

# バネ玉ハミルトン力学系における遅い緩和・形態変化・分岐

## Slow relaxation, conformation, and bifurcations in Hamiltonian Dynamical Systems

柳田 達雄 (Tatsuo YANAGITA)<sup>1</sup>, 小西 哲郎 (Tetsuro KONISHI)<sup>2</sup>,  
清水 寧 (Yasushi SHIMIZU)<sup>3</sup>, 園田 聖馬 (Shoma SONODA)<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 大阪電気通信大学 (Osaka Electro-communication Univ.), <sup>2</sup> 中部大学 (Chubu Univ.),

<sup>3</sup> 立命館大学 (Ritsumei Univ.)

e-mail : yanagita@osakac.ac.jp

### 1 概要

運動の時間スケールの乖離は、それら運動間のエネルギー交換を阻害する場合がある。この阻害は平衡状態への遅い緩和を生み出し、準平衡状態とみなせる過渡状態が長時間持続される [1]。講演では、ビーズスプリング・モデル分子（鎖状バネ玉分子モデル）が準平衡状態で示す遅い緩和、非一様運動、動的な形態形成を報告し、ハミルトン力学系の分岐との対応を考察する。

### 2 鎖状バネ玉分子モデル

バネ玉分子モデルとは (図 1(a)) に示すように、質点がバネで結合した系であり、その統計力学的な振る舞いは高分子の簡単なモデルとして研究されている。ここでは、結合バネを線形バネとし、鎖状に結合した以下のハミルトニアンを考える。

$$H_{\text{chain}} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{k_i}{2} (|\vec{r}_{i+1} - \vec{r}_i| - \ell_i)^2 + \sum_{i=1}^N U_{\text{ext}}(\vec{r}_i) \quad (1)$$

ここで、 $\vec{r}_i$ ,  $m_i$  はそれぞれ  $i$  番目の粒子の座標である。また、 $k_i$  および  $\ell_i$  は  $i$  番目と  $i+1$  番目の粒子間のバネのばね定数および自然長を表す。このハミルトニアン (式 (1)) から導かれる正準方程式が示すダイナミクスを考える。このモデルはビーズ同士の排除体積効果や屈曲エネルギーをハミルトニアンに陽に含まず、静止状態に外力が加わると各質点は自由に回転できる。ここでは、2次元空間内の鎖状バネ玉系を扱い、特に断りの無い限り  $k_i = 1$ ,  $m_i = 1$ ,  $\ell_i = 1$  とする。

### 3 鎖状バネ玉モデルが示す特異なダイナミクス

#### 3.1 遅い緩和と運動エネルギーの集中

初期に分子に運動エネルギーを与えると、運動エネルギーがある特定の分子に長時間集中する過渡状態が出現し [2]、最終的には各原子に等分配され熱平衡状態となる (図 1(b)) [3]。この過渡状態は各分子が剛体棒で接続されたホロノミック束縛した分子の熱平衡状態に対応する [4]。特に、分子振動の時定数  $\tau_{\text{vib.}} \sim 1/\sqrt{k}$  と回転運動の時定数  $\tau_{\text{rot.}} \sim \text{const.}$  が大きく異なる時、各運動モード間のエネルギー輸送が阻害されて緩和時間  $t_{\text{relax}}$  は Boltzmann-Jean 型 ( $t_{\text{relax}} \sim e^{1/\sqrt{k}}$ ) に従う [3, 5]。

#### 3.2 動的形態と有効ポテンシャル

初期状態としてバネに伸縮運動を与えると、自由回転運動が抑制され、あたかも屈曲ポテンシャルエネルギーを持つような運動形態が出現する現象を見出した (動的形態) [6]。多時間摂動と平均化法

により、屈曲角に対する有効ポテンシャルを解析的に求め (図 1(c)), バネに与える振動モードにより異なる形態が安定となること示し、数値解と一致することを示す [7].

