

修士学位論文

長距離相互作用系におけるスケーリング則

平成二十五年度

広域科学専攻 相関基礎科学系

---

31-126933

ひゅうが まさひこ  
日向 理彦



# 概要

本研究の目的は、長距離相互作用系の熱平衡状態におけるスケーリング則を調べることである。短距離的相互作用しかない場合には、系の粒子数を  $N$  とすると系のエネルギーは  $E \propto N$  のようにスケールするが、長距離相互作用のある系ではこのような単純なスケーリングが成り立たないことが知られている。

長距離相互作用の減衰の仕方が単純な冪的である場合<sup>\*1</sup>には先行研究でよく調べられており、 $E \propto N^{1+\star}$  という形<sup>\*2</sup>になることが知られている。

しかしながら相互作用が複数の冪を足しあわせたような減衰の仕方をする場合については詳しい議論はあまりなされていなかった。そこで本研究では、単純な冪で書くことのできない長距離相互作用を持つ、いくつかのモデルを数値的にシミュレーションすることで、温度とエネルギーの関係を求め、どのようなスケーリング則が成り立つのかを調べた。

その結果、1. 従来通りの  $E \propto N^{1+\star}$  というスケーリングは系のサイズが十分大きければ成り立つものの、複数の冪が混ざり合い、これらがクロスオーバーを起こすような領域ではこのようなスケーリングは成り立たないこと、2. 系のポテンシャルを短距離的な項と、長距離的な項に分解し、それぞれについて従来理論から予測されるスケーリング則を考えたとしても、これは成り立たず、特に短距離的なポテンシャルでさえ  $O(N)$  でスケールしなくなること、などが分かった。一方で本文で詳述する新たなスケーリングファクタ  $N_{\text{sum}}^*$  を導入し、従来理論を拡張することで、非常に精度のよいスケーリング則の成立を確認することができた。

本論文の構成は以下のようなものである。まず第一章で、本研究を理解するために必要となる長距離相互作用系の基礎知識を解説する。第二章で研究の動機を述べ、第三章で用いたモデルや解析方法などを解説した後、第四章にて本研究で得られた結果を述べる。最後に第五章にて本研究により得られた結果の考察およびこれからの本研究の展望などを述べる。

---

<sup>\*1</sup> ポテンシャルエネルギーの大きさが、距離  $r$  の増加に関して  $\sim 1/r^\alpha$  となるような場合のこと。詳細は後述する

<sup>\*2</sup>  $\star$  の具体的な表式は、相互作用が  $\sim 1/r^\alpha$  のように減衰する場合には、空間座標の次元を  $d$  として  $\star = \alpha/d$  で与えられる。詳細は本文を参照されたい。



# 目次

概要		i
第一章	はじめに	1
1.1	熱・統計力学と相加性	1
1.2	熱力学極限	2
1.3	短距離と長距離	4
1.4	スケーリング則	5
1.4.1	Tsallis のスケーリング則	6
1.4.2	Kac の処方箋	7
第二章	動機と背景	9
2.1	古典格子系	9
2.2	モデル	10
2.3	スケーリング則を考える	10
2.4	具体例	11
2.5	目標	12
第三章	モデルと手法	15
3.1	モデル	15
3.1.1	$N_C$ について	15
3.2	熱浴	16
3.2.1	熱浴の妥当性	16
3.3	数値積分法	18
第四章	研究結果	21
4.1	平衡緩和	21
4.2	緩和時間	22
4.3	スケーリング	24
4.3.1	漸近形を用いた場合	25
4.3.2	個別にみた場合	27
4.3.3	総和を用いた場合	27
4.4	エネルギーの原点	31
4.5	スケーリングの使い方	32
第五章	おわりに	35

5.1	考察 . . . . .	35
5.2	まとめ . . . . .	35
5.3	展望 . . . . .	36
5.3.1	異なる二体ポテンシャル . . . . .	36
5.3.2	古典格子系以外のモデル . . . . .	36
付録 A	厳密解 . . . . .	39
A.1	同次函数型 . . . . .	39
A.1.1	モデル . . . . .	39
A.1.2	ビリアル定理からいえること . . . . .	39
A.1.3	ミクロカノニカル解 . . . . .	40
A.1.4	カノニカル解 . . . . .	40
A.2	平均場 Hamiltonian モデル . . . . .	41
A.2.1	ミクロカノニカル解 . . . . .	41
A.2.2	カノニカル解 . . . . .	41
付録 B	ビリアル定理 . . . . .	45
B.1	証明 . . . . .	45
B.2	同次函数型の場合 . . . . .	46
参考文献		47
謝辞		49

# 第一章

## はじめに

この章では、本研究を理解するために必要となる、長距離相互作用系についての基礎知識を解説する。ただしここでは本研究の前提知識として必要な最低限の内容のみに限って解説する。

### 1.1 熱・統計力学と相加性

十九世紀を終える頃には完成をみるに至った熱力学や統計力学は、非常に広い範囲の予言能力をもち、現代の物理学の根底を支える理論となった。しかしながら熱力学や統計力学の理論をよく反省すると、取り扱う系に対して「相加性\*1」と呼ばれる性質を暗黙のうちに仮定していることに気づく。相加性とは「系を二つに分割した場合、分割した二つの系のエネルギーや体積、磁化などのマクロ量がすべて半分になる」という性質を意味する。この性質が多くの物質で成り立っていることは我々の日常経験からは明らかであるが、例えば重力相互作用や Coulomb 相互作用のある物質を考えると、分割した二つの系間に存在するポテンシャルエネルギーが系全体のエネルギーと同程度になってしまうため、これを引き剥がそうとするとその際に要する仕事の分だけ系のエネルギーが増大してしまい、相加性はみだされていことが分かる。

