

多自由度系におけるエネルギー地形概念と隠された動的自由度の抽出

(静大院理) 河合 信之輔

Energy landscapes in the multi-dimensional system and extraction of hidden dynamical modes

(Shizuoka Univ.) Shinnosuke KAWAI

「エネルギー地形」, すなわち系のエネルギーを座標の関数として描いたものは, 系のダイナミクスや統計的性質を視覚的な情報としてとらえる事を可能にしてくれる有用な概念である。多自由度系のエネルギー地形を考える際には, 全ての座標を描くことが不可能なので, 特定の座標を選択し, 射影した地形を描くことになる。大規模な系では, 現象の本質を捉えるのに適した物理量が何であるかが必ずしも初めから明らかではなく, エネルギー地形を描く座標の選択によっては系についての重要な情報が失われることになる。本研究では, この射影の問題について, 運動方程式の観点から再考し, 射影によって失われた情報を回復する方法を考察する。

エネルギー地形には, 射影する方式の違いによって「平均力ポテンシャル」と「自由エネルギー地形」の2種類が考えられる[1]。系の持つ全ての自由度を $X = (X_1, X_2, \dots, X_N)$ とし, X の関数 $R_1(X)$ を1つ選んでこれに系の運動を射影して記述するとする。系の平衡分布を $\rho_{\text{eq}}(X)$ とすると, R_1 の平衡分布 $\rho_1(r_1)$ は, ディラックのデルタ関数を用いて次式で与えられる。

$$\rho_1(r_1) = \int \delta(R_1(X) - r_1) \rho_{\text{eq}}(X) dX$$

この平衡分布の対数によって, R_1 に射影された「自由エネルギー地形」 $G(r_1)$ を定義する。

$$G(r_1) = -k_B T \ln \rho_1(r_1)$$

k_B はボルツマン定数, T は温度である。

一方, 「平均力」 $f_M(r_1)$ を, R_1 の値が与えられたときに系が感じる平均的な加速度として, 以下のように定義する。

$$f_M(r_1) = \langle \ddot{r}_1; r_1 \rangle = \frac{\int \ddot{R}_1(X) \delta(R_1(X) - r_1) \rho_{\text{eq}}(X) dX}{\int \delta(R_1(X) - r_1) \rho_{\text{eq}}(X) dX}$$

ここで, $\langle \ddot{r}_1; r_1 \rangle$ は $R_1(X)$ の値 r_1 を与えたときの加速度 $\ddot{R}_1(X)$ の平均値を表す。これを用いて, 「平均力ポテンシャル」 $V_M(r_1)$ を, 平均力を積分したものと定義する。

$$V_M(r_1) = - \int^{r_1} f_M(r') dr'$$

実際には, R_1 の加速度は平均力には一致せず, 平均からのずれを持つ。このずれを r_2 と書くと,

$$\ddot{r}_1 = \langle \ddot{r}_1; r_1 \rangle + r_2$$

1次元に射影されたエネルギー地形によって系の振る舞いを捕らえようとすることは, この r_2 を無視して, 次のような1次元の運動方程式で系を近似することに相当すると考えられる。

$$\ddot{r}_1 \approx \langle \ddot{r}_1; r_1 \rangle$$

一例として, 図1のように2個の井戸があるポテンシャルエネルギーをもつモデル系を考える。この系を, 斜め方向の軸 r_1 を選んで記述しようとした場合を考える。図2に r_1 方向に射影されたエネルギー地形(平均力ポテンシャル)を示すが, 射影によって2個の井戸が重なってしまい, 1個の極小しかない地形になっていることが分かる。

ここで, 上で述べた加速度の平均からのずれ $r_2 = \ddot{r}_1 - \langle \ddot{r}_1; r_1 \rangle$ を無視せずに新たな座標と考え, (r_1, r_2) の2次元でエネルギー地形を描くとどのようなようになるかを調べた。ここでは, 計算を簡単にするため「自由エネルギー地形」の考えを採用し, (r_1, r_2) の平衡分布を描く。結果

を図3に示す。分布の極大が2個現れており、これらは元の系がもっていた2つの井戸に対応すると考えられる。すなわち、加速度座標 r_2 を採用することによって、 r_1 のみへの射影では失われていた情報(2つの井戸の存在)が回復されていることが分かる。また、 $r_2 = \dot{r}_1 - \langle \dot{r}_1; r_1 \rangle$ が最初に選んだ座標 r_1 (と、その加速度)の情報のみから計算できる量である点も、実際のシミュレーションデータ等の解析において有用であると考えられる。ただし、図3に示された地形は元の図1の地形に比べて非線形な変形を受けており、これは加速度座標 r_2 が元の系の座標の関数としてみると複雑な関数になっているためと考えられる。

