷移が起こりやすくなる。また、そのような遷移は遷移過程でリアプノフベクトルの方向を余り変化しないだろう。この為、遷移は近距離のアトラクター間で完了する。これは、一つの自由度はその周囲のより多くの自由度と強い相関を持ちながら運動する空間的により高い次元性を持つ場合と比較すべきである。実空間の次元性が高い系では遷移過程でリアプノフベクトルは大きく方向を変える場合がある。その例は、図 2.4 で運動量の絶対拡散は遷移過程で激しく振動していることから判る。これまで調べた範囲では、この散逸系ではなだれ崩壊が起こるような例はない。この理由は、多数のアトラクターが共存するパラメータ μ の領域が狭いためであるように思える。粒子系では、二準位系 (two levels system) での粒子運動に対比されるだろう。

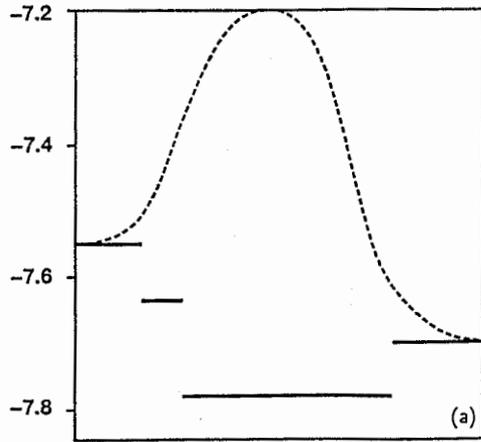
他の散逸系でも間欠的遷移運動は起こるが、これらについては文献 [24] を参考にしたい。

C type 1,2 との違い: 経路の複雑さ

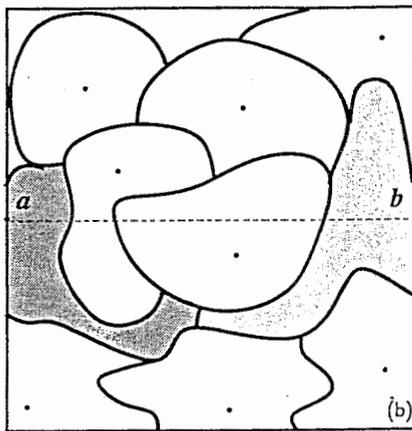
type 3 の運動は、高次元ポテンシャル空間で隣接する安定領域の遷移経路の複雑さ (path complexity、或いは、connectivity complexity) と関係していることをこの節で示そう。以前、代表点 (phase point) を $(3N-3)$ 次元数の) 多次元空間のポテンシャル面 $V[q_i]$ の上の運動としてイメージできることを述べた。多次元空間のポテンシャル面は多数の安定領域に分割され、代表点の軌道はこれらの安定領域の上に射影 (onto mapping) するこ

とで表された。一つの安定領域は多数の他の安定領域が隣接している。図 2.7 は経路の複雑さと type 3

図 2.7 間欠的遷移上の安定点分布



Distribution of V^m on the shortest path between a and b



Complex connectivity of transition path

の運動を模式的に二次元平面に描いたものである。始め、安定領域 a にいるとしよう。type 3 の運動では、代表点は安定領域 a 内で長い時間で滞在し、次に隣接する他の安定領域 b に遷移する。注目すべき点は安定領域 a と b を繋ぐ経路の '複雑さ' である。type 3 の運動と経路の複雑さが関連していることを示めすことが出来る。図は計算で実際に起こった間欠的遷移過程の前後の安定領域の安定点を結ぶ直線上の点がどの安定領域に属しているかを示している。計算は前後の安定領域の安定点を結ぶ直線上の位置座標がどの安定領域に属するかを調べず計算を行なった。直線上の点は安定領域内の安定点でのポテンシャルエネルギー値 $V[q_i]$ に射影してある。図では間欠的遷移の前後の安定領域の間に他の二つの領域が入り込んでいる。破線は直線上のポテンシャル値である。これに対して、type 1,2 の運動では、殆んどの場合遷移する二つの安定領域の安定点を結ぶ直線上には他の安定領域は入り込まない。

type 3 の運動で間欠的遷移は (i) 局所的遷移要因 (local trigger) で引き起こされる。このことは、type 3 の遷移は、図 2.7 に示したようなポテンシャル空間で限られた方向を持つ遷移経路を運動することを示している。次元数は local trigger の自由度数と同程度でなければならない。ポテンシャル面の空間の次元数 $(3N-3)$ から比べれば非常に少ない経路の次元数である。また、複数遷移経路の形成 (multi path formation) はこの様な経路は一つだけではないことを示している。type 1,2 と type 3 での実際に遷移する二つの安定領域の間の構造の違いは、エネルギーに応じて遷移する経路が違うことを意味している。

経路の複雑さ (path complexity、或いは、connectivity complexity) はどの様に定量化され type 3 の運動と関連しているのだろうか。このことを行なうには、経路の複雑さに関係する '手続き' を導入する必要がある。この複雑さを測定する量の 1 つは、初期と終期の basin の間に割り込んでくる他の basin の個数である。(図での complexity は 2 である。)

D ルービック・イシゲ・キューブ・ハミルトンニアン

type 3 の運動の重要さは (著者にとって) 二つある。一つは、(1) type 1,2,3 を含めた運動の全体像を創ることである。運動はそれ自身どのような運動の違いを作り出して運動を変えるのかということの問題にしている。非対称運動の現れの解釈はその一例である。もう一つは (2) type 3 の運動は「固体」状態の運動に対応していることである。(この点は余り述べなかった。) 視点は、節 (2.2.D) の問題 (d3) から来ている。つまり、

安定領域間の構造と運動との問題で、系の‘非統計力学性’と二次相転移に類似したガラス転移の存在との矛盾を経路問題に於ける経路の複雑さ (path complexity) が解消してくれるのではないかという期待からである。type 3 の運動の特徴は、(i) 安定領域間の間欠的遷移、(ii) 隣接する安定領域の遷移経路の複雑さ (path complexity)、(iii) 限られた方向を持つ遷移経路、(iv) 非対称運動の現れ。特に遷移過程では、(v) 強い軌道不安定性 (strong dynamic instability): 絶対拡散も時間 t の指数関数的に増大する、(vi) 複数の経路形成 (multi path formation)、(vii) 容易な経路形成 (easy path formation)、(viii) 局所的遷移要因 (local trigger)、(ix) なだれ崩壊 (cascade collapse) の現れ、等々である。

この節では「同時に大きな変化しうるのは小数の自由度のみである制限付きの運動は間欠的遷移を産む。即ち、(iii) の限られた方向を持つ遷移経路は (i) の間欠的遷移運動を引き起こす」ことをハミルトン ルービック-イシゲキューブ (rubik-ishige cube の Hamilton 系) でデモンストレートしよう。ルービック-イシゲ キューブをこのためだけなら使わなくてもよいが、type 3 の運動のトイ モデルとしての役割を期待しているからである。

ルービック・イシゲ・キューブはマジック・キューブ (magic cube) とも呼ばれる。²⁵⁾⁻²⁶⁾ 1975 年にハンガリーのルービック (Ernö Rubik) と 1976 年に日本の石毛照敏によって独立に発明され、三次元空間で $3 \times 3 \times 3$ の立方体の中の小立方体を色が揃うようにもってゆくゲームである。このキューブがどう構成されているかを理解するのも難しい (これを機構問題というらしい)。実際に製作することが出来るかどうかの問題を別にすれば、キューブの実空間の次元数を三以上の高次元に拡張したり、更に $n \times n \times n$ (n : 任意の正整数 (≥ 2)) のものを考えることができる。以下では、 $n \times n \times n$ の三次元空間のキューブを考えよう。キューブの色のパターンは $n=3$ で 43,252,033,274,489,856,000 ($\approx 4 \cdot 10^{19}$) 個、 $n=2$ で数百万個もある。このパターンの多さは、ルールを知らないで、又は、ルールを自分で科学し習得してゆかなければルービック・イシゲ・キューブは解くことは出来ないことを意味している。