この相加性と呼ばれる性質は、熱力学や統計力学の議論においてどのように使われているのだろうか？その一つの例としては「単位体積あたりのエネルギー（密度）」といった量を定義する場合に相加性を仮定する必要がある、ということが挙げられる。相加性が満たされない場合にエネルギー密度といった量を定義できなくなってしまうのはなぜかという、もし考えている系が相加性を満たしていない場合には系を二つ合体させて二倍の大きさの系を作ったとしてもエネルギーが倍になるとは限らず、エネルギーと体積が比例関係になくなってしまうため、「1ℓあたりの内部エネルギーは 100J」といった主張は意味をなさなくなってしまうからである。他にも「比熱が正であること」「カノニカル分布とミクロカノニカル分布が異なる結果を与えること\*2」など、熱力学や統計力学で非常に重要な事項を示すためには相加性の仮定が必要であることが知られている\*3。

それでは相加性が満たされなくなってしまうのはどのような場合だろうか？相加性がみだされてなっ

---

\*1 日本語では他にも「加法性」と呼ぶ流儀があり、どちらの呼び方も一般的に用いられている。英語では“additivity”と呼ばれている

\*2 これは「アンサンブルの非等価性 (ensemble inequivalence)」と呼ばれており、比熱が負となることと深い関係にあることが知られている。アンサンブルの非等価性については、例えば [1, 2] などと言及されている。[3] にはアンサンブルが非等価になってしまう仕組みの数学的な解説が明確な形で示されている

\*3 長距離相互作用がある場合に比熱が負になりうるとはかなり昔から知られており、古くは重力多体系において議論されていた [4, 5]。また近年では長距離相互作用系の議論でよく用いられる平均場 Hamiltonian モデルと呼ばれるモデルに短距離相互作用項を付け加えたモデルにおいて、厳密計算から負の比熱の存在が言えている [6]。特に、このように比熱が負になる系を二つ用意して接触させると安定的な状態が複数できてしまうため、平衡状態であるにもかかわらずマクロ量に変化してしまうことが知られている [7, 8]

まうのは、系を二つに分割した際に二つの系同士に働く相互作用エネルギーが全体のエネルギーに比べて無視できない場合であるから、先ほどあげたように重力相互作用や Coulomb 相互作用のように空間的に遠いところまで相互作用が及んでいる場合に相加性は破綻する。逆に、相互作用が近いところまでしか及ばない場合には系の分割に要するエネルギーはせいぜい切断面の面積に比例する程度であるから、系全体のエネルギーと比べれば無視できる大きさ<sup>\*4</sup>であり、相加的となる。すなわち、粒子同士の相互作用ポテンシャルが近い場所までしか及ばないものは相加的であり、遠くまで及んでしまうものは非相加的となる<sup>\*5</sup>。前者のような相互作用を総称して「短距離相互作用 (short-range interaction)」後者を「長距離相互作用 (long-range interaction)」と呼ぶ。

既に述べた通り、系に長距離相互作用がある場合には一般には相加性は破綻してしまうため、通常の熱力学や統計力学の「常識」はもはや成り立たず、我々の普段考えている「常識」からすると考えられないような性質 — 例えば比熱が負になる、ミクロカノニカル分布とカノニカル分布で違う結果を与える、系の性質が系のサイズや形によって顕<sup>あらわ</sup>に変わってしまう、など — がみられる場合があり、こういった特異な性質を調べるのが長距離相互作用系の研究における主要なテーマの一つとなっている。本論文のメインテーマであるスケールリング則も、ここで取り上げた非常識な性質のうちの一つ「系の性質が大きさや形によって顕に変わってしまう」という性質についての研究であるということができよう。

## 1.2 熱力学極限

前節で「長距離相互作用系の性質は、系の大きさや形によって顕に変わってしまう」と述べた。このことをみるために、長距離相互作用系に対して通常の意味での熱力学極限操作をとったらどうなるかを考えてみよう。

まず通常の意味での（短距離相互作用系における）熱力学極限操作が何を意味しているのかを考えてみよう。系の性質を決めるものは、1. 系のバルク（内部）が及ぼす影響と、2. 系の表面が及ぼす影響に大別することができる。系の典型的な長さ（一辺の長さ）を  $L$  とおくと、1. は  $O(L^3)$ 、2. は  $O(L^2)$  の影響をもつ<sup>\*6</sup>と考えられる。熱力学は物質のバルクの性質を予言する理論であるから、バルクの性質のみを取り出したい。系の典型的な長さ  $L$  を大きくすれば表面からの寄与は相対的に（バルクの寄与と比べて）無視できるため、このためには  $L \rightarrow \infty$  とすればよい。このとき、系のエネルギーは体積の増加に従ってどのように増やしていけばいいだろうか？もちろん、答えから先に言うと  $E \propto L^3$  とすればよいのだが、これはなぜだろうか？すでに述べたように、熱力学極限をとる意図は系のバルクがもつ性質を抜き出すことであるから、系のサイズを大きくする際にバルクの性質が一定となるようにしなければいけない。さて、いま考えている系は短距離相互作用系であり相加性が成り立つので、系を半分に分割した場合には、分割される前後で系の

<sup>\*4</sup> 物質の一辺の（典型的な）長さを  $L$  とすると、分割に要するエネルギーは  $O(L^2)$  であるが、系の内部エネルギーは  $O(L^3)$  であるから、 $L$  が十分に大きければ分割に要するエネルギーは相対的に無視することができる

