

Balgac-Kusnezov スキームにおける非線形結合項の役割

岡田華代*・瀧崎員弘**

A role of the nonlinear coupling terms in Balgac-Kusnezov's scheme

Department of Physics, Ehime University

Kayo Okada, Kazuhiro Fuchizaki

Abstract

Time-evolution of the motion a classical spin located in a magnetic field under finite temperatures was examined by integrating the equations of motion put forth by Balgac and Kusnezov. An important role played by the nonlinear coupling to a heat reservoir in a mixing process of trajectories in the phase space was clarified.

Key Words: Phase space, Mixing process, Balgac-Kusnezov's scheme, Spin system

1. はじめに

定温アンサンブルを計算機シミュレーションにおいて実現することに関しては50年以上の歴史がある。初期にはMetropolisら(1953)によって定式化されたMonte Carlo法が、当時軍事目的で開発されて大型計算機上に実装され方法論的に発展した。しかしながら、Monte Carlo法では系の決定論的な時間発展を追うことはできない。このため系の運動方程式を基にして定温アンサンブルを実現する様々な方法が探求された。これらのうち、「古典系では1自由度あたりの運動エネルギーに対して等量の熱エネルギーが分配される」という命題を実現するべく構成粒子の運動量をスケールする方法(Woodcock, 1971)は多用される方法であり、その物理的根拠はGaußの最小拘束の原理(Lanczos, 1970)を基に示されている(Haile and Gupta, 1983)。

とりわけ重要な進展が1984年に能勢によりもたらされた(Nose, 1984);系を記述する位相空間変数

の他に熱浴変数を導入し、熱浴との結合項を含んだHamiltonianの小正準集団平均が系の一般化座標と熱浴変数でスケールされた運動量の正準集団平均と等価になることを示した。今日「能勢力学」として知られるこの巧妙な方法は、BalgacとKusnezovによって運動エネルギーを含まない系に拡張された(Balgac and Kusnezov, 1990a, 1990b)。そのサーモスタット機構についてはすでに明らかにされている(Fuchizaki, 1997)。

そこで、本研究ではBalgac-Kusnezovアルゴリズムを用いて磁場内に置かれた1つの古典スピンの運動を位相空間内において追跡する。古典スピン系とは別に熱浴を考え、熱浴に複数の変数を与える。能勢の方法と同様に、熱浴はポテンシャルを有すると考え、それは熱浴変数によって表現される。また、系と熱浴のそれぞれの変数の積で表される結合項を導入する。この結合項によってスピン系と熱浴の間でエネルギーのやりとりが可能となり、スピン系を熱平衡に到達させることが原理的に可能となる。与えられた磁場の強さと熱エネルギーの大きさの下で、熱浴との結合様式が位相空間内での軌道の混合に、いかに影響を与えるかをLiapunov指数により評価する。

* 愛媛大学大学院理工学研究科博士後期課程

** 愛媛大学理学部物理教室

2. 定温下でのスピンの歳差運動

(1) Balgac-Kusnezov の運動方程式

$s = (X_1, X_2, X_3)$ で表される 1 つのスピンの場合、磁場 $H = (0, 0, H)$ 内に置かれたとき、磁場によって歳差運動を誘起され、その運動は古典的に

$$\hbar \dot{s} = g \mu_B s \times H \quad (1)$$

で記述される。ここで、 g は g 因子、 μ_B は Bohr 磁子である。今後、Dirac 定数 $\hbar = 1$ とし、 $g \mu_B H = h$ とする。

この小正準集団であるスピン系が温度 T と熱的に接触すると熱エネルギーによって (1) 式で与えられる運動の軌道が乱される。この熱的接触が (1) 式のもつシンプレクティック構造を破ることで達成されることが Balgac と Kusnezov において指摘された (Balgac and Kusnezov, 1990a)。ここでは、熱浴変数として 2 変数 ζ_1, ζ_2 をとり、結合様式としては ζ_1 の 3 次の結合と ζ_2 の 1 次の結合を考えることにする。これは能勢力学でいう ζ_1^4 と ζ_2^2 に比例するポテンシャルを熱浴に導入したことに相当する。この状況を Balgac-Kusnezov (1992) の (5.4) 式に適用すると、これらすべての自由度に対する運動方程式

$$\begin{aligned} \dot{X}_1 &= h X_2 - \zeta_1^3 \{X_3 X_1 - (X_2)^2\} + \zeta_2 X_3 X_1 \\ \dot{X}_2 &= -h X_1 - \zeta_1^3 \{X_1 X_2 - (X_3)^2\} + \zeta_2 X_3 X_2 \\ \dot{X}_3 &= -\zeta_1^3 \{X_2 X_3 - (X_1)^2\} - \zeta_2 \{(X_1)^2 + (X_2)^2\} \\ \dot{\zeta}_1 &= -\alpha_1 [h \{X_2 X_3 - (X_1)^2\} + k_B T (X_1 + X_2 + X_3)] \\ \dot{\zeta}_2 &= -\alpha_2 [h \{(X_1)^2 + (X_2)^2\} - k_B T (2X_3)] \end{aligned} \quad (2)$$