ルービック-イシゲ キューブで小立方体を色が揃うようにもってゆくための回転の操作は三種類ある。実空間の次元数に等しい三つの軸に垂直な回転である。各回転は更に n 個の異なる回転に分解できる。これらの回転操作を記号 r_i^α ($i=1,2,\dots,n$; $\alpha=1,2,3$) で表そう。キューブの 6 面からなる表面は、(各面は色の付いた $n \times n$ 個の四角形からなるので) $6n^2$ 個の四角形でカバーされる。一つの回転操作はこれら $6n^2$ の四角形の色を置き換えることに対応している。この事実から、各回転操作は $(6n^2, 6n^2)$ の行列で表すことができる。例えば、

$$r_i^\alpha \rightarrow (a_{s,t}), \quad (33)$$

$a_{s,t}$ ($s, t=1,2,\dots,6n^2$) は行列要素である。(ここでは具体的な行列の形には触れない) 逆回転操作 $(r_i^\alpha)^{-1}$ は r_i^α の逆行列として得られる。逆行列は r_i^α の適当な行列積で書ける。色が揃うようにもってゆくための回転操作の列は r_i^α の、例えば、 $r_3^1 r_2^3 r_1^2 \dots r_3^1 r_2^3$ のような行列積で表現される。形式的には群論で記述できるが、群の要素数はパターンの数に等しくなるために実行不可能である。解く手続きは、始めのパターンを指定する $6n^2$ 個の要素からなるベクトル (A_i) に上の回転操作の行列を掛けて最後に目的のパターンをベクトル (A_0) を得ることで完了する。即ち、 $A_0 = r_3^1 r_2^3 r_1^2 \dots r_3^1 r_2^3 A_i$ となる行列を作用させる手順を見出すことである。等価であるが、 A_0 に作用させて A_i を得る行列を B_i 、 A_0 に作用させて A_0 を得る行列を I 、即ち、単位行列とすれば、 $I = r_3^1 r_2^3 r_1^2 \dots r_3^1 r_2^3 B_i$ となる。逆に言えば、ルービック・イシゲ・キューブを解くことは、 $B_i = (r_2^3)^{-1} (r_3^1)^{-1} \dots (r_1^2)^{-1} (r_2^3)^{-1} (r_3^1)^{-1}$ を求めること、つまり、

「与えられた行列 B_i を r_i^α (或いは、 $(r_i^\alpha)^{-1}$) を要素として積分解することである。」

ルービック-イシゲ キューブをハミルトン形式で表そう。(正確に言えば、ルービック・イシゲ・キューブをハミルトン形式でモデル化することである。モデルに適当な解

積を与えればルービック・イシゲ キューブの回転操作をシミュレートすることである。) この方法は、幾つかの条件が与えられたとき、これらの条件を厳密に満たす (拘束条件のある) 非ホロノーム系の、或いは、これらの条件を (近似的に) 満たすように運動が進行するハミルトン関数を簡単に構成できることを利用している。ここでは、後者の場合を扱う。(非ホロノーム系については、例えば、E.T.Whittaker, 解析力学, 1972 講談社を参照。) n 個の条件式 $f_n[q_i]=0$ ($n=1,2,\dots,M; i=1,2,\dots,N$) を満たすようなダイナミクスは、

$$H[p_i, q_i] = F_\kappa[p_i] + V[q_i], \quad (34)$$

$$F_\kappa[p_i] = \frac{1}{2} \sum_{i,j}^N a_{i,j} p_i p_j (1 + (\kappa/N) \sum_{j \neq i} p_j^2), \quad (35)$$

$$V[q_i] = \sum_{i,n}^{N,M} w_n f_n(\{q_i\})^2, \quad (36)$$

(w_n : 適当な重み関数; $a_{i,j}$ は対称な非負値行列である。) から得られる。しばしば、系にカオス・運動が必要とする場合がある。この時、位置座標空間でカオス・運動を起こすメカニズムがない場合には、例えば、ポテンシャル $V[q_i]$ が q_i に関して、線形であるような場合には、 $a_{i,j} \neq 0$ ($i \neq j$) の非零の off-diagonal 行列を導入したり、或いは、 $\kappa \neq 0$ で運動量空間での相互作用を通じて無理矢理にカオス・運動を起させることが出来る。この時、 $a_{i \neq j}$ の大きさや κ はカオスが現れる強さをコントロールするパラメータ (stochastic parameter) となる。⁴ (スペースの都合でより詳細な説明は行なわない。) ルービック・イシゲ・キューブでの条件は、

- (1) 回転操作は一回、二回... というように整数であることと、
- (2) 異なる回転を同時に実行出来ないという排他律に従うことである。更に、
- (3) 色が揃うように回転する、ことである。

これらは、次のモデルで表すことが出来る、

$$H[p_i^\alpha, r_i^\alpha] = F_\kappa[p_i^\alpha] + v_1[r_i^\alpha] + v_2[r_i^\alpha] + v_3[r_i^\alpha]. \quad (37)$$

p_i^α は r_i^α の正準共役変数である。 $v_1[r_i^\alpha]$ は条件 (1)、 $v_2[r_i^\alpha]$ は条件 (2)、 $v_3[r_i^\alpha]$ は条件 (3) をシミュレートするポテンシャルである。これらの関数の選択には任意性がある。以下で、用いられる具体的な形は、

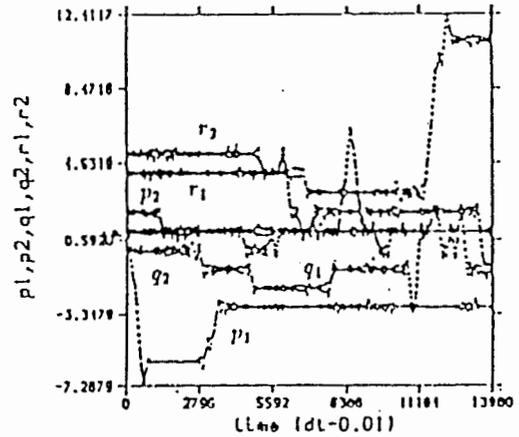
$$v_1[r_i^\alpha] = \kappa_1 / (2\pi) \sum_{i,\alpha} \sin\{2\pi(r_i^\alpha - 1/4)\}, \quad (38)$$

$$v_2[r_i^\alpha] = (\kappa_2 / 6n^2) (1/2\pi) \sum_{(i,\alpha) \neq (j,\beta)} [\sin\{2\pi(r_i^\alpha - 1/4)\} + 1][\sin\{2\pi(r_j^\beta - 1/4)\} + 1]. \quad (39)$$

κ_1 、 κ_2 はパラメータである。モデルの説明をしよう。 r_i^α は回点操作を表現する実数である。(上で、回点操作とその表現を与える行列を同じ記号 r_i^α で表した。ここでは、同じ記号を使って、回転操作の一回、二回... というような整数の回転数を表す。回転数は整数値を取るが実数値も取れるように拡張した。) 条件 (1) は、 $v_1[r_i^\alpha]$ でシミュレートされる。 $\kappa \neq 0$ で $v_2=0$ 、

⁴ 正確に言えば、 a_{ij} は全ての固有値が 1 となる orthonormal な行列で駄目である。むしろ質量を不均一にする行列でなければならない。何故なら、 a_{ij} は orthonormal であれば、 $\sum_{ij} p_i p_j$ はそのような軸変換に対しても $\sum_{ij} p_i p_j$ と書いてしまい、状況は変化しないからである。

$v_3=0$ の時の運動はポテンシャル $v_1[r_i^\alpha]$ を最小にする r_i^α の値は $\dots, -1, 0, 1, 2, \dots$ のような整数値である。 $\kappa \neq 0$ に起因するカオスは $r_i^\alpha(t)$ の滞在時間を $r_i^\alpha(t)$ が整数値をとりポテンシャルを下げる所で大きくする。条件 (2) は、同様に、 $v_2[r_i^\alpha]$ でシミュレートされる。ポテンシャル $v_2[r_i^\alpha]$ を下げる場合は、一つの r_i^α 以外の全てが $r_i^\alpha \simeq$ 整数である場合である。これから、モデルは、回転操作は整数値を取り排他的に起こる運動をシミュレートすると期待できる。(実際に起こるかどうかは、パラメータ κ_1, κ_2 の選びに依る。) モデルは、小数の (ここでは一つの) 自由度のみが同時に大きな変化する制限を持つ運動を行なう。(元々のルービック・イシゲ・キューブはこの性質を自然に持っている。)



このモデルが間欠的遷移を起こすことは図 2.8 に示してある。図は $n=2$ の三次元キューブの各回転 (三種類の回転を p_i, q_i, r_i ($i=1, 2$) で表す) の時間的振舞いを示してある。始めに適当な運動エネルギーを与えている。カオス運動は $v_2 (\neq 0)$ から起こるので、 $\kappa=0$ と置いてある。 $p_i(t), q_i(t), r_i(t)$ は整数値の周りで揺れている。そして、時々、 -1 (逆回転) か $+1$ (正回転) だけ違う値に飛び移ることが判る。この遷移が起こる時には、他の遷移が起こることはない。つまり、回転は同時に二つ以上起こることはない。回転しない状態が長く続き時々飛び移つる間欠的遷移運動を起こっている。局所安定点は全ての p_i, q_i, r_i ($i=1, 2$) が整数値を取る点であり、安定領域はこの点を囲む $-0.5 \leq p_i < 0.5, -0.5 \leq q_i < 0.5, -0.5 \leq r_i < 0.5$ の区間である。

図 2.8 回転操作の時間的振舞い

以前の多粒子系の運動との違いは、ここでは非対称運動が現れないことである。この非対称運動は、 $v_3[r_i^\alpha]$ から、つまり、色が揃うように回転する運動を創り出すポテンシャルから現れる。(しかし、この構成の仕方はここでは触れない。)