<sup>\*5</sup> ここでの説明は、「直感的にはこのように理解できる」という程度のものであり、厳密には正しくない。なぜならば、遠くまで相互作用が及んでいても、その減衰が十分速ければ短距離的（相加的）となる場合があるためである。例えば指数減衰は無限に遠い場所まで作用を及ぼすが、明らかに短距離的（相加的）であるし、Lennard-Jones ポテンシャルにみられるような距離  $r$  に対して  $1/r^6$  のように大きな冪を持った冪減衰なども短距離的（相加的）となることが知られている。より正確な議論については 1.3 節を参照されたい

<sup>\*6</sup> 二次元系であれば 1. は  $O(L^2)$ 、2. は  $O(L)$  であるし、一般に  $d$  次元系では 1. は  $O(L^d)$ 、2. は  $O(L^{d-1})$  であるが、ここでは考えている系が三次元であることを暗に仮定した。以降の議論では対象の次元を変えてもほぼ同様のことがいえるため、三次元であると思って話を進めても一般性を失わないことに注意されたい



## 1.2 熱力学極限

バルクの性質はほとんど変わらない\*7ことが期待できるであろう。逆に言うと、全く同じ系\*8を二つ合体させれば系のバルクの性質はほとんど変わらないことが期待できる。従って体積  $L^3$  とエネルギー  $E$  が比例するように系のサイズを増やしていけばよいと分かる。

それでは相加性の成り立たない長距離相互作用系の場合についても通常の意味での（上で説明した通り、 $E \propto L^3$  としながら  $L \rightarrow \infty$  とする）熱力学極限を取るとどうなるだろうか？長距離相互作用がある場合には近接粒子から感じる相互作用ポテンシャルよりも、物質全体から感じる相互作用ポテンシャルの方が大きくなるために、大きさや温度、エネルギーといった量が全く同じ系を二つ合体させたとしても、もとの系とはバルクの性質が大きく変わってしまう、ということが起きる。特に、一つの粒子が物質全体から感じる相互作用ポテンシャルが系の大きさの増大に対して無限大に発散してしまうために、通常の意味での熱力学極限をとると系全体の運動が次第に死んでいってしまい、系が凍りついていくという現象（詳しくはコラム 1.1 参照）が起こる。従って、長距離相互作用系では従来通りの（ $E \propto L^3$  としながら  $L \rightarrow \infty$  とする）熱力学極限操作をとるとバルクの性質が変わってってしまうために、通常の意味での熱力学極限は物理的にはあまり意味のない操作となってしまう。

このように長距離相互作用系においては無限系を考えることは物理的にあまり意味が無い（凍結してしまう）ため、有限の大きさの系の性質を予言することが長距離相互作用系における主題となる。一方で、長距離相互作用系では有限の大きさの系の性質を調べることが本質であるとしても、熱力学や統計力学において興味があるのは系のバルクの影響から決まる性質であるから、短距離相互作用系と同様に、表面の及ぼす寄与が十分無視できる程度のマクロな大きさをもつ必要がある。従って、長距離相互作用系の熱力学や統計力学の主目的は、有限ではあるが、熱力学や統計力学が意味をもつ程度の（マクロな）大きさをもつ系の性質を予言することであるといえる。

長距離相互作用系では有限の大きさの系に興味があるとしても、表面からの寄与を無視するような何らかの操作を考えなくてはならない。しかしながら、すでに述べたように通常の短距離相互作用系を做って極限操作を考えても意味がない。そのためには、通常の意味での熱力学極限に対して何らかの修正を行う、というのが最も安直かつ尤も<sup>もっと</sup>らしい方法であろう。実際、どのような極限操作をとることが尤も<sup>もっと</sup>らしいのかについては多くの先行研究がある。詳細は 1.4 節にて述べるが、直感的には系の運動が凍りつかないように温度などのパラメータを系の大きさに対して増やしていく、という極限をとればよい、ということが知られている。具体的にどのように温度やエネルギー密度を増やしていけばよいかについては、最も強い（最も長い距離まで働く）相互作用が支配的となる場合にはよく調べられていた。しかしながら系が無限に大きな場合には確かに最も強い長距離相互作用のみで系の性質が決まってしまうが、系の大きさが有限の場合にはその限りではない。表面効果が十分無視できる程度の大きさであっても短距離的な寄与と長距離的な寄与が同程度となる場合があり、そのような場合には具体的にどのような操作を考えればよいのかはあまり議論されていなかった。そこで本研究では、（表面による寄与が十分無視できる程度のマクロな大きさを持つが）短距離的な効果と長距離的な効果が同程度で効いてしまうような場合にどのように従来理論を拡張すればよいのかを調べることを主目的とした。後で第 2.4 節でみるように、このような短距離的な効果と長距離的な効果のクロスオーバーは日常スケール（例えば、数メートル程度）の大きさで起きることが簡単な見積りから分かるため、系の大きさが有限であることが頭に効く議論ではあるが、あくまでもマクロな大きさをもつ系の性質に関する議論であって、ナノスケールやミクロスケールといった非常に小さな物質を対象としているわけで

\*7 相加性が成り立つのは、近接粒子同士の相互作用が支配的となっている場合であったことを思い出そう。近接粒子同士の相互作用だけで決まるのであれば、切断する前後の性質の違いは切断面の付近でしか寄与を及ぼさないため、バルクの性質は変わらないはずである。逆に相加的でない場合には、分割したものの片割れとの間の相互作用が支配的となっているため、分割によって系のバルクの性質は変わってしまうと考えられる

