# 等エネルギー面と緩和の統計性

名古屋市千種区不老町
名古屋大学理学部物質理学専攻R研
博士課程後期2年
山口義幸

## 1　はじめに

多自由度系の動的性質を考える時、興味深い対象として2次相転移系の熱平衡への緩和が挙げられる。2次相転移系の臨界点ではそれ以外の温度に比べて緩和が遅くなることが知られている。しかし、このことの力学的な理解はまだされていない。ここでの力学的な理解とは次のような事をさす。まず与えられたハミルトニアンから正準方程式を導く。系がその方程式に従って時間発展をする時に、いかなる相空間の構造のために臨界点では緩和が遅くなるのか、という立場からの理解である。

そこでここでは、2次相転移を起こすモデルハミルトニアンを一つ取り上げ、それから導かれる正準方程式を数値的に積分して系の時間発展を追う事により上記の問題に対するアプローチを試みる。具体的には次の二つの問題を考える。(A) 系の緩和の様子から、臨界点で特異な事が起こっているのが観測されるか? また、どのような量を見れば観測できるか? (B) 臨界点で特異な事が起こっている時、相空間の構造はどうなっているのだろうか? この報告では、問題 (A) に対する解答を示し、その結果などから問題 (B) の解決に向けて準備的な議論を行なう。

## 2　モデルと観測量

扱うモデルハミルトニアンは次のようなものである。

$$H(q,p)=\sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2}p_j^2+\sum_{<jk>}(1-\vec{m}_j\cdot\vec{m}_k),\quad \vec{m}_j=(\cos q_j,\sin q_j),\quad q_j\in[0,2\pi). \tag{1}$$

このモデルは、3次元正方格子上に並んだ内部自由度1を持つ古典的スピン（ＸＹスピン）が最近接相互作用している系を表わす。ここで、$<jk>$は3次元格子上の最近接格子間でのみ和を取ることを意味し、$N$は系の自由度である。

系 (1) の時間発展は次に示す正準方程式に従う。

$$\frac{dq_j}{dt}=p_j,\quad \frac{dp_j}{dt}=-\sum_{k|j}\sin(q_j-q_k). \tag{2}$$

ここに、$k|j$は$j$番目の格子の最隣接格子$k$に関してのみ和をとることを意味する。計算は、時間の刻み幅を$\Delta t=0.01$とした4次のシンプレクティックインテグレータによって行なった。

系 (1) の緩和の観測は以下に定義する時間発展するオーダーパラメータ $M^i(t)$ を通して行なうものとする。

$$M^i(t) = \frac{1}{N}\left\|\sum_{j=1}^{N} \vec{m}_j^i(t)\right\|. \tag{3}$$

ここで、上付きの $i$ は初期条件の取り方を区別する添え字であり、下付きの $j$はスピンを区別する添え字である。$\vec{m}_j^i$は座標 $q_j$の関数であるから、$q_j(t)$ と共に時間発展し、それに伴って $M^i(t)$ も各時刻 $t$ で定義されている。この定義から、$M^i(t)$ は $0 \leq M^i(t) \leq 1$ の範囲の値をとることがわかる。以下では、式 (3) で定義されたオーダーパラメータの時間的・アンサンブル的統計をとることにより系の緩和を観測する。

まず、$M^i(t)$ を時刻 0 から $t$ まで積分した次の量を導入しよう。

$$\overline{M^i}(t) = \frac{1}{t}\int_0^t dt' M^i(t'). \tag{4}$$

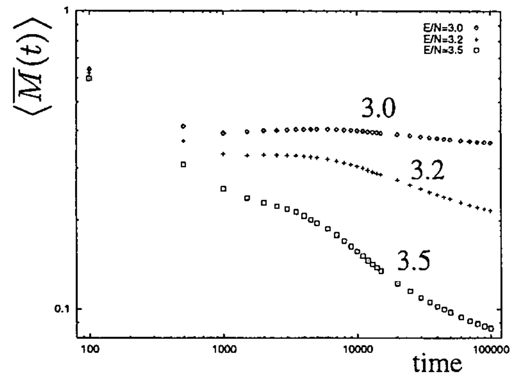
系がエルゴード性を持っていれば力学的な長時間平均は統計力学における統計平均に対応するから、$\overline{M^i}(\infty)$ が熱平衡におけるオーダーパラメータの統計平均$< M >_{eq}$に対応する。式 (4) で表わされる量は初期条件に依存する量であるが、これからはいろいろな初期条件に対する平均と分散をとる、つまりアンサンブル統計をとった量を観測する事にする。観測するのは次の二つの量である。

$$\left\langle \overline{M}(t) \right\rangle = \frac{1}{S}\sum_{i=1}^{S} \overline{M_i}(t), \tag{5}$$

$$\left\langle (\Delta \overline{M}(t))^2 \right\rangle = \frac{1}{S}\sum_{i=1}^{S} \left( \overline{M_i}(t) - \left\langle \overline{M}(t) \right\rangle \right)^2. \tag{6}$$