参考 & 文献

- 1) 大体の内容は、Shinjo K. and Sasada T., (submitted to Phys. Rev. E), 'Hamiltonian Systems with Many Degrees of Freedom. Asymmetric Motion and Intensity of Motion in Phase Space' であり、京大基研での '複雑系' の研究会での講演の一部でもある、
- 2) 摩擦項を含む場合は、

$$L[\dot{q}, q] = \dot{q}^2/2 - V[q] + \dot{q} \times \int_0^t g(t') dt'$$

($\dot{q} = dq/dt$) の Lagrangian から導かれる。この Lagrangian から、

$$(d/dt)(\partial L/\partial \dot{q}) = \partial L/\partial q,$$

つまり、

$$d^2q/dt^2 + g(t) - F = 0 \quad (F = -\partial V/\partial q).$$

Hamiltonian は $H = \dot{q}p - L[\dot{q}, q]$ ($p = \partial L/\partial \dot{q} = \dot{q} + \int_0^t g(t') dt'$) で与えられる。 H を計算すると、 $H = (1/2)(p - \int_0^t g(t') dt')^2 + V[q]$ 。これから正準方程式は、 $\dot{q} = \partial H/\partial p = p - \int_0^t g(t') dt'$ 、 $\dot{p} = -\partial H/\partial q = F$ 。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、 $g(t) = \lambda \dot{q}(t)$ である、

- 3) 新上和正、数理科学、'ガラスに潜む複雑さ'、35(1 991). 局所安定点数やポテンシャル壁の加法性の議論がある、
- 4) Shinjo K., Phys. Rev. B40, 9167(1989); J. Chem. Phys. 90, 6627(1989),
- 5) Galgani L. and LoVecchio G., Nuovo Cimento, B52, 1(1979),
- 6) Fermi E., Pasta J., and Ulam S., Letc. Appl. Math., 15, 143(1974),
- 7) Izrailev F. M. and Chirikov B. V., Sov. Phys. Dokl., 11, 30(1966),.
- 8) Bocchieri P, Scotti A, Bearzi B., and Longer A., Phys. Rev., A2, 2013(1970),
- 9) 他の文献は、例えば、Benettin G., Proc. Inter. School Phys. -Enrico Fermi Course XCVII, ed. G. Ciccotti and W. Hoover, 15(1988),
- 10) シフト写像は考えていないが、Stillinger F. H. and Weber T. A., Science, 225, 983(1984),
- 11) Hagihara Y., in *Celestial Mechanics V,2* (Japan Society for the Promotion of Science, 1976)p1245,
- 12) Smolukhovsky M. von, Anallen der Physik, 21, 756(1906),
- 13) Boltzmann L., Nature 51, 413(1895),
- 14) Krylov N. S., in *Works on the Foundations of Statistical Physics* (Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1979)pp200,
- 15) 熱力学での非可逆性とカオス 運動での非可逆性の意味は異なる。前者では粗視化した状態で使われるが後者では粗視化されないままの全自由度に対して使われる、
- 16) Jonsson H. and Andersen H. C., Phys. Rev. Lett., 60, 2295(1988),
- 17) Thirumalai D., Mountain R. D., and Kirkpatrick T. R., Phys. Rev., A39, 3563(1989),
- 18) 例えば, *Science and Technology*, ed. by Uhlmann R. D. and Kreidl N. J., (Academic, New York, 1983)Vol. 1; *Science and Technology*, ed. by Uhlmann R. D. and Kreidl N. J., (Academic, New York, 1985)Vol. 3,
- 19) Anderson P. W., Ill-condensed matter, Les Houches ed. by Balian R., Maynard R., and Toulouse G., (North Holland, Amsterdam, 1979)p. 159,
- 20) Newman C. M. and Stein D. L., Phys. Rev., B46, 973 (1992),
- 21) Woodcock L. V., Angell C. A., and Cheeseman P., J. Chem. Phys., 65, 11(1977),
- 22) Olesedec V. I., Trans. Moscow Mathy. Soc., 19, 197 (1978),
- 23) 会田田人, Davis P., '光カオスに内在する新機能に関する研究', 日本応用物理学会誌, 37(1991),
- 24) Ikeda K. and Matsumoto K., Physica, D29, 223(1987),
- 25) 例えば, Hofstadter D. R., 'メタマジック ゲーム' 白揚社, 1990; サイエンス, 5月号, 8(1981),
- 26) Bandelow C., *Inside Rubik's cube and beyond*, Birkhäuser, 1982,
- 27) Marx G., Gajzago E., and Gnädug P., Eur. J. Phys. 39(1982),

第3章 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する。また、NP完全性問題との関連を議論する。

3.1 始めに

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。¹⁾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。⁵⁾

この報告書の内容は、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²⁾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(V)という意味はあるパラメタ値を持つ問題のある(3)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)。³⁾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)

⁵⁾最適解が一意的に存在するのではなく屢々「より効率的」にするためには物質変数をどう動かせばよいかを決めることが可能となるのみである。¹⁾これらの問題では(最大化させる)コスト関数は二種類の変数 x_i, y_j ($i=1, \dots, m; j=1, \dots, n$)を使って(Cartan分解に類似した形式で)

$$\gamma(x_i, y_j) = \gamma^\dagger(x_i) \Psi_{\{x_i\}}(y_j) \quad (\Psi_{\{x_i\}}(y_j) \leq 1) \quad (t1)$$

と分解される。但し $\Psi_{\{x_i\}}(y_j)$ は x_i をパラメタに y_j を変数とする関数である。 y_j は x_i に依存した値 $y_j^*(x_i)$ を取る時 $\Psi_{\{x_i\}}(y_j)=1$ となる。この式から不等式

$$\gamma(x_i, y_j) \leq \gamma^\dagger(x_i) \quad (t2)$$

を得る。上記の分解は $\Psi_{\{x_i\}}(y_j)$ は y_j がどんな値を取ろうが $\gamma(x_i, y_j)$ の最大値(最小値)は $\gamma^\dagger(x_i)$ と x_i のみで決まることを言っている。上の分解式は式の存在についてであり、具体的な分解手続きを与えているのではない。また分解の仕方は $m=0$ 又は $n=0$ 以外の場合には一意的に決まらない。

Operations research (OR)のテキストでは専ら定義域は予め与えられたものとしている通常の最適化問題であり最適解が一意的に存在する。この最適化問題は $\Psi_{\{x_i\}}(y_j)=1$ となる y_j を求めることに対応する。(この際 $m=0$ であり x_i なる変数は現れない)従って、分解式は最適化問題を解くことより寧ろ二つのクラスの変数に分類される場合に意味が出てくる。効率的に変数を動かすかを決める指針は、変数 x_i に対しては $\gamma^\dagger(x_i)$ を増大させるように、また変数 y_j に対しては $\Psi_{\{x_i\}}(y_j)=1$ になるように、つまり y_j を $y_j^*(x_i)$ に近付けることになる。ORでも定義域自身が問題となる問題群が幾らでもあるように思える。

3.2 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ーを最小にする(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ー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ー

$$V_n = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^n v(\vec{q}_i - \vec{q}_j) \quad (40)$$

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⁴⁾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、また、 $v(q)$ 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

$$\frac{1}{2} \sum_{e=(i,j)} w(e) = \text{minimal} \quad (41)$$

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ー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:

$$c_1\sqrt{n} \leq d(t_c) \left(= c_3\sqrt{nt_c} \right) \leq c_2 2^{\beta n} \quad (42)$$

(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(42)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'見ざるswitching'を行う機構 - これが節3.3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。⁵⁾ 結晶化はエネルギー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たものとなっている(図3.1)。逆に運動量空間が収縮し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。この様子は屢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(初めと終りでマイ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(エントロピー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

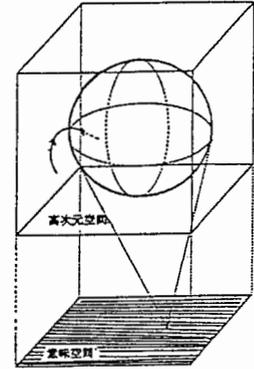


図3.1 高次元化と意味空間

$O(q(n)^{-1})$ ($q(n):n$ 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やT3D MCやVPP500などの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ェ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。

3.3 運動の強度⁶⁾と最適化機構

(この節の内容に関しては第1,2章に詳しいのでそちらを見て下さい。以下は要点のみ)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 $t_r \approx c_2 2^{6n} / (c_4 n)$ 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)

$$\Omega_q \approx (\epsilon - V[q_i])^{\frac{n}{2}-1} \Pi_i^n \Delta q_i \quad (43)$$

となる。 ϵ は全エネルギー、 $V[q_i]$ 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

$$\gamma = \left(1 + \frac{\Delta}{\epsilon - V[q_i]}\right)^{\frac{n}{2}-1} \quad (44)$$