\*8 ここでは、二つの系の体積やエネルギー、温度なども全く同じであることを仮定している

はないことを強調しておきたい。

### コラム 1.1 (凍結)

1.2 節で長距離相互作用のある系で通常の意味での熱力学極限を取ると、系全体の運動が凍りついてしまうということを述べた。このコラムではこのことをもう少し詳しくみていこう。

次の Hamiltonian で与えられる一般的な古典格子系<sup>\*9</sup>を考えよう。

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{J}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{U(\|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j\|)}{a^\alpha \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|^\alpha} \quad (1.1)$$

ここで  $\{\mathbf{q}_i\}, \{\mathbf{p}_i\}$  はそれぞれ正準座標及び正準運動量であり、 $a$  は格子間隔、 $\{\mathbf{r}_i\}$  は単位格子ベクトルである。 $d$  を格子を配置する空間の次元とすると、このモデルの相互作用は  $\alpha \leq d$  のとき長距離的になる。簡単のため、ポテンシャル  $U(\Delta q)$  は  $\Delta q = 0$  でただひとつの最小値をとる（すなわち、基底状態である）とし<sup>\*10</sup>、またその値は  $U(0) = 0$  であるとする。

第  $i_0$  番目の粒子の正準座標のみが基底状態（ポテンシャルエネルギーが最小となる状態）から  $\Delta q \ll 1$  だけずれた位置にあり、その他の粒子の正準座標はすべて基底状態の値である場合を考える。このときのポテンシャルエネルギーは、

$$\Delta U = \frac{J}{2} \sum_{j \neq i_0}^N \frac{U^{(2)}(0) \Delta q^2 / 2}{a^\alpha \|\mathbf{r}_{i_0} - \mathbf{r}_j\|^\alpha} \quad (1.2)$$

である。粒子数  $N$  が十分大きい場合を考えると、 $\alpha$  が短距離的なパラメータ領域の場合 ( $\alpha > d$ ) には  $\Delta U$  は漸近的には  $O(1)$  の量となるが、 $\alpha$  が長距離的なパラメータ領域の場合 ( $\alpha < d$ ) には  $\Delta U \in O(N^{d-\alpha})$  のように振舞う。従って、系が長距離的な場合には、系を構成するたった一つの粒子が少しだけ変化しただけで系の大きさに比例するエネルギーが発生してしまう。もし通常の熱力学極限操作と同様に、系のエネルギーを  $O(N)$  で増やしていくことを考えると、系が大きくなればなるほど、このような基底状態からの微小なズレさえ許されなくなってしまう。このことは、系を大きくすればするほど基底状態以外の状態は取れなくなっていく、系全体の運動は次第に落ち着いて「凍りついていってしまう」ということを表している。

## 1.3 短距離と長距離

本章の冒頭でも登場した「短距離相互作用」および「長距離相互作用」をもう少しきちんと定義しておこう。ポテンシャルエネルギーの大きさが距離に対して  $\alpha$  乗で減衰するような系を考える。

$$u(r_{i,j}) \sim \frac{1}{r_{i,j}^\alpha} \quad (1.3)$$

ここで  $r_{i,j}$  は  $i$  番目の粒子と  $j$  番目の粒子の空間的な距離をあらわす。このポテンシャルに対して一粒子あたりのポテンシャルエネルギーの大きさを見積もってみると、

$$\bar{u} := \frac{U}{N} \sim \int u(r) d^d \mathbf{r} \sim \int \frac{d^d \mathbf{r}}{r^\alpha} = \int r^{d-\alpha-1} dr \propto L^{d-\alpha} + (\text{const.}) \quad (1.4)$$

<sup>\*9</sup> 「古典格子系」については 2.1 節で詳しく述べる

<sup>\*10</sup> この仮定がみたされないモデルもある。例えば反強磁性的な古典スピンモデルではスピンの向きが互いに異なる場合に最もエネルギーが低くなるため、 $\Delta q = \pi$  が局所ポテンシャル  $U(\Delta q)$  の最小点となる。しかしながら、こういった場合でも本文と同じように基底状態近辺の振る舞いに注目すれば、同様のことがいえる

## 1.4 スケーリング則

となる\*11。ただし  $d$  は空間次元であり、 $L$  は系の典型的な長さであるとする。このとき  $d, L$  と系の体積  $V$  との間には  $V = L^d$  なる関係があることに注意する。

次に系を大きくしていく極限 ( $L \rightarrow \infty$ ) を考える。まず  $\alpha > d$  の場合には  $L^{d-\alpha} \rightarrow 0$  であるから、一粒子あたりのポテンシャルエネルギーは一定値に収束する ( $\bar{u} \rightarrow (\text{const.})$ ) だろう。一方  $\alpha \leq d$  の場合を考えると  $L^{d-\alpha} \rightarrow \infty$  であるから、この場合には一粒子あたりのポテンシャルエネルギーは発散してしまう ( $\bar{u} \rightarrow \infty$ ) ことが分かる。