そこで、 r_2 方向の速度2乗平均 $\langle \dot{r}_2^2; r_1, r_2 \rangle$ を反映した非線形なスケーリング

$$r_2 \mapsto s_2 = \int_0^{r_2} \frac{1}{\langle \dot{r}_2^2; r_1, r_2 \rangle^{1/2}} dr_2$$

によって座標 s_2 を導入し、 (r_1, s_2) の平衡分布を描いたところ、図4のように比較的直線的な地形が得られた。当時は、このようにして得られた2次元の空間をより良く記述するための座標の選択や、リーマン幾何との関係について議論する予定である。

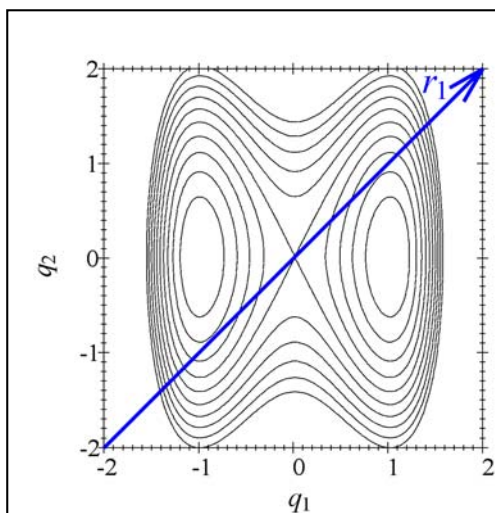


図1. モデル系として考察した、2つの井戸をもつ2次元のポテンシャルエネルギー。

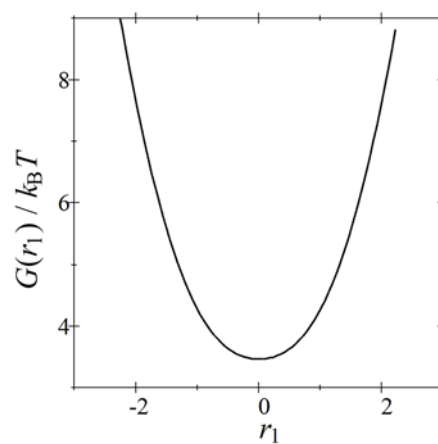


図2. 図1の系を、斜め方向の座標 r_1 に射影した1次元の平均力ポテンシャル地形

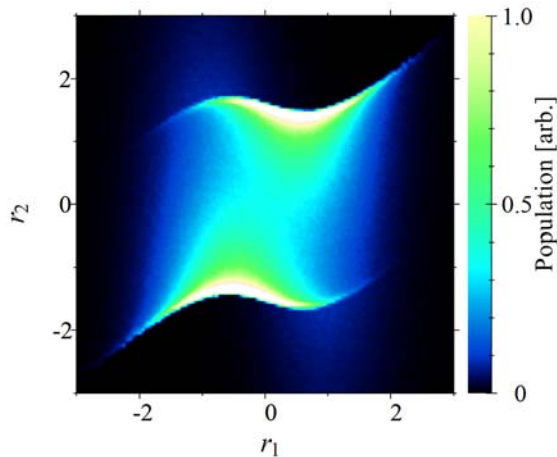


図3. r_1 と加速度座標 r_2 で描いたエネルギー地形

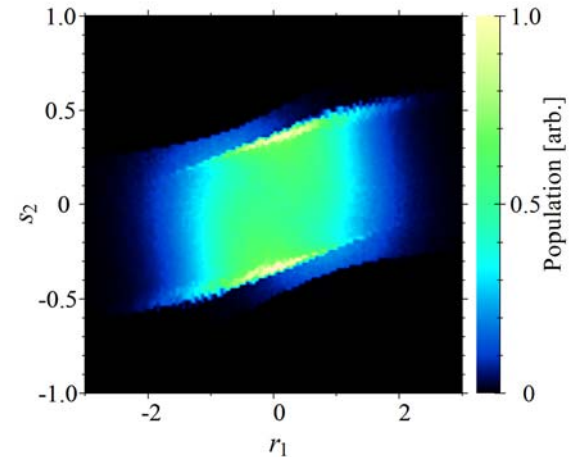


図4. r_1 とスケールされた加速度座標 s_2 で描いたエネルギー地形

[1] 河合信之輔「多自由度系におけるエネルギー地形概念」,分子シミュレーション研究会会誌“アンサンブル”, 16, 16-21 (2014)