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 $t_0 \ll t_r$ となる。この時 ($t \leq t_r$ の運動では) (43) が成立するとは期待されない。しかし、(43) 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 (43) 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^{7),8)} という言葉を導入する。その度合い σ は

$$\sigma = \tau_p / \tau_q, \quad (45)$$

$$= \frac{c(T)}{2\lambda(T)} \left[\ln\left(\frac{2T}{\Delta p^2}\right) \right] \quad (46)$$

で表される ($\lambda(T)$: リアプノフ数; ϵ_k : 粒子平均の運動エネルギー; $c(T)$: 単位時間当り一粒子が有意な $V[q_i]$ の変化する回数)。 $\sigma < 1$ で運動量空間での mixing が速く起こり (46) 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 (43)(44) 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 3.1 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。

3.4 最適化の 1 方法⁹⁾

n 個の変数を含み、これらの変数値の解としての適合性を評価する評価関数を設定できる最適化問題に対して、 n 個の変数と更に付加した変数が張る高次元化された空間で力学系を構成することによって解を求めることが出来る。即ち、この高次元空間に於ける (代表) 点が評価関数を最大又は最小にする方向に向い易く、そうでない方向には向い難いような偏りを持つ自律的な運動を行うこと (節 3.3 を参照) を利用して、評価関数の最大又は最小問題を解くことが出来る。このような方法を種々の最適化問題、例えば光ファイバーなどの光軸合わせ、位置決め、ビーム、映像などのトラッキング、半導体集積回路、電話回線網などの設計建築、トラヒックのスケジューリング、通信ネットワークのルーチング、種々の機械或いはその集合の分散制御、線形及び非線形計画法、ゲームの自動解法、画像の復元などに適用される。

設定された問題の解は評価関数或いは出力信号を最小又は最大にすることで得られる。例えば、光ファイバーの軸合わせ問題は、一對の向かい合った光ファイバーの一つを左右に動かすことによって光出力が最大にすることである。この場合、左右の変化に対し光出力を極大にする位置 (以下安定点と呼ぶ) は一つとは限らなく一般に多重になる場合がある。多重安定点を有する場合、従来方法 (最急勾配降下法など) には、探索のための出発位置に最も近い安定点のみ探し出し光出力を最大にするとは限らない多重安定点の出現という難点があった。また、確実に安定点を探すためには左右の位置変化を同時に行なうことが出来ない (並列処理できない) 難点があった。又、多芯光ファイバーの同時軸合わせ実行終了時間は、単芯の場合に比して速く出来ない問題があった。又、最適化問題の中には一般に多重安定点を持つために、ニューラルネットワークなどを用いた従来法では、最急勾配降下法と同様の (並列処理に向かない、一つの安定点に引っかかったまま) 難点があった。又、遺伝子突然変位・進化法則を真似た (遺伝子アルゴリズムなど) アルゴリズム、統計力学 (確率過程を含む) に基づくモンテカルロ法やシミュレーション・テッドアニメーション法、active/passive 制御などの従来アルゴリズムは最適化問題を解く上で同様の難点があった。これから述べる方法は

- (1) 並列処理に向かない、
- (2) 評価関数の変数の数の増大による計算量の大幅な増大、
- (3) 解くために必要なパラメータの注意深い選択 (elaborately tuning)、
- (4) 多重安定点の一つに引っかかる、などの難点を解決するであろう。

従来では探索点位置の変化による評価関数値を評価した後に探索点の位置変化させるのに対して、この方法は、評価関数値の変化を探索点の運動として内部表現化することで実行する。この方法により探索のための出発点が評価関数を最大又は最小にするように向かおうとする自律的運動を構成し、従来方法の難点を解決する。

評価関数を $V(q_1, q_2, \dots, q_n)$ (以下簡単に $V[q_i]$ で表わす) と表わす。ここで q_i は評価関数を指定する意味変数で n は意味変数の個数である。評価関数 $V[q_i]$ を最小にする意味変数を $q_1^0, q_2^0, \dots, q_n^0$ (以下簡単に $\{q_i^0\}$ で表わす) とする。以下、一般性を失うことなしに最小にする場合のみを考えてよい。何故なら、最大にする意味変数を求める場合には評価関数を $-V[q_i]$ と取ることにより最小にする問題に帰着されるからである。評価関数を定義する n 個の変数の他に余分な変数を付加した高次元空間で力学系を構成し、高次元空間での探索のための出発点が評価関数を最大又は最小にする方向に向い易く、(評価関数を最大又は最小にしないような) 他の方向には向い難いような高次元空間での探索点の運動に偏りを持つような自律的運動を構成する方法は、力学系がハミルトン関数を持つか又は持たないクラスの力学系の場合でも行なうことが出来る。ここではハミルトン関数を持つ力学系での方法を述べる。意味変数 q_i に正準共役な変数 p_i を導入して運動を指定する力学系のハミルトン関数を

$$H[p_i, q_i] = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} (p_i + \int_0^t g_i(t') dt') \times (p_j + \int_0^t g_j(t') dt') + V[q_i] \quad (47)$$

と設定する。 $g_i(t)$ は問題に依って設定される。例えば、 $g_i(t) = -\lambda(t) dq_i/dt$ ($\lambda(t)$ はパラメーターである。) また、 a_{ij} は自律的運動を導入するための行列である。自律的運動は、正準方程式

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H[p_m, q_m]}{\partial p_i} = \sum_{j=1}^n a_{ij} (p_j + \int_0^t g_j(t') dt'), \quad (48)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H[p_m, q_m]}{\partial q_i} = -\frac{\partial V[q_m]}{\partial q_i} \quad (49)$$

を解くことにより得られる。全エネルギー変化は、

$$\frac{dH[p_i, q_i]}{dt} = g_i(t) \sum_{ij=1}^n a_{ij} (p_j + \int_0^t g_j(t') dt') \quad (50)$$

$$= -\lambda(t) \sum_i \left(\frac{dq_i}{dt} \right)^2. \quad (51)$$

$\lambda(t)$ は全エネルギーの値を増減させ、運動するエネルギー面を変化させる役割を持っている。このために $\lambda(t)$ は自律的運動を形成する領域を制御するパラメーターである。特に $\lambda(t)=0$ の時、各意味変数 q_i が区間 $(q_i, q_i + \Delta q_i)$ に存在する時間分布 $\tau[q_i]$ は意味変数を除いた変数 p_i について積分和を取るにより

$$\tau[q_i] = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^n dp_i \prod_{i=1}^n \Delta q_i \delta(\epsilon - H[p_i, q_i]) \quad (52)$$

$$\propto (\epsilon - V[q_i])^{n/2-1} \prod_{i=1}^n \Delta q_i \quad (53)$$

で与えられる。ここで ϵ は評価関数 $H[p_i, q_i]$ の値を与える。 $n \geq 3$ で $\tau[q_i]$ が評価関数を最小とする q_i^0 で最大となる。このため評価関数を最小にするように向かおうとする自律的運動が生成される。つまり、時間分布 $\tau[q_i]$ は評価関数 $V[q_i]$ をより最小とする $\{q_i\}$ でより大きくなるためである。しかし、 $\tau[q_i]$ が式 (53) のように表わされる場合は、任意の運動に対してではなく運動が混合性 (mixing property) を持つ場合に限る。従って、行列 a_{ij} は混合性を運動に導入するためのパラメーターの役割をする。また、意味変数の個数 n

(≥ 3)が増大すればするほど、時間分布 $\tau[q_i]$ は評価関数 $V[q_i]$ をより最小とする $\{q_i\}$ で大きくなる。このために上記の方法は、 n の大きいほど有効となる。この自律的運動の

形成により、並列処理に向かない、評価関数の変数の数の増大による計算量の大幅な増大、解くために必要なパラメータの注意深い選択 (elaborately tuning)、多重安定点の一つに引っかかる、などが克服される。

[例 1] ファイバーアライメント

向かい合った s 組のファイバーを一度に最も光を通過するようにファイバーのアライメント (位置合わせ) を行なう。(図 2) この問題では、一組ずつの向かい合った二つのファイバーの一方を固定し他のファイバーの位置 $(x_i, y_i) (i=1, 2, 3, \dots, s)$ を動かす。固定したファイバー側から光を入力し他方のファイバー側から出力光の強度を測定し位置 (x_i, y_i) を動かすことによって出力光の強度を最大にするように位置を決めることになる。この問題の意味変数の個数は $n=2s$ である。 i 番目の出力光はファイバーの位置 (x_i, y_i) に依存するので出力光は (x_i, y_i) の関数となるので以下では $I(x_i, y_i)$ で表わす。上の方法を適用するには、評価関数 $V(x_1, y_1, x_2, y_2, \dots, x_s, y_s)$ (以下簡単に $V[x_i, y_i]$ で表わす) を