ここで、$S$はサンプルとしてとった初期条件の数を表わす。$\left\langle \overline{M}(t) \right\rangle$は平均的な緩和の様子を表わし、$\left\langle (\Delta \overline{M}(t))^2 \right\rangle$は初期条件の違いによる平均的な緩和からのずれを表わす。これらのうち、後者の量は次のような性質をもっている。もし系がエルゴード性を持っていれば、長時間平均値は初期条件によらず同一の値（統計平均値）になるべきであるから、$t \to \infty$ では初期条件による違いは見られなくなる、つまり$\left\langle (\Delta \overline{M}(\infty))^2 \right\rangle = 0$ となるべき量である。従って、この量が 0 に向かう速さがエルゴード性を獲得する速さ（熱平衡への緩和の速さ）の指標になる。

初期条件に関するコメントをした後に、計算の結果を示す。すべての初期条件に対して $q_j^i(t=0) = 0$ とし、$p_j^i(t=0)$ を変えることによって初期条件を変えるものとする。つまり、初期にはすべてのスピンの方向がそろっており、オーダーパラメータは $M^i(t=0) = 1$ となる。ポテンシャルで考えると、初期にはポテンシャルの一番底にいることになり、底から運動量 $p_j^i(t=0)$ を持たせて打ち出すのであるがその強さと方向を調節する事で、エネルギーと初期条件をそれぞれ調節する。



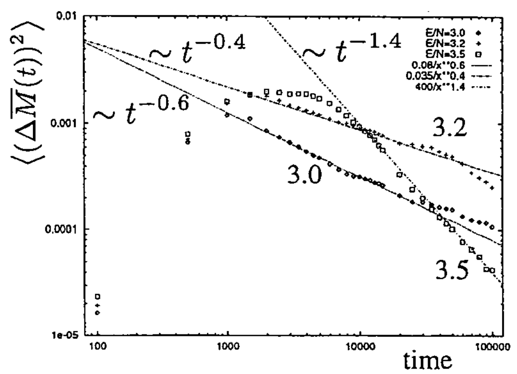




図 1: $\langle \overline{M}(t) \rangle$ の時間変化。両対数表示。図中の数値は $E/N$を表わす。$E/N \sim 3.2$ が臨界点。この図からは、動的性質としての臨界点の特異性は見られない。

図 2: $\langle (\Delta\overline{M}(t))^2 \rangle$の時間変化。両対数表示。図中の数値は $E/N$を表わす。$E/N \sim 3.2$ が臨界点。実線は、$t$ のベキで近似したもの。臨界点でベキの指数の絶対値が最も小さい、つまり緩和が最も遅いことがわかる。

# 3 計算結果

それでは、計算の結果を示そう。系の大きさは、一辺が 14 の正方格子をとった。つまり $N = 14^3$である。このとき、臨界エネルギーは、$E/N \sim 3.2$ である。そこで臨界エネルギーとその周りを比較するため、$E/N = 3.0, 3.2, 3.5$ についての結果を示す。

図 1 には$\langle \overline{M}(t) \rangle$ の時間変化を示した。初期には熱平衡値から離れた値 ($\langle \overline{M}(t=0) \rangle = 1$) をとっていたが、時間の経過とともに$\langle \overline{M}(t) \rangle$は小さくなっており、熱平衡状態に緩和して行く様子が見られる。しかし、臨界点の特異性がこの時間変化からはうかがい知ることができない。つまり、オーダーパラメータの時間発展のアンサンブル平均は臨界点で特異な振る舞いをしないといえる。オーダーパラメータの緩和自身は臨界点でも特異的ではないのである。

次に図 2 を見てみよう。早期 ($t \sim 1000$ まで) では時間の経過と共に$\langle (\Delta\overline{M}(t))^2 \rangle$は増加している。これは、初期には$\langle (\Delta\overline{M}(t=0))^2 \rangle = 0$ であったが、初期条件の違いによってばらつきが発生している事による。それから後の時間発展をベキで近似すると、臨界点でベキの指数の絶対値が最も小さくなる事がわかる。つまり、臨界点では初期条件の違いによるばらつきがなかなか解消されない、熱平衡への緩和が遅いのである。