### 3.3 動的形態と安定性分岐

簡単のため 3 つの質点からなるバネ玉モデルを考える．質点は線形バネで接続されているため、振幅（エネルギー）に依らずに直線状態と屈曲状態での振動解（周期解）が得られ、フロケ指数が半解析的に求められる．この周期解の安定性の評価と摂動により求めた有効ポテンシャルとの対応を考察する．さらに、この系がエネルギーの増加により大域カオスとなることをポアンカレ断面により示す (図 1(d)).

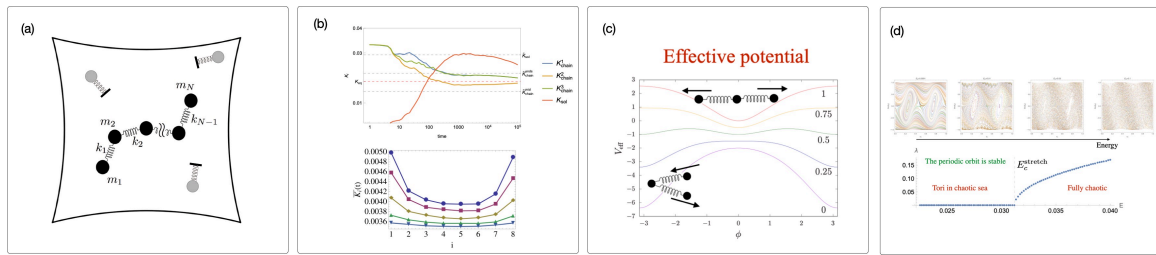


図 1. (a) バネ玉モデルの模式図 (b) 緩和過程：鎖状分子では端の質点に運動エネルギーが集中する (c) 多時間摂動と平均化法により得られた 3 玉系の有効ポテンシャル (d) 3 玉分子系の周期解の分岐とポアンカレ断面

### 参考文献

- [1] 小西哲郎, 柳田達雄, 鎖状系のエネルギー分配と遅い緩和:Boltzmann-Jeans 則. 物理学会誌, 72 巻 10 号, 728–733 (2017).
- [2] T. Yanagita, T. Konishi Emergence of quasiequilibrium state and energy distribution for the beads-spring molecule interacting with a solvent *Phy. Rev. E*, 104, 034209–034222 (2021)
- [3] T. Konishi and T. Yanagita. Slow relaxation of kinetic energy of spring-chain model in solvent *J. Stat. Mech.*, 3, 033201–033223(2016).
- [4] T. Konishi and T. Yanagita. Energetic motions of end-particles in constrained dynamical systems. *J. Stat. Mech.*, page L09001 (2009).
- [5] T. Konishi and T. Yanagita. Slow relaxation to equipartition in spring-chain systems. *J. Stat. Mech.*, P09001 (2010).
- [6] 柳田達雄, 小西哲郎, バネで結合した鎖状質点系に現れる振動モードの解析. 土木学会論文集 A2 (応用力学), 75-2, 125-133 (2019).
- [7] Y. Y. Yamaguchi, T. Yanagita, T. Konishi, and M. Toda Dynamically induced conformation depending on excited normal modes of fast oscillation *Phy. Rev. E*, 105, 064201–064215 (2022)

# 化学反応ネットワークにおける速度と駆動力の関係性

## Relationship between Rates and Driving Forces of Chemical Reaction Networks

大岡英史 (Hideshi Ooka)<sup>1</sup>, 須田智晴 (Tomoharu Suda)<sup>1,2</sup>,  
八束孝一 (Koichi Yatsuzuka)<sup>1,3</sup>, 中村龍平 (Ryuhei Nakamura)<sup>1,4</sup>  
<sup>1</sup> 理研, <sup>2</sup> 東京理科大, <sup>3</sup> 東大, <sup>4</sup> 科学大  
e-mail : hideshi.ooka@riken.jp