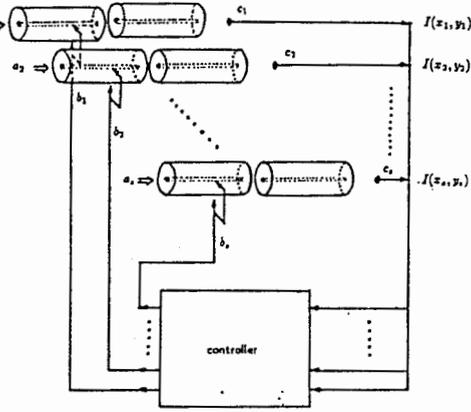


図 3.2 ファイバーアライメント

$$V[x_i, y_i] = - \sum_{i=1}^s I(x_i, y_i) \tag{54}$$

ととる。各ファイバーの出力光の強度を最大とする位置 (x_i, y_i) を求める問題は評価関数を最小とする位置を求める問題に帰着される。ハミルトン関数を

$$H[p_i^x, p_i^y; x_i, y_i] = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^s a_{ij}^{xx} [p_i^x + \int_0^t g_i^x(t') dt'] [p_j^x + \int_0^t g_j^x(t') dt'] \tag{55}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^s a_{ij}^{yy} [p_i^y + \int_0^t g_i^y(t') dt'] [p_j^y + \int_0^t g_j^y(t') dt'] \tag{56}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^s a_{ij}^{xy} [p_i^x + \int_0^t g_i^x(t') dt'] [p_j^y + \int_0^t g_j^y(t') dt'] + V[x_i, y_i] \tag{57}$$

ととる。正準方程式は

$$\frac{dx_i}{dt} = \sum_{j=1}^s a_{ij}^{xx} [p_j^x + \int_0^t g_j^x(t') dt'] + a_{ij}^{xy} [p_j^y + \int_0^t g_j^y(t') dt'], \tag{58}$$

$$\frac{dy_i}{dt} = \sum_{j=1}^s a_{ij}^{yy} [p_j^y + \int_0^t g_j^y(t') dt'] + a_{ij}^{xy} [p_j^x + \int_0^t g_j^x(t') dt'], \tag{59}$$

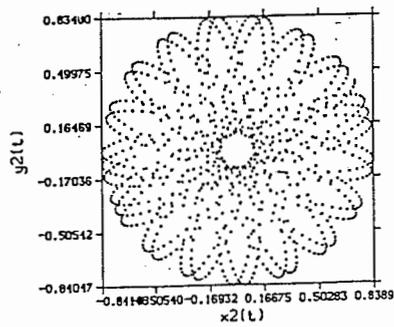
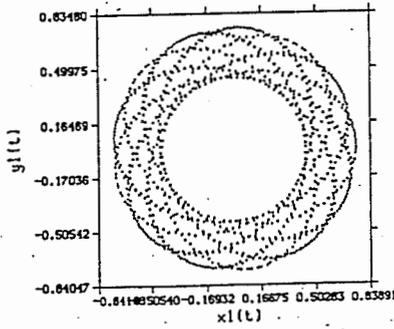
$$\frac{dp_i^x}{dt} = - \frac{\partial V[x_m, y_m]}{\partial x_i} = f_i^x, \tag{60}$$

$$\frac{dp_i^y}{dt} = -\frac{\partial V[x_m, y_m]}{\partial y_i} = f_i^y. \quad (61)$$

計算と測定の手続きは、(i=1,2,...,s)

- 1) 時刻 t と $t+\Delta$ での適当な初期値 $\{x_i(t), y_i(t)\}$, $\{x_i(t+\Delta), y_i(t+\Delta)\}$ を適当に与える、
- 2) 出力光 $I(x_i(t+\Delta), y_i(t+\Delta))$ の測定、
- 3) $x_i(t+\Delta)$ を $x_i(t+\Delta)+\Delta_x$ に移動、
- 4) 出力光 $I(x_i(t+\Delta)+\Delta_x, y_i)$ の測定、
- 5) $x_i(t+\Delta)+\Delta_x$ を $x_i(t+\Delta)$ に移動、
- 6) $y_i(t+\Delta)$ を $y_i(t+\Delta)+\Delta_y$ に移動、
- 7) 出力光 $I(x_i(t+\Delta), y_i(t+\Delta)+\Delta_y)$ の測定、
- 8) $f_i^x = [I(x_i(t+\Delta)+\Delta_x, y_i(t+\Delta)) - I(x_i(t+\Delta), y_i(t+\Delta))]/\Delta_x$ の計算、
- 9) $f_i^y = [I(x_i(t+\Delta), y_i(t+\Delta)+\Delta_y) - I(x_i(t+\Delta), y_i(t+\Delta))]/\Delta_y$ の計算、
- 10) 式(9)を使って、 $\{x_i(t+2\Delta), y_i(t+2\Delta)\}$ を計算する、
- 11) $\{x_i(t+\Delta), y_i(t+\Delta)\}$ を $\{x_i(t), y_i(t)\}$ に代入、
- 12) $\{x_i(t+2\Delta), y_i(t+2\Delta)\}$ を $\{x_i(t+\Delta), y_i(t+\Delta)\}$ に代入する、
- 13) 次に1)に戻って1)から12)までの手続きを

図 3.3 ファイバー位置の軌跡



繰り返す。

8)-12)までは計算機上でいい、また、1)-7)は実際に光ファイバーを移動し出力光の強度を測定する。計算:ここでは装置を具体的に組むことなしに、計算で1)-12)までを行ないその方法の有効性を確認する。

出力光 $I(x_i, y_i)$ を

$$I(x_i, y_i) = e^{-2(x_i^2 + y_i^2)} \quad (62)$$

と仮定する。(出力光を最大にするファイバーの位置は $\{x_i^0=0, y_i^0=0\}$ である。)ハミルトン関数は

$$H[p_i^x, p_i^y; x_i, y_i] = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^s a_{ij}^{\alpha\beta} (p_i^\alpha +$$

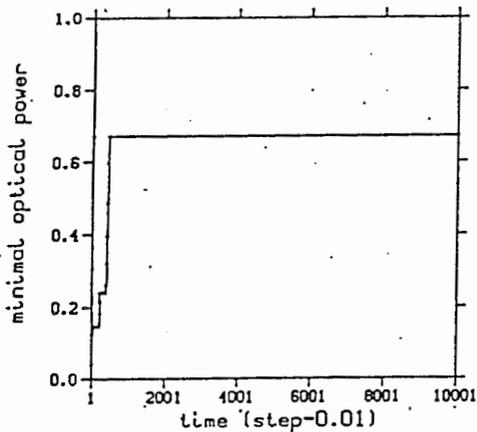
$$\int_0^t g_i^\alpha(t') dt') (p_j^\beta + \int_0^t g_j^\beta(t') dt') - \sum_i^s e^{-2(x_i^2 + y_i^2)} \quad (63)$$

となる。但し、 $g_i^\alpha(t) = -\lambda(t) d\alpha_i/dt$ ($\alpha, \beta = x$ または y 。) $a_{ij}^{\alpha\beta}$ は運動に混合性を持つように導入された行列である。

自律運動を生じない場合: 図 3.3 は $a_{ij}^{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = x, y$) は $\alpha = \beta, i = j$ で $a_{ij}^{\alpha\beta} = 1$ 、それ以外は、 $a_{ij}^{\alpha\beta} = 0$ 、また、 $\lambda = 0$ の場合での 100 組のファイバーつまり $n = 200$ の場合の一組目と二組目のファイバーの時間に関する位置 $(x_1(t), y_1(t))$ と $(x_2(t), y_2(t))$ の変化の軌跡を示している。この場合のハミルトン関数は

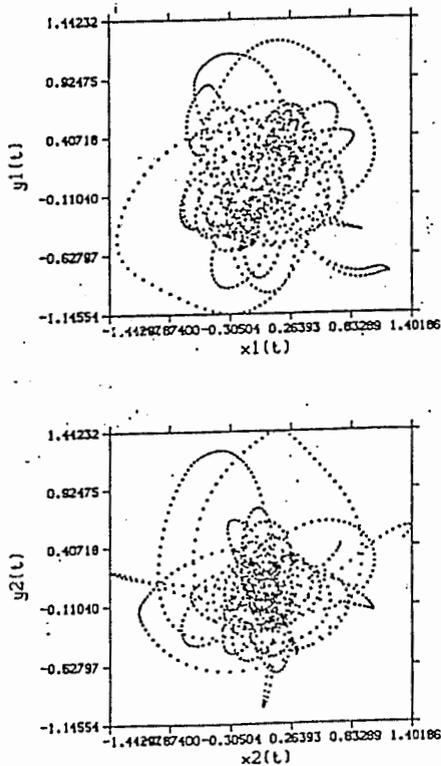
$$H[p_i^x, p_i^y; x_i, y_i] = \frac{1}{2} \sum_i^s [p_i^{x2} + p_i^{y2} - e^{-2(x_i^2 + y_i^2)}] \quad (64)$$