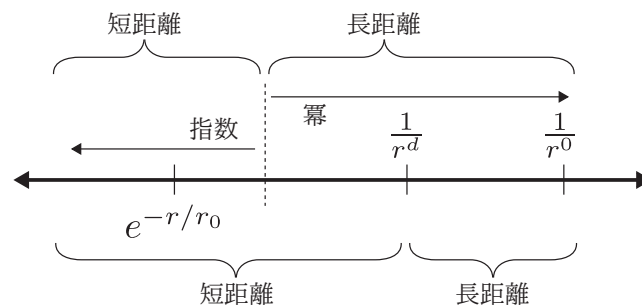
身の回りの多くの系は通常は一粒子あたりのポテンシャルエネルギー  $\bar{u}$  は系のサイズに依らずに一定値となるが、ポテンシャルが空間次元  $d$  よりも遅い冪でしか減衰しない ( $\alpha < d$ ) 場合には、一粒子あたりのポテンシャルエネルギー  $\bar{u}$  が発散してしまい、通常の熱力学や統計力学の議論をそのまま適用することができなくなってしまう。そこでこのような異常なことが起きる系のことを統計力学では長距離相互作用系と呼ぶ。一方、それ以外の通常の系は短距離相互作用系と呼ぶ。なお、何をもち「短距離」「長距離」というのかは文脈によって異なる場合があるので十分注意されたい (コラム 1.2 参照)。

## コラム 1.2 (二つの意味の「短距離」と「長距離」)

「長距離相互作用」といった場合、文脈によって二つの異なる意味をもつ。

まず第一の意味は「指数的に (もしくは、指数よりもはやく) 減衰するものを短距離、指数よりも遅く減衰するもの (主に冪減衰) を長距離」とする場合である (図の上側)。この定義は統計力学以外の分野では頻繁に用いられているようである。

一方、本文で定義したように「空間次元  $d$  よりも遅い冪  $\alpha < d$  で減衰するようなものを長距離、それよりも遅い減衰は短距離」とする場合もある (図の下側)。この定義は統計力学分野では頻繁に用いられるものであり、本論文でも特に断り書きがない限りこの意味で用いている。



例として Lennard-Jones ポテンシャルにあらわれる  $1/r^6$  という項を考えよう。前者の定義では、この項は冪的な減衰であるから「長距離ポテンシャル」ということになる。一方で後者の定義では (空間次元が  $d = 3$  なら) 空間次元よりも冪の指数  $\alpha = 6$  が大きい ( $\alpha > d$ ) ため、この項は「短距離ポテンシャル」ということになる。

この例のように文脈 (定義) によって短距離なのか長距離なのかが変わることがあるため、どちらの意味でこれらの言葉を使っているのか注意する必要がある。

## 1.4 スケーリング則

1.2 節では長距離相互作用系においては通常の意味での熱力学極限を考えるのは物理的にはあまり意味がないことをみた。それでは長距離相互作用系においても熱力学的に意味のある物理量を予言するために

\*11 この見積りはかなり大雑把であり厳密ではないが、解析的もしくは数値的な観測結果によれば殆どのモデルにおいて成り立っているようである。特に古典格子系に対しては厳密に成り立つことが知られている

はどのようにすればよいだろうか？いくつかの方法が考えられるが、ここでは一般的によく知られている (i) Tsallis のスケーリング則 および (ii) Kac の処方箋 の二つの方法を紹介する。

### 1.4.1 Tsallis のスケーリング則

短距離相互作用系では一粒子あたりのポテンシャルエネルギーが一定という振る舞い ( $U/N = (\text{const.})$ ) をみせるため、これを一定とする極限を考えればよい。ところが長距離相互作用系では 1.3 節で見積もったように  $U/N$  が系の大きさの増大に対して発散してしまうという振る舞いをみせる。そのため  $U \propto N$  としながら系の大きさを増大させることは物理的にはあまり意味のないものになってしまうのであった。そこで  $U \propto N$  とするのではなく、何らかの適切な  $N^*(N)$  を用いて  $U \propto NN^*(N)$  とすればいいのではないかという期待が生まれた [9]。その後の多くの解析的・数値的な研究によれば、この  $U \propto NN^*(N)$  というスケーリングはかなりの精度で成立していることが知られている。このスケーリングを以下では最初の提案者の名前を冠して **Tsallis** スケーリングと呼ぶことにする。この小節では Tsallis スケーリングの詳細を述べる。

1.3 節で見積もったように、長距離相互作用系では一粒子あたりのポテンシャルエネルギーは系の大きさの増大に対して

$$\frac{U}{N} \propto L^{d-\alpha} + (\text{const.}) \propto N^{1-\alpha/d} + (\text{const.}) \tag{1.5}$$

という振舞いをみせる。ただし  $N$  は系の粒子数であり、最後の変形では粒子数  $N$  と系の体積  $V = L^d$  が正比例するとした。このことからポテンシャルエネルギーは

$$U \sim NN^*U^* \tag{1.6}$$

とスケールさせればよいと期待できる。ただし  $U^*$  は粒子数  $N$  に依らない定数<sup>\*12</sup>であり、

$$N^* := N^{1-\alpha/d} \tag{1.7}$$

である。このスケーリング則が (ポテンシャルエネルギーに対する) Tsallis スケーリングである。

それでは温度  $T$  や全エネルギー  $E$  はどのようにスケールさせればよいだろうか？まず、長距離相互作用系でもカノニカル分布が実現される<sup>\*13</sup>とすれば  $K = (D/2)NT$  が成り立つことに注目する。ここで  $D$  は運動の自由度の数 (正準座標の数) である。従って全エネルギーは