### 1 概要

触媒反応は複数の素反応からなる化学反応ネットワークの一種である。特に水の電気分解や燃料電池など、次世代のエネルギー変換を支える化学反応の多くは電極触媒反応である。電極触媒反応は、電圧（電気エネルギー）を与えるほど指数関数的に加速することが経験的に知られており、その関係は以下の Butler-Volmer の式で表現される：

$$j = j_0 \exp \frac{\alpha F \eta}{RT}. \quad (1)$$

ここで  $j$  は電流密度（単位面積当たりの反応速度）、 $j_0$  は交換電流密度、 $\alpha$  は電子移行係数、 $\eta$  は過電圧（平衡電位を基準とした電圧）であり、 $F$ 、 $R$ 、 $T$  はファラデー定数、気体定数、温度である。また、過電圧が十分大きいと仮定し、逆反応を無視している。この式において、良い触媒とは少ない電気エネルギーで高い反応速度を与えるもの、すなわち  $\alpha$  が大きい材料である。一方で、このような駆動力依存性は反応機構によって大きく左右されるため、現在の触媒設計理論には反映されていない。

これらの背景を踏まえ、実際の触媒反応は質量作用に従う複数の素反応の組み合わせからなる化学反応ネットワークであることに注目し、 $\alpha$  と素反応の関係性を明らかにすることを目的として検討を行った。<sup>[1]</sup> 本発表ではまず化学反応ネットワークにおける駆動力と反応速度の関係性を評価し、反応速度を最大化するために必要な要件など、理想触媒の条件について議論する。

### 参考文献

- [1] Ooka et al., ChemSusChem, 2025, 18, e202402625.

# 既知軌道上を運動する対象に対する追跡曲線の解析と関連力学系の性質

## Pursuit Curves toward a Moving Object on a Known Path: Formulation and Dynamical Analysis

吉原 爽太 (Sota Yoshihara)<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 名古屋大学大学院多元数理科学研究科 (Graduate School of Mathematics, Nagoya University)  
e-mail : sota.yoshihara.e6@math.nagoya-u.ac.jp

### 1 概要

軌道があらかじめ決められている物体 (Evader) を対象として、それを追跡する物体 (Pursuer) の運動を解析する。先行研究 [1, 2, 3] では Pursuer が以下の 2 つの条件に従って追跡した場合の軌跡を求めている。

- 1) Pursuer が常に Evader の方向を向いて追いかけている
- 2) Pursuer の速さは常に Evader の速さの  $n$  倍

条件 1 は言い換えれば Pursuer の速度ベクトルが常に Evader の位置に向いているということである。よって Pursuer, Evader の座標をそれぞれ  $(X(t), Y(t))$ ,  $(x(t), y(t))$  とすると、ベクトル  $(\dot{x}, \dot{y})$  と  $(X - x, Y - y)$  は同じ向きで平行である。ゆえに非負関数  $\lambda(t)$  が存在して

$$\lambda \dot{x} = X - x, \quad \lambda \dot{y} = Y - y. \quad (1)$$

また、条件 2 を定式化すると次の微分方程式になる。

$$\dot{x}^2 + \dot{y}^2 = n^2(\dot{X}^2 + \dot{Y}^2). \quad (2)$$

ゆえにこの問題は連立微分方程式 (1), (2) を  $x, y, \lambda$  について解くことに帰着される。

講演者の研究 [4] から、Pursuer の軌跡が Evader の軌道のパラメータの変換に依存しないために Evader の速さが常に 1 と仮定しても一般性を失わないことが示された。この仮定の下では条件 2 より Pursuer の速さは常に  $n$  である。また両者の距離を  $\rho(t)$  とおくと  $\lambda(t) = \rho(t)/n$  である。さらにそれぞれの速度ベクトルの偏角を  $\theta(t)$ ,  $\varphi(t)$  とおくとそれらの差  $\zeta(t) := \theta(t) - \varphi(t)$  と  $\rho(t)$  に関して次の連立微分方程式が導ける。

$$\dot{\rho} = \cos \zeta - n, \quad \rho \dot{\zeta} = -\sin \zeta + \rho \dot{\varphi}. \quad (3)$$

これを力学系としてみると逃避者の速度ベクトルの偏角の時間微分が定数でない場合は非自励系となる。特に  $n < 1$  のとき、Evader の軌道が円であれば漸近安定な平衡点が存在し、楕円であれば解軌道が閉曲線に収束することが確認されている。