図 3.4. 最も低いファイバーの光出力



となり、各々のファイバーは全く独立に運動する。また、この場合は混合性を持たない運動となり式 (62) で与えられる評価関数を最小とする方向に進む自律的運動を有しない。このことは図のファイバー位置が出力光を最大にする原点に近付くことが無いことからわかる。また、各ファイバーについて出力光を最大にした位置 (x_i, y_i) のうち最も低い強度の出力光、つまり、運動で各ファイバーは位置を変えるが最も原点に近寄った時の位置を記録して置き、全ファイバーで記録した位置の中で最も原点から遠い位置を時間の関数としてプロットしたのが図 3.4 である。図 3.4 ではその位置を最大となる出力光の強度に換算した値を与えてある。この図から、運動は光出力を最大とする位置に近付けないことを示している。

自律運動を生じる場合: 図 3.5 は、ランダムな値を持つ $a_{ij}^{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = x, y$) と $\lambda = 0$ の場合での 100 組のファイバーつまり $n=200$ の場合の一組目と二組目のファイバーの時間に関する位置 $(x_1(t), y_1(t))$ と $(x_2(t), y_2(t))$ の変化の軌跡を示している。各ファイバーは独立で



なくなり混合性を持つ運動となる。この時、意味変数の時間分布は式 (52) で与えられる。即ち、出力光の強度を最大にする自律的運動を生じる。図 3.6 は出力光を最大にする原点に集中して分布することを示している。図 3.4 と類似な図 3.6 は、全ファイバーで記録した位置の中で最も原点から遠い位置 (最大となる出力光の強度に換算して) は時間の増大と共に大きくなり約 $8000 < t$ で最大の 1 になっていることが分かる。図 3.4 と図 3.6 を比較すると自律的運動が生成されるかどうかの問題を解く上で決定的役割を演じていることを示している。自律運動は、評価関数を最小にする方向に進むという利点の代わりに、一方で、($\lambda = 0$ の場合には) 運動する領域が広くなるという欠点がある。このことは、図 3.3 と図 3.5 の横軸と縦軸の範囲を比較すれば分かる。この欠点を解消するために、 λ を導入し運動する領域の範囲を制御する。図 3.7 は、図 3.5 と同様にランダムな値を持つ $a_{ij}^{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = x, y$) と $\lambda = 2.5$ の場合の 100 組のファイバーつまり $n=200$ の場合の一組目と二組目のファイバーの時間に関する位置 $(x_1(t), y_1(t))$ と $(x_2(t), y_2(t))$ の変化を示している。混合性を持つ運動である。図 3.8 で分かるように、初めの $0 \leq t < 300$ で $\lambda = 2.5$ と式 (53) からハミルトン関数の値が減少し探索する意味空間の領域が狭くなる。

図 3.5. ファイバー位置の軌跡

図 3.8 は全ファイバーで記録した位置の中で最も原点から遠い位置 (最大となる出力光の強度に換算して) は時間の増大と共に大きくなり約 $300 < t$ の短時間の内に最大の 1 になっていることが分かる。図 3.5 と図 3.7 を比較すると、ハミルトン関数の値が減少し探索する意味空間の領域が狭窄する効果の大きいことが分かる。図 3.3 から図 3.8 までの図は、探索問題で自律運動の形成と探索領域の狭窄効果の大きさが分かる。狭窄効果と自律運動の形成は、各々、探索する領域を狭窄し、その領域内で解を他の解の候補である多重安定点に引っかからずに有効に探索する役割を持っている。また、この方法は多数ファイバーを一度に位置合わせをする時に有効となる。この探索制御アルゴリズムは、他の (今使われている) ファイバーの位置合わせの方法と比べる。一つのファイバーのいくつかの多重安定点がある場合で、他の方法では数分を要するがこの方法を使えば数秒に短縮できることが、探索の際のファイバーが動く距離を測定することにより結論される。

図 3.6 最も低いファイバーの光出力

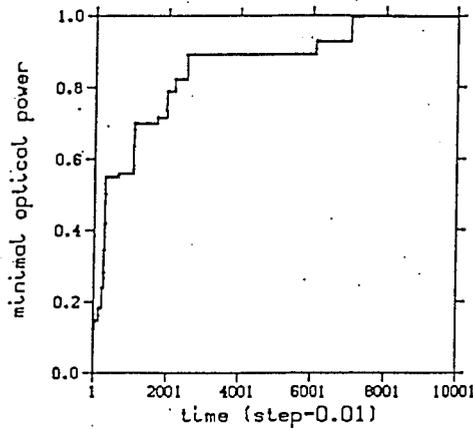


図 3.7 ファイバー位置の軌跡

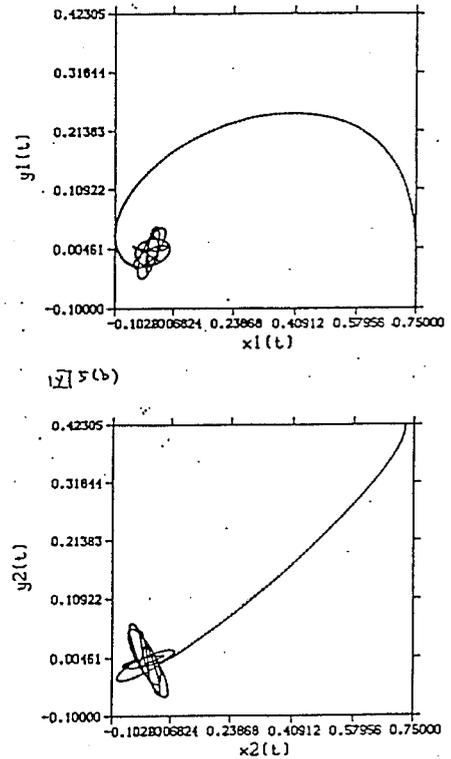
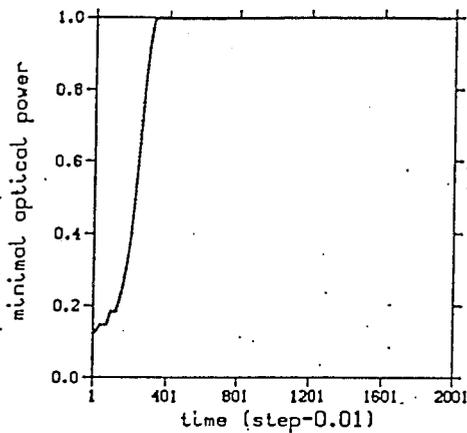


図 3.8. 最も低いファイバーの光出力



[例 2] 画像復元

画像復元には大まかに分けて二つの場合がある。一つは、撮像システムと対象物との間に相対的な動きが生じると撮像システムの蓄積効果によりボケを生じる。動きボケにより劣化した画像の復元である。もう一つは、ボケやノイズなどにより劣化した観測画像から出来る限り元の画像に近い画像を推定する画像復元である。前者は、標本の原画と劣化した観測画像を概知として、劣化した画像から復元画像を得るための逆フィルターを設計する問題であるが後者は劣化過程を表すフィルターは既知として観測画像から原画を推定する問題である。ここでは前者について、逆フィルターを最少二乗誤差を統計的に最少にするように求めるやり方に適用する。(後者の場合が逆フィルターの代わりに原画像を求める変数にとれば前者の特別な場合として求められる。)

この時、評価関数は最少二乗誤差量

$$V[h] = E\left\{\left|f(x) - \int ds h(x-s)r(s)\right|^2\right\} \quad (65)$$

で与えられる。 $f(x)$ 、 $r(x)$ は各々原画像及び劣化画像である。ここで E は $f(x)$ と $r(x)$ についての統計平均を取ることを示す。 $h(x)$ は劣化画像を復元する逆フィルターである。問題は、評価関数 $V[h]$ を最少にするように逆フィルター $h(x)$ を決めることである。これを行なうには、二次元平面の画素番号を i で表わすと、画素単位での原画像及び劣化画像は f_i と r_i で表わされる。評価関数を画素単位で表せば、

評価関数

$$V[h] = \frac{1}{2} E \left\{ \sum_i |f_i - \sum_j h_{ij} r_j|^2 \right\}. \quad (66)$$

または、

$$V[h] = \frac{1}{2} \sum_i \{ E\{f_i^2\} - \sum_j h_{ij} E\{f_i r_j\} \} \quad (67)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{ijk} h_{ij} h_{ik} E\{r_j r_k\}. \quad (68)$$

ハミルトン関数は、

$$H[p_{ij}, h_{ij}] = \frac{1}{2} \sum_{ijk} a_{ijk} [p_{ij} + \int_0^t g_{ij}(t') dt'] [p_{ik} + \quad (69)$$

$$\int_0^t g_{ik}(t') dt'] + \frac{1}{2} \sum_i \{ E\{f_i^2\} - \sum_j h_{ij} E\{f_i r_j\} \} \quad (70)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{ijk} h_{ij} h_{ik} E\{r_j r_k\}. \quad (71)$$