以上をまとめると、$\langle \overline{M}(t) \rangle$は臨界点で特異な振る舞いをしないが、$\langle (\Delta\overline{M}(t))^2 \rangle$は臨界点で特異な振る舞いをする。これが、問題 (A) に対する解答である。もちろん、$\langle (\Delta\overline{M}(t))^2 \rangle$ の他にも臨界点で特異な振る舞いをする量がある可能性はある。

# 4　軌道不安定性と緩和

ここまでは、2次相転移系の時間発展を力学的に追った時に見られる臨界点の動的特異性を示してきた。この節では、このような動的特異性がどのような相空間の構造から導かれるのか、という事を考えるための準備的な議論を行なう。

力学系を考える時に系の性質を特徴付ける量の一つとして最大リアプノフ数がある。最大リアプノフ数とは、ある軌道から初期にわずかにずらした軌道を考え、それら二つの軌道が時間と共に指数関数的に離れて行く時の指数の長時間平均である。式で書けば最大リアプノフ数$\lambda_1$は以下の通り。

$$\lambda_1 = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \log(\Delta(t)). \tag{7}$$

ここに$\Delta(t)$ は時刻$t$における二つの軌道の差である。最大リアプノフ数が正ならばその軌道は不安定、零ならば中立、負ならば安定であって、正の時には系はカオスである。

ここでは最大リアプノフ数のエネルギー依存性を見てみよう。図3によると、最大リアプノフ数は臨界点の付近で最大となっており、系のカオスが強い事を示している。しかし、臨界点直上で最大となっている訳ではない。このことは、系の自由度を変えていっても変わらない事から、無限自由度でも同じである事が期待される。つまり、系のカオスの強さと緩和の速さは直接には関係がつかない。

リアプノフ数は、時間発展方程式(2)のヤコビ行列の最大固有値という言い方もできる。つまり、局所（線形）な性質を捕らえているものである。一方、$\left\langle(\Delta\overline{M}(t))^2\right\rangle$という量は相空間をどれだけ早く埋め尽くせるかを示す指標であるから、大域的な性質を捕らえていると言える。従って直接の関係が見えなかったとしても不思議ではない。

ただし、臨界点ではそれより下のエネルギーにくらべてカオスが強いにも関わらず、緩和は遅いというのは興味深い現象である。

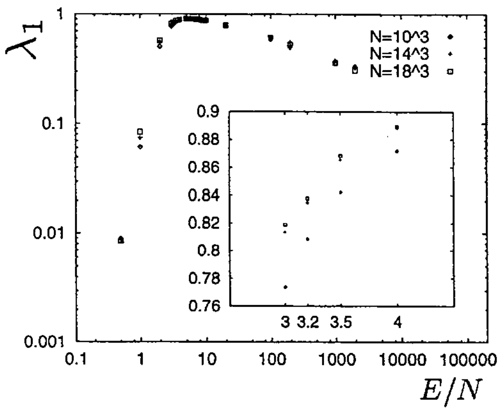



図 3: 最大リアプノフ数のエネルギー依存性。両対数表示。自由度は$N = 10^3, 14^3, 18^3$。挿入図は臨界点付近における両線形表示。最大となるのは臨界点の付近ではあるが臨界点直上ではない。

# 5　まとめ

2次相転移を起こすモデルハミルトニアンから正準方程式を導き、それを数値的に積分することによって系の時間発展を力学的に追い緩和の様子を観測した。観測は、オーダーパラメータの時刻$t$までの平均（式(4)）をもとにして行なった。初期値に依存する上のような量をいろいろな初期値に対して平均すると、オーダーパラメータの時間発展そのも

のには臨界点での特異性は現われなかったが、初期値によるばらつきは臨界点で遅く緩和することがわかった。このことは、臨界点では系がエルゴードに達するのに時間がかかるということを意味している。ここまでが、第1節に挙げた問題(A)への解答である。

つぎに臨界点での動的異常性の原因を考えるための準備として、最大リアプノフ数のエネルギー依存性を調べた。臨界点付近で最大となっていることから臨界点では系は強いカオスであることが示唆されたが、最大となるのは臨界点直上ではないために、軌道不安定性と動的異常性は直接には結びつかないことがわかった。

問題(B)に対する考察をさらに押し進め、臨界点における相空間の構造の理解と、その構造からの遅い緩和の理解が今後の課題である。