が得られる。 k_B はボルツマン定数である。 $\alpha_i (i=1, 2)$ はスピン系と熱浴との間のエネルギー易動度を担う定数であることが示されている (Fuchizaki, 1997)。実際、 $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$ とおき、即ち、スピン系と熱浴を切り離し、 $\zeta_1(0) = \zeta_2(0) = 0$ とすると (2) 式は (1) 式に帰着する。4 次の Runge-Kutta 法 (杉江日出澄・岡崎明彦・足達義則・尾崎正弘, 1986) を用いて (2) 式を数値的に積分し、 $(X_1, X_2, X_3, \zeta_1, \zeta_2)$ の時間発展を追跡した。

(2) Liapunov 指数

位相空間内での軌道の混合の程度を表す尺度、即ち、平衡状態への到達速度の目安として Liapunov 指数を求めた。Liapunov 指数は軌道の伸縮率を表す指数であり、任意の点とその点から微小距離 d_0 離れた任意の点の t 時間後の間隔と d_0 の比の対数をとることによって得られる (Benettin, Galgani and Strelcyn, 1976)。まず、位相空間内のある軌道上の任意の点 $x = (X_1, X_2, X_3, \zeta_1, \zeta_2)$ とその点から微小距離離れた位相空間内の任意の点を $x' = (X'_1, X'_2, X'_3, \zeta'_1, \zeta'_2)$ とし、これらの間の距離を d_0 とする。即ち、

$$d_0 = \|x(0) - x'(0)\|$$

である。 $\|x\|$ はベクトル x のノルムを表す。 dt を微小時間とし、 $t = idt (i=1, 2, \dots, n)$ 後のそれぞれの点の位置を $x_i \equiv x(t), x'_i \equiv x'(t)$ と書くと t 時間後の両点間の距離は

$$d_i = \|x_i - x'_i\|$$

となる。

$$\lambda_n = \frac{1}{ndt} \sum_{i=1}^n \ln \left(\frac{d_i}{d_0} \right) \quad (3)$$

を時刻 t での Liapunov 指数 $\lambda(t)$ と呼ぶことにすると Liapunov 指数は

$$\lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_n \quad (4)$$

から得られる。

3. 結果

ここでは、 $\frac{k_B T}{h} = 1.0$ と 0.1 の場合について数値計算を行った。前者はスピンが受ける熱エネルギーと磁場からのエネルギーが同じオーダーになる場合で、以下ではこの場合を高温状態と呼ぶ。後者は熱エネルギーが磁場から受けるエネルギーより一桁小さい場合で低温状態と呼ぶ。

まず、高温状態で2つの熱浴変数とともにスピン系に結合させた場合について計算を行った。 $\alpha_1 = \alpha_2 = 1.0$ のときの(3)式から得られる Liapunov 指数を時間 t の関数としてプロットしたのが Fig.1 である。 $t \rightarrow \infty$ で 0.08 に漸近することから $\alpha_1 = \alpha_2 = 1.0$ のときの高温状態での Liapunov 指数として $\lambda = 0.08$ が得られる(4)式参照)。

次に、低温状態で3次の結合を導入した場合($\alpha_1=1.0$)と導入してない場合($\alpha_1=0$)について Liapunov 指数を評価した。それぞれの場合について1次の結合の強さ α_2 を変化させた場合の Liapunov 指数の変化の様子を Fig.2 に示した。3次の結合項を導入しない限り、1次の結合の強さをいくら大きくしても Liapunov 指数の値は 0.005 から増加しない。即ち、熱浴との1次の結合だけでは位相空間内での軌道の混合が有効に行われず、スピン系の熱平衡状態への到達が困難になる。一方、3次の結合項を有する場合は1次の結合項の強さの増加とともに Liapunov 指数は増加し、 $\alpha_2 \cong 5$ で $\lambda \cong 0.06$ となり、スピン系は高温状態とほぼ同程度の熱平衡到達効率を得ていることを示している。