運動方程式は、

$$\frac{dh_{ij}}{dt} = \sum_k a_{ijk} [p_{ik} + \int_0^t g_{ik}(t') dt'], \quad (72)$$

$$\frac{dp_{ij}}{dt} = -E\{f_i r_j\} + \sum_k h_{ik} E\{r_j r_k\}. \quad (73)$$

これら方程式系を解くことにより逆フィルター h_{ij} が得られる。

ボケやノイズなどにより劣化した観測画像から出来る限り元の画像に近い画像を推定する画像復元の場合には、上の式で逆フィルター h_{ij} の代わりに推定原画像 r_i を変数に前者の特別な場合として求められる。具体的には、運動方程式は次の式で置き換えられる、

$$\frac{dr_i}{dt} = \sum_j a_{ij} [p_j + \int_0^t g_j(t') dt'], \quad (74)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -f_i r_j + \sum_{jk} h_{ji} h_{jk} r_k \quad (75)$$

である。

[例 3] 組合せ問題

組合せ問題の一つの例である巡回セールスマン問題へ適用する。巡回セールスマン問題はある一人のセールスマンが異なる s 都市を各都市を一度ずつ且つ洩れなく回る場合に巡回する距離が最短になるように回る道筋を求める問題である。

評価関数は

$$V[v_{ij}] = \frac{1}{2}[AV_1 + BV_2 + CV_3], \quad (76)$$

$$V_1 = \sum_i^s \left\{ \sum_j v_{ij} - 1 \right\}^2 + \sum_i^s \left\{ \sum_j v_{ji} - 1 \right\}^2, \quad (77)$$

$$V_2 = \sum_{ijk}^s d_{ij} v_{ik} \{v_{jk+1} + v_{jk-1}\}, \quad (78)$$

$$V_3 = \sum_{ij}^s \left\{ \frac{v_{ij}^4}{4} - \frac{v_{ij}^3}{2} + \frac{v_{ij}^2}{4} \right\} \quad (79)$$

で与えられる。ここで A, B, C は定数、 v_{ij} は i 番目に訪れる j 都市の確率である。 $v_{ij}=0$ なら訪れない、又、 $v_{ij}=1$ なら訪れることを表す。 d_{ij} は i 番目と j 番目の都市の間の距離である。 $v_{0i}=v_{si}$ 、 $v_{s+i}=v_{1i}$ と約束する。これに対するハミルトン関数は

$$H[p_{ij}, v_{ij}] = \frac{1}{2} \sum_{ij,kl} a_{ij,kl} [p_{ij} + \int_0^t g_{ij}(t') dt'] [p_{kl} \quad (80)$$

$$+ \int_0^t g_{kl}(t') dt'] + V[v_{ij}]. \quad (81)$$

運動方程式を解くことができその結果として都市の巡回する順番/道順が得られる。

[例 4] 多要素の制御問題

多要素の制御問題の一つのアクチーブ制御の例を取り上げ適用する。並立する柔軟構造物の制御系の構成例として図 3.9 に示す。今建築の分野では超高層ビルの実現が話題になっているがこれを実現するには風に対する揺れ防止が不可欠である。この時超高層ビルでは長周期の揺れになるので揺れ防止のためには、複数のセンサーとアクチュエータを適当に配置させお互いに並列する構造物同士で振動を止め合う方法が考えられている。左右のビルの揺れを感知するセンサーの出力信号を q_i^l 、 q_i^r とし風の強度を $w_i^l(t)$ 、 $w_i^r(t)$ で表す、また揺れを防ぐためにアクチュエータに入力する信号を $Q_i^\alpha(t)$ とする。

ハミルトン関数を設定する、

$$H[P_i^\alpha, Q_i^\alpha; p_i^\alpha, q_i^\alpha] = \frac{1}{2M} \sum_i^s [P_i^\alpha + \int_0^t F_i^\alpha(t') dt']^2 \quad (82)$$

$$+ H[p_i^\alpha, q_i^\alpha]. \quad (83)$$

ここで

$$H[p_i^\alpha, q_i^\alpha] = \frac{1}{2} \sum_{ij\alpha} a_{ij}^\alpha [p_i^\alpha + \int_0^t \{w_i^\alpha(t') \quad (84)$$

$$-Q_i^\alpha(t')\}dt')[p_j^\alpha + \int_0^t \{w_j^\alpha(t') - Q_j^\alpha(t')\}dt'] \quad (85)$$

$$+k_2v_2[q_i^\alpha]. \quad (86)$$

$v_2[q_i^\alpha]$ は変数 q_i^α 同士の相互作用である。例えば、

$$v_2[q_i^\alpha] = \frac{1}{2} \sum_{i\alpha}^{s-1} (q_{i+1}^\alpha - q_i^\alpha - \ell)^2 \quad (87)$$

である。 $F_i^\alpha(t)$ は揺れの大きさを与える量、即ち、評価関数

$$v_1[q_i^\alpha] \quad (88)$$

(例えば、 $v_1[q_i^\alpha]=k_1v_2[q_i^\alpha]$) を使って

$$F_i^\alpha(t) = -Q_i^\alpha(t) - \lambda \frac{dQ_i^\alpha}{dt} \quad (89)$$

$$+ \sum_j a_{ij}^\alpha \frac{\partial v_1[q_i^\alpha(t)]}{\partial q_j^\alpha} \quad (90)$$

で与えられる。 $P_i^\alpha, Q_i^\alpha, p_i^\alpha, q_i^\alpha$ の運動方程式は、

$$\frac{dQ_i^\alpha}{dt} = P_i^\alpha + \int_0^t F_i^\alpha(t')dt', \quad (91)$$

$$\frac{dP_i^\alpha}{dt} = 0, \quad (92)$$

$$\frac{dq_i^\alpha}{dt} = \sum_j a_{ij}^\alpha [p_j^\alpha + \int_0^t f_j^\alpha(t')dt'], \quad (93)$$

$$\frac{dp_i^\alpha}{dt} = -k_2 \frac{\partial v_2[q_i^\alpha]}{\partial q_i^\alpha}, \quad (94)$$

($\alpha=l,r$) 或は、

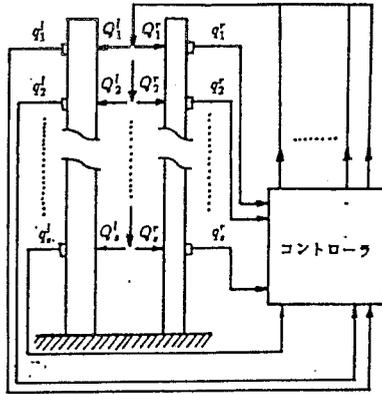
$$M \frac{d^2 Q_i^\alpha}{dt^2} = -Q_i^\alpha(t) - \lambda \frac{dQ_i^\alpha}{dt} + k_1 \sum_j a_{ij}^\alpha (q_{i+1}^\alpha + q_{i-1}^\alpha - 2q_i^\alpha), \quad (95)$$

$$\frac{d^2 q_i^\alpha}{dt^2} = -k_2 \frac{\partial v_2[q_i^\alpha]}{\partial q_i^\alpha} + w_i^\alpha(t) - Q_i^\alpha(t). \quad (96)$$

アクチュエータへの入力信号 $Q_i^\alpha(t)$ を計算する方法は二つある。一つは、風の強さ $w_i^\alpha(t)$ を与えて構造物の揺れも含めて式 (95) と (96) を解くことができ、揺れを小さくするた

めのアクチュエータに入力する信号 $Q_i^\alpha(t)$ が得られる。(但し、 $-Q_i^\alpha(t)$ が入力信号となる。) 他の方は、アクチュエータへの入力信号を規定するのは式 (95) である。これを解くには構造物の揺れの出力信号 $q_i^\alpha(t)$ が必要である。 $q_i^\alpha(t)$ を実際の観測値で置き換えることでアクチュエータへの入力信号 $Q_i^\alpha(t)$ が得られる。式 (95) を解くことで $Q_i^\alpha(t)$ が得られる。(但し、 $-Q_i^\alpha(t)$ が入力信号となる。)

図 3.9. 多要素分散制御系



[例 5] 非線形計画法

非線形計画法の一つの例である、 s 個の仕事 (それを x_i で表わす) を m 個の機械でこなすとき総終了時間を最小にするように s 個の仕事をも m 個の機械に分配する仕方を求める問題に適用しよう。(スケジューリングの問題の一つでもある。) 個々の (i 番目の) 機械の仕事処理の最大能力は b_i で制限されていて、又個々の機械が仕事を終了する時間は仕事量の二乗に比例する (比例係数を c_i とする) ような場合を考える。

評価関数

$$V[T_{ij}] = \frac{1}{2} \sum_i^s c_i (\sum_j^s T_{ij} x_j)^2 \quad (97)$$

$$+ k_1 \sum_i^s \{ \sum_j^s T_{ij} - 1 \}^2 \quad (98)$$

を機械の仕事処理の能力の制約条件

$$\sum_j^s T_{ij} x_j - b_i \leq 0, \quad (i = 1, 2, \dots, m) \quad (99)$$

の下で最小にする分配関数 T_{ij} を求める分離系二次計画問題を対象にする。ハミルトン関数を

$$H[p_{ij}, T_{ij}] = \frac{1}{2} \sum_i^s a_{ij;kl} [p_{ij} + \int_0^t g_{ij}(t') dt] [p_{kl} \quad (100)$$

$$+ \int_0^t g_{kl}(t') dt] + V[T_{ij}] \quad (101)$$

$$+ k_2 \sum_i^m \{ \sum_j^s T_{ij} x_j - b_i \} \theta(\sum_j^s T_{ij} - b_i). \quad (102)$$