### 2 課題と改善案

先ほどのセクションで述べたように  $n < 1$  では Pursuer が Evader に追いつけないため安定性の議論ができる。一方で  $n \geq 1$  の場合に Pursuer が Evader に追いつくがその際の条件 1 の取り扱いに課題がある。方程式 (1) の定式化の方法では  $\lambda = 0$  となるためゼロ除算が生じてしまい、追いついた時の  $(x, y)$  を数値計算できない。同様に力学系 (3) においても  $\dot{\zeta} = -\sin \zeta / \rho + \dot{\varphi}$  という式にはゼ

口除算の可能性が存在する．こちらは  $n \geq 1$  で数値計算可能であるが, Pursuer が Evader に追いついて  $\rho = 0$  になった後は  $\rho$  が負になり, 逆に Pursuer が Evader から逃げるような軌跡になる．

この課題を踏まえて (1) の  $\lambda$  を指数関数を用いて  $e^\mu$ ,  $\mu \in \mathbb{R} \cup \{-\infty, \infty\}$  とおき直す．すなわち

$$e^\mu \dot{x} = X - x, \quad e^\mu \dot{y} = Y - y \quad (4)$$

である．このとき追いつくとは  $e^\mu$  が 0 に収束することゆえ  $\mu$  が  $-\infty$  に発散することである．方程式 (4) には  $\lambda$  で割る代わりに両辺に  $e^{-\mu}$  を掛ければよい,  $(\dot{x}, \dot{y})$  に非負の値が掛からないことを明示的に表せるというメリットがある．

力学系 (3) に関しても同じ方法で扱いやすい形になる．こちらに関しては Evader から Pursuer までの距離  $\rho(t)$  を  $e^{\mu(t)}$  とおき直す．(2) に代入すると

$$\dot{\mu} = e^{-\mu}(\cos \zeta - n), \quad \dot{\zeta} = -e^{-\mu} \sin \zeta + \dot{\varphi}. \quad (5)$$

ここで複素数を導入する． $z(t) := \mu(t) + i\zeta(t)$  に対してオイラーの公式から

$$\dot{z} = -ne^{-\mu} + e^{-\mu}(\cos \zeta - i \sin \zeta) + i\dot{\varphi} \quad (6)$$

$$= \exp(-\frac{z}{2}) \left( -n \exp(-\frac{\bar{z}}{2}) + \exp(-\frac{\bar{z}}{2}) \right) + i\dot{\varphi}. \quad (7)$$

ゆえに複素数  $w = \exp(-z/2)$  に対して次の微分方程式を得る．

$$\dot{w} = \frac{w^2}{2} (n\bar{w} - w) - \frac{i\dot{\varphi}w}{2} \quad (8)$$

複素数  $w$  に関しては

$$w^{-2} = \exp(z) = e^\mu(\cos(\theta - \varphi) + i \sin(\theta - \varphi)) \quad (9)$$

であるから, この方程式によって Pursuer の軌跡は決定する．加えて  $w^{-2} = 0$  になるまでの挙動を調べることで Pursuer が Evader に追いつく時間などがわかる．

**謝辞** 指導教員である名古屋大学多元数理科学研究科大平徹教授と大平ゼミのメンバーに感謝申し上げます．本研究は, JST 次世代研究者挑戦的研究プログラム JPMJSP2125 の財政支援を受けたものです．この場を借りて「東海国立大学機構メイク・ニュー・スタンダード次世代研究事業」にも御礼申し上げます．

## 参考文献

- [1] J. C. Barton and Eliezer, C. J. Eliezer, On pursuit curves, Journal of the Australian Mathematical Society Series B, Vol.41 (2000), 358–371
- [2] P. J. Nahin, Chases and Escapes: The Mathematics of Pursuit and Evasion, Princeton : Princeton University Press, 2007
- [3] A. Kamimura and T. Ohira, Group Chase and Escape: Fusion of Pursuit-Escapes and Collective Motion, Singapore: Springer, 2019
- [4] S. Yoshihara, Elliptical Pursuit and Evasion -Extended Version-, arXiv preprint (2024), arXiv: 2401.06338v3