$$E = K + U = \frac{D}{2}NT + NN^*U^* \tag{1.8}$$

すなわち

$$\frac{E}{NN^*} = \frac{D}{2} \frac{T}{N^*} + U^* \tag{1.9}$$

となる。従って、この式の各項が一定となるためには

$$E \sim NN^*\mathcal{E}^*, T \sim N^*\mathcal{T}^* \tag{1.10}$$

とスケールさせればよさそうである。様々な熱力学量に対しても同様の議論によってスケーリング則を求めることができる。一覧を表 1.1 に示す。

<sup>\*12</sup>  $U^*$  は  $N$  には依らないが、温度  $T$  などには依存しても構わない

<sup>\*13</sup> 長距離相互作用系でもカノニカル分布が実現されうことは、以下のように正当化できる。長距離相互作用系を短距離相互作用のみが働く、長距離相互作用系よりも非常に大きな熱浴に接触させ、十分長い間放置する。すると系全体は平衡状態が実現されていると考えられるので、熱浴に対して十分小さな長距離相互作用系では、熱浴の温度で指定されるカノニカル分布 (と等価な状態) が実現されている。なお、熱浴に接触させない場合には一般にはカノニカル分布 (と等価な状態) にはならないことが知られている (cf. アンサンブルの非等価性)



表 1.1 短距離相互作用系におけるスケーリング則と Tsallis による長距離相互作用系におけるスケーリング則

	短距離相互作用系	長距離相互作用系
エネルギー $E$	$E \sim N\mathcal{E}$	$E \sim NN^*\mathcal{E}^*$
温度 $T$	$T \sim (\text{const.})$	$T \sim N^*T^*$
体積 $V$	$V \sim N\mathcal{V}$	$V \sim N\mathcal{V}$
エントロピー $S$	$S(E, N) \sim Ns(E/N)$	$S \sim Ns^*(E/NN^*)$
自由エネルギー $F$	$F(T, N) \sim Nf(T)$	$F(T, N) \sim NN^*f^*(T/N^*)$
磁化 $M$	$M(H, N) \sim Nm(H)$	$M(H, N) \sim Nm(H/N^*)$

### 1.4.2 Kac の処方箋

こちらの手法も長距離相互作用系特有のエネルギーの増え方にそって系の大きさを増やしていこう、という発想であり、その点では Tsallis のスケーリング則と共通している。異なる点は、後からエネルギーや温度を弄るのではなく、一番最初に Hamiltonian を変更してしまい、その修正された Hamiltonian のもとで熱力学極限を考える、というところである。例えばもとの Hamiltonian を

$$H := \sum_{i=1}^N \underbrace{\frac{p_i^2}{2m}}_K + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \underbrace{\frac{1}{\|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|^\alpha}}_U \quad (1.11)$$

とすると、ポテンシャル  $U$  は先ほどの議論より  $N^* := N^{1-\alpha/d}$  として  $O(NN^*)$  の量である。一方、ポテンシャルが短距離的であればそれは  $O(N)$  の量となるはずであるから、その分ポテンシャルエネルギーを補正して

$$H^* := \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{N^*} \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{1}{\|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|^\alpha} \quad (1.12)$$

という Hamiltonian を考えよう。すると、 $N^*$  のファクターのおかげでこの Hamiltonian から求めたエントロピー  $S^*$  は通常と同様に

$$S^*(E, N) \sim Ns^*(E/NN^*) \quad (1.13)$$

という関係が成り立つことが期待でき、伝統的な熱力学や統計力学の議論がそのまま適用できるだろう。このような手法を Kac の処方箋 (Kac prescription) という [10]。

ポテンシャルが一種類しかない場合には、Tsallis のスケーリング則と Kac の処方箋が同じ結果を導くことを示そう。まず、もとの Hamiltonian  $H$  および Kac の処方箋適用後の Hamiltonian  $H^*$  から決まる状態数をそれぞれ

$$W(E, N) := \int \Theta(E - H(\Gamma)) d\Gamma \quad (1.14)$$

$$W^*(E, N) := \int \Theta(E - H^*(\Gamma)) d\Gamma \quad (1.15)$$

とおく。ここで  $\int d\Gamma$  はすべての状態に渡る積分（相空間上の積分）である\*14。また、エントロピーを状態数の対数で定義する。

\*14 量子系ならトレース（跡）をとる操作だと思えばよい

$$S(E, N) := \ln W(E, N) \quad (1.16)$$

$$S^*(E, N) := \ln W^*(E, N) \quad (1.17)$$

まず  $H^*$  から決まる状態数  $W^*(E, N)$  を計算すると、

$$W^*(E, N) = \int \Theta(E - K - U/N^*) d\Gamma \quad (1.18)$$

$$= \int \Theta(N^*E - N^*K - U) d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \quad (1.19)$$

ここで  $\mathbf{P} := \sqrt{N^*} \mathbf{p}$  という変数変換を行うと、

$$W^*(E, N) = \int \Theta(N^*E - K - U) d^N \mathbf{r} (\sqrt{N^*})^{-Nd} d^N \mathbf{P} \quad (1.20)$$

$$= (N^*)^{-Nd/2} W(N^*E, N) \quad (1.21)$$

を得る。従って、両辺の対数をとることで

$$S(N^*E, N) = S^*(E, N) + \frac{ND}{2} \ln N^* \quad (1.22)$$

$$S(E, N) = S^*(E/N^*, N) + \frac{ND}{2} \ln N^* \quad (1.23)$$

という関係が成り立つことが分かる。上で述べたように  $S^*(E, N) \sim N s^*(E/N)$  という関係が成り立つならば、最後の式は

$$S(E, N) \sim N s^*(E/NN^*) + \frac{ND}{2} \ln N^* \quad (1.24)$$

となることを示している。この式は右辺第二項の粒子数のみに依存する項を除けば<sup>\*15</sup>、Tsallis のスケーリング則のところでも述べたエントロピーの漸近系の表式と完全に一致しており、Kac の処方箋で求めたエントロピー密度と、Tsallis のスケーリング則が予想するエントロピーの漸近表式は全く同一であることが分かる。