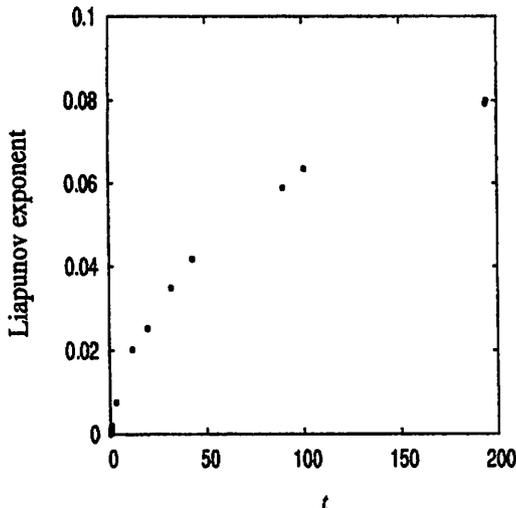


Fig.1 Time variation of the Liapunov exponent obtained through eq.(3) when $\frac{k_B T}{\hbar} = 1.0$, $\alpha_1 = 1.0$ and $\alpha_2 = 1.0$.

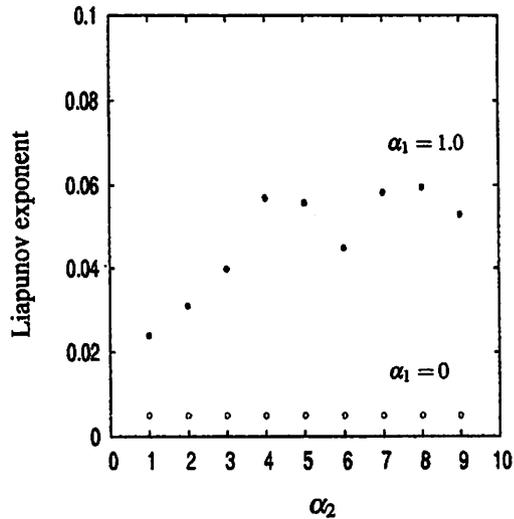


Fig.2 Dependence of the Liapunov exponent on strengths of the coupling constant α_2 in a low-temperature state $\frac{k_B T}{\hbar} = 0.1$. Note the qualitatively different behavior in the exponents depending on whether or not the other constant α_1 switches on.

4. おわりに

結合定数は結合の強さを表す指標である。ここでは強い結合として3次の結合項を、弱い結合として1次の結合項を考えた。高温状態では2つの結合を導入すれば Liapunov 指数が時間の経過とともに単調に増加して 0.08 に漸近した。これに対して、3次の結合項を含めないとき、低温状態では Liapunov 指数は1次の結合係数を大きくしても一定の値 0.005 のままである。これは高温の場合の漸近値よりも極めて小さい。つまり、系は熱平衡状態に達することは困難である。しかし、低温で3次の結合項を含めると Liapunov 指数は1次の結合係数の増加に伴って増加する。つまり、系は熱平衡状態を回復する。

以上のことから、Balgac-Kusnezov アルゴリズムにおける3次の結合項は、熱平衡を実現する上で本質的な役割を果たすことが明らかになった。

文献

- Balgac, A. and Kusnezov, D. (1990a) Classical Limit for Lie Algebras. *Ann. Phys.* **199**, 187-224.
- Balgac, A. and Kusnezov, D. (1990b) Canonical ensemble averages from pseudomicrocanonical dynamics. *Phys. Rev. A* **42**, 5045-5048
- Benettin, G., Galgani, L., Strelcyn, J-M. (1976) Kolmogorov entropy and numerical experiments. *Phys. Rev. A* **14**, 2338-2345.
- Fuchizaki, K. unpublished work (1997).
- Haile, J. M. and Gupta, S. (1983) Extensions of the molecular dynamics simulation method. II. Isothermal systems. *J. Chem. Phys.* **79**, 3067-3076.
- Kusnezov, D., Bulgac, A. and Bauer, W. (1990) Canonical Ensemble from Chaos. *Ann. Phys.* **204**, 155-185.
- Kusnezov, D. and Balgac, A. (1992) Canonical Ensemble from Chaos II: Constrained Dynamical Systems. *Ann. Phys.* **214**, 180-218.
- Lanczos, C. (1970) *The Variational Principles of Mechanics*, Dover, 106-110
- Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H. and Teller, E. (1953) Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. *J. Chem. Phys.* **21**, 1087-1092.
- Nosé, S. (1984) A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods. *J. Chem. Phys.* **81**, 511-519.
- 杉江日出澄・岡崎明彦・足達義則・尾崎正弘 (1986) FORTRAN77 による数値計算法, 培風館, 91-94.
- Woodcock, L. V. (1971) *Chem. Phys. Lett.* **10**, 257.