$a_{ij;kl}$ は運動に混合性を導入する行列である。また $\theta(x)$ はステップ関数で $x < 0$ で $\theta(x) = 0$, $x \geq 0$ で $\theta(x) = 1$ となる関数である。また $g_{ij}(t) = -\lambda(t) dT_{ij}/dt$ (特に $0 < \lambda(t)$ である) である。 k_1 は正定数である。 $T_{ij}(t)$, $p_{ij}(t)$ に対する運動方程式を解くことができ、評価関数を最小にする T_{ij} が求まる。

[例 6] ゲームの自動解法

ゲームの一例としてMC(ルービック・石毛・キューブ又はマジック・キューブと呼ばれている)の自動解法を与える。MCは三次元空間で $3 \times 3 \times 3$ の立方体の中の小立方体を色が揃うように持って行くゲームである。MCで小立方体を色が揃うように持って行くための回転操作は三種類ある。三つの軸に対し各々垂直な三つの回転がある。これらの回転操作を記号 $r^{i\alpha}$ (i は軸の方向を指定し $i=1,2,3$; α は軸に垂直な回転を指定し $\alpha=1,2,3$)で表わす。キューブの6つの面からなる表面は各面は色の付いた $9(=3 \times 3)$ 個の四角形でカバーされる。一つの回転操作はこれら $54(=6 \times 9)$ 個の四角形の色を置き換えることに対応している。このことから各回転操作は 54×54 個の行列要素 $b_{st}^{i\alpha}$ ($s, t=1,2,\dots,54$)で表わされる:

$$r^{i\alpha} \rightarrow (b_{s,t}^{i\alpha}) \quad (b_{s,t}^{i\alpha} = 0, 1). \quad (103)$$

ハミルトン関数は

$$H[p^{i\alpha}, r^{i\alpha}] = \frac{1}{2} \sum_{i\alpha\beta} a_{ij}^{\alpha\beta} [p^{i\alpha} \quad (104)$$

$$+ \int_0^t g^{i\alpha}(t') dt'] [p^{j\beta} + \int_0^t g^{j\beta}(t') dt'] \quad (105)$$

$$+ v_1[r^{i\alpha}] + v_2[r^{i\alpha}] + v_3[r^{i\alpha}] \quad (106)$$

$$v_1[r^{i\alpha}] = \frac{k_1}{2\pi} \sum_{i\alpha} \sin\{2\pi(r^{i\alpha} - \frac{1}{4})\}, \quad (107)$$

$$v_2[r^{i\alpha}] = \frac{k_2}{54} \frac{1}{2\pi} \sum_{(i,\alpha) \neq (j,\beta)} [\sin\{2\pi(r^{i\alpha} - \frac{1}{4}) + 1\}] \quad (108)$$

$$\times [\sin\{2\pi(r^{j\beta} - \frac{1}{4}) + 1\}]. \quad (109)$$

色合わせの程度を評価する関数

$$v_3[r^{i\alpha}] = \frac{k_3}{36\pi} \sum_{e,f=1}^6 v_{ef}(t)^2 \sum_{i\alpha} \sin\{2\pi(r^{i\alpha} - \frac{1}{4})\}. \quad (110)$$

(k_1, k_2, k_3 は正定数である) から、

$$\frac{dr^{i\alpha}}{dt} = \frac{\partial H[p^{i\alpha}, r^{i\alpha}]}{\partial p^{i\alpha}}, \quad (111)$$

$$\frac{dp^{i\alpha}}{dt} = -\frac{\partial H[p^{i\alpha}, r^{i\alpha}]}{\partial r^{i\alpha}} \quad (112)$$

から $r^{i\alpha}(t)$ と $p^{i\alpha}(t)$ に対する運動方程式が得られる。式(34c)の v_{ef} は

$$v_{ef}(t) = \sum_{e',f'} c_{6(e-1)+e', 6(f-1)+f'}(t) \quad (113)$$

で与えられる。ここで行列 $c_{s,t}(t)$ ($=0,1$) ($s, t=1,2,\dots,54$) は ($c_{s,t}(0)$ は初期での MC の色の配置を与える行列から出発して) 式 (110) を任意の整数値 $r^{i\alpha}(0)$ の下に解くことで得られる $r^{i\alpha}(t)$ が整数値 $+0.5$ (-0.5) を横切るときにのみその回転操作に対応する行列 $b_{st}^{i\alpha}$ (その逆行列 $(b_{st}^{i\alpha})^{-1}$) を次々に掛けることで得られる:

$$c_{s,t}(t + \Delta) = b_{s,t}^{i\alpha} c_{s,t}(t), \quad (114)$$

又は、

$$c_{s,t}(t + \Delta) = (b_{s,t}^{i\alpha})^{-1} c_{s,t}(t). \quad (115)$$

式 (112) と (115) を組み合わせて式 (111) を解くことができ、色合わせの評価関数 $v_3[r^{i\alpha}]$ を最小にする回転操作の手順 $r^{i\alpha}(t)$ が求まる。回転の手順は $r^{i\alpha}(t)$ が整数値 $+0.5$ (-0.5) を横切るときにのみそれに該当する回転操作 (逆回転) を行なうことによって回転操作を行なう順番 / 順序が得られる。

参考 & 文献

- 1) Ohtawara K. and Shinjo K., Jp. J. Appl. Phys., 9, 19(1994),
- 2) Garey M.R. and Johnson D. S., *Computers and Intractability* (Freeman W. H. and Company, 1979),
- 3) Cook S. A., Proc. 3rd Ann. ACM Symp. on *Theory of computing, association for computing machinery*, New York, 151(1971),
- 4) Wille L.T., Vennik J., J.Phys.A:Math.Gen., 18, L419(1985),
- 5) Baum E., Phys. Rev. Lett., 59(1987)374,
- 6) Klossowski P., ニーチェと悪循環 (哲学書房, 1989),
- 7) 新上和正, 物性研究 12 月 (1993),
- 8) Shinjo K. and Sasada T., (submitted to Phys. Rev. E) 'Hamiltonian Systems with Many Degrees of Freedom. Asymmetric Motion and Intensity of Motion in Phase Space',
- 9) 新上和正, 特許 (出願番号: 平成 05 年特許願第 252907 号).

第4章 結論

多自由度系は少数自由度系とは異なる性質を数多く持っている。特に少数自由度系を対象に発展してきたカオス理論は多自由度系を理解する上でそれほど有益でない。少数自由度系では、その理論的発展の背景に「軌道を可視化することができるということ」があるように思われる。少数自由度系では Poincaré の定理から再帰時間が短いため、比較的短い観測時間で軌道は相空間を巡るため、どのような現象が起こるかを予想しやすい。

一方、多自由度系では、相空間の体積は非常に大きくなりその軌道を可視化することができない。また、多自由度系では相空間全体を軌道が動き回る再帰時間が非常に長く我々の観測時間内ではすべての現象が出尽くしたとは限らない。多自由度系の伝統的な統計力学では軌道の集合を扱うのに対して (例えば、これから緩和時間が出てくる)、少数自由度系では主に1つの軌道を対象とする (例えば、これから再帰時間が出てくる)。この大きな gap はどうすれば埋まるのであろう。軌道の集合を扱う理論的根拠はどこにあるのであろう。

これ迄、多自由度の Hamiltonian 系の運動を主に多重安定領域構造 (many basin structure) との関連で調べた。唯1つしか安定領域を持たない系と違って、KAM トーラスが崩壊する stochastic transition が安定領域の粒子配置に依存して、現れる場合とそうで無い場合があることを示した。これに関連して、相空間の殆どの領域は chaotic sea によって埋め尽くされていることを示唆した。

安定領域間の運動を Bernoulli-like な shift map を使って記述し、三つの運動の形態に分類されることを示した。更にそれらは、非対称的運動 (asymmetric motion) が現れるかどうかによって、二つのクラスに類別される。非対称的運動の力学的起原を '相空間における運動の強度' という概念を導入して説明した。非対称的運動は緩和が終了する前にカノニカルな確率分布が位置空間に 'transient' に形成するために生じることを示した。

'相空間における運動の強度' を最適化問題の枠組みの中で捉え直し、多自由度系の運動と NP 完全な問題に対し最適化機構を議論した。

謝辞

本研究の遂行に当たりその機会を与えて頂いたエイ・ティ・アール光電波通信研究所、猪股英行社長、渡辺敏英室長に深謝いたします。Davis P、下川信祐、大田原一成研究員をはじめとする計算物理グループの方々に感謝いたします。

また、佐々田友平、田崎秀一、池田研介、金子邦彦の各氏との議論は大変有意義なものでありました。