<sup>\*15</sup> この項は粒子数のみに依存するため、通常は無視することができる。例えば温度を求める場合にはエントロピーのエネルギー微分を計算すればよいため、この項は結果に全く影響しない

## 第二章

# 動機と背景

この章では本研究の動機づけとなった「複数の冪を持った相互作用が混じりあい、クロスオーバを起こすような長距離相互作用系」について考えていく。

### 2.1 古典格子系

本題に入る前に、以降の議論でどのようなモデルを考えるのかを具体的に述べておく。

「長距離相互作用」と聞くと、重力多体系や Coulomb 多体系のように空間中を自由に動きまわることのできる粒子が、互いに  $\sim G \cdot mM/r^2$  のような長距離相互作用により引き合いながら（または反発しながら）運動をしている様子を想像するかもしれない。もちろんそのような系も長距離相互作用系ではあるのだが、現状ではそのような系の平衡状態を調べることは解析的にも数值的にも非常に難しい。そこで長距離相互作用系の議論においてはいわゆる「古典格子系」という、解析的にも数值的にも比較的簡単な<sup>\*1</sup>モデルのみに絞って議論をすることが多い。そのため、本研究においても長距離力をもつ古典格子系にのみ絞って議論を行うものとする。ここで古典格子系というのは、系を構成する粒子は格子点上（一次元鎖や二次元正方格子が多い）に固定されており、空間的には動くことができないが、かわりに粒子の内部自由度—例えばスピンの角度など—のみが時間発展する、というモデルである。長距離性はどのように入れるのかというと、通常は最近接粒子間でのみ相互作用を行うと仮定することが多いが、これをすべての粒子が互いに相互作用をするように変更すればよい。例えばすべての粒子が全く同じ大きさで相互作用をする場合には「平均場モデル」と呼ばれる長距離モデルになる。しかしながらこのようなモデルではあまり物理的ではないために、以降の議論では粒子ペアの空間的な距離  $R$  に対して  $1/R^\alpha$  のように、相互作用の強さが距離に対して冪的に減衰するようなモデルを主に取り扱う。従って Hamiltonian の一般形は、 $i$  番目の粒子の乗っている格子点の位置を表す位置ベクトルを  $\mathbf{R}_i$ （時間的に一定な定数）、粒子の内部自由度の座標（正準座標）を表す変数を  $\mathbf{q}_i(t)$ 、これと共役な運動量（正準運動量）を  $\mathbf{p}_i(t)$  とすると、

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{J}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{u(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j)}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|^\alpha} \quad (2.1)$$

のような形である。Hamiltonian の式に現れた  $\alpha$  がこのモデルが短距離なのか長距離なのかを決めるパラメータであり、格子の並んでいる空間の次元を  $d$  とすると  $\alpha \leq d$  のときに長距離となり、 $\alpha > d$  のときには短距離となる。特に  $\alpha \rightarrow \infty$  の極限を考えると、離れた粒子同士の相互作用は最近接格子との相互作用の大きさと比べると無視できるようになるため、この場合には通常と同様の隣接格子間のみ相互作用のあるモ

<sup>\*1</sup> ここで「簡単」といっているのは、重力多体系などと比較すれば簡単である、という意味であり、古典格子系にのみ絞ったからといって解析計算ができてしまうほど簡単になることは非常に少ない。実際、冪減衰を行う長距離古典系である程度厳密解を求めることのできるモデルは冪減衰型の Hamiltonian mean field (HMF) モデルや長距離 Ising モデルなど、数える程度しか存在しない

デルとみなせる。一方  $\alpha = 0$  の場合にはすべての粒子が全く同じ大きさの相互作用をもつようになるため、この場合はいわゆる「平均場モデル」を考えていることになることに注意しておく。

## 2.2 モデル

これ以降では互いに異なる二つの冪減衰を行う相互作用ポテンシャルが足しあわさったようなモデルを考え、このモデルが通常の取り扱いではどのように破綻するのかをみていく。

まずはじめに、以降で用いる変数や記号を定義しておこう。

- 粒子の個数  $N$   
系を構成する粒子（格子点）の総数を  $N$  とおく。例えば二次元格子を考えている場合には一辺の格子点数を  $L$  とおくと  $N = L^2$  である
- 格子点の座標  $\mathbf{R}_i$   
 $i$  番目の粒子が乗っている格子点の座標を  $\mathbf{R}_i$  とおく
- 空間次元  $d$   
格子点を構成している空間の次元を  $d$  とかく。例えば二次元格子を考えている場合には  $d = 2$  である
- 正準座標  $\mathbf{q}_i$   
 $i$  番目の粒子に張り付いている正準座標（力学変数）を  $\mathbf{q}_i$  とおく。例えば古典スピン系を考えているのであれば  $\mathbf{q}_i$  は  $i$  番目の粒子のスピンの角度（向き）を表している
- 運動の自由度  $D$   
各粒子に張り付いている正準変数の次元を  $D$  とおく

考えるのは前節で解説した長距離古典格子モデルであるが、これを少し変更して、相互作用の強さが距離に対して  $\alpha$  乗で減衰する項と、 $\beta$  乗で減衰する項を足し合わせた次のような Hamiltonian を考える：

$$H_N := \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + U_\alpha \left( \{ \mathbf{q}_i \}_{i=1}^N \right) + U_\beta \left( \{ \mathbf{q}_i \}_{i=1}^N \right) \quad (2.2)$$

ただし、

$$U_\alpha \left( \{ \mathbf{q}_i \}_{i=1}^N \right) := \frac{J}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{A}{\| \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j \|^{\alpha}} u(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) \quad (2.3)$$

$$U_\beta \left( \{ \mathbf{q}_i \}_{i=1}^N \right) := \frac{J}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{B}{\| \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j \|^{\beta}} u(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) \quad (2.4)$$

である。また以下では  $\alpha < \beta$  かつ  $\alpha < d$ 、すなわち  $U_\alpha$  の方が  $U_\beta$  と比較してより長距離まで働き、また  $U_\alpha$  は長距離的であるとする。 $U_\beta$  については、短距離的な場合と長距離的な場合の両方を考える。

## 2.3 スケーリング則を考える

このとき、1.4.1 節で述べた Tsallis のスケーリング則に登場した  $N^*$  がどのように与えられるかを考えてみよう。

系が十分大きな場合には、より遅く減衰する  $U_\alpha$  が支配的になるはずである。 $U_\alpha$  は  $1/r^\alpha$  という減衰の仕方をしている項であったから、 $N^* = N^{1-\alpha/d}$  と選べばよいのではないかと予想できるだろう。

ところで  $U_\alpha \gg U_\beta$  となるのは系の粒子数  $N$  がどのくらい大きくなったときであろうか？この閾値  $N_C$  を見積もってみよう。そのためにまずは  $U_\alpha, U_\beta$  の大きさを計算する。まず  $U_\alpha$  については 1.3 節で行った



ものと同様の計算を行うと

$$U_\alpha \simeq N \int_\delta^L \rho \frac{JA}{r^\alpha} d^d \mathbf{r} = \frac{\rho JA \Omega_d}{d-\alpha} (L^{d-\alpha} - \delta^{d-\alpha}) N = \frac{\rho JA \Omega_d \delta^{d-\alpha}}{d-\alpha} (N^{1-\alpha/d} - 1) N \quad (2.5)$$

$$\sim \frac{\rho JA \Omega_d \delta^{d-\alpha}}{d-\alpha} N^{2-\alpha/d} \quad (2.6)$$

と見積もれる。ここで  $\delta$  は粒子間の典型的な距離、 $\rho$  は密度の一般化 (つまり、考えているモデルに応じて質量密度や電荷密度などに対応する)、 $\Omega_d$  は  $d$  次元における立体角:

$$\Omega_1 = 2, \Omega_2 = 2\pi, \Omega_3 = 4\pi, \dots, \Omega_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \quad (2.7)$$

である。 $U_\beta$  も同様に見積もると、

$$U_\beta \sim \begin{cases} \frac{\rho JB \Omega_d \delta^{d-\beta}}{d-\beta} N^{2-\beta/d} & \beta < d \text{ (長距離的な場合)} \\ \frac{\rho JB \Omega_d \delta^{d-\beta}}{d-\beta} N & \beta > d \text{ (短距離的な場合)} \end{cases} \quad (2.8)$$

を得る。従って  $U_\alpha \gg U_\beta$  となるのは、この二つのエネルギーの大きさの見積りを見比べて

$$N \gg N_C := \begin{cases} \frac{1}{\delta^d} \left( \frac{B}{A} \right)^{d/(\beta-\alpha)} & \beta < d \text{ (}\beta \text{ が長距離的な場合)} \\ \frac{1}{\delta^{d(\beta-\alpha)/(d-\alpha)}} \left( \frac{B}{A} \right)^{d/(d-\alpha)} & \beta > d \text{ (}\beta \text{ が短距離的な場合)} \end{cases} \quad (2.9)$$

となる場合である。

この式に登場する  $B/A$  という項に注目すると、 $A$  も  $B$  もモデルを特徴付けるパラメータであるから、その比  $B/A$  はいくらでも大きな値になりうる。これはつまり  $N_C$  がいくらでも大きくなりうることを示しており、 $B/A$  が非常に大きな系では  $N_C$  が我々の興味のあるサイズより大きくなってしまふ場合があることを示している。

## 2.4 具体例

以上で  $U_\alpha \gg U_\beta$  となるような系の粒子数の下限  $N_C$  がいくらでも大きくなりうるということを見たが、実際の系ではどのくらいの大きさになるのだろうか? その具体的な大きさを Lennard-Jones ポテンシャルと重力が働いている分子に対して求めてみよう。以下の Hamiltonian を考える。

$$U(r) = -\frac{Gm^2}{r} + 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2.10)$$

Lennard-Jones ポテンシャルは希ガス原子 (分子) の van der Waals 力をよくあらわすモデルであるから、希ガス原子の一つである「ネオン」に対して  $N_C$  の値を推定していく。

今考えている Hamiltonian は  $r^{-1}, r^{-6}, r^{-12}$  という三つの冪が互いに足しあわさったものであるが、対象が十分薄ければ (低密度であれば)  $1/r^{12}$  の項は無視できると考えられる。従って先ほど求めた  $N_C$  の表式に対して  $\alpha = 1, \beta = 6, A = Gm^2, B = 4\epsilon\sigma^6$  を代入すればよく、

$$N_C = \frac{1}{\delta^{15/2}} \left( \frac{4\epsilon\sigma^6}{Gm^2} \right)^{3/2} =: N_C^{\text{neon}} \quad (2.11)$$

であると分かる。重力定数  $G$  やネオンの質量および Lennard-Jones パラメータ [11] は以下のものである。

$$G = 6.67 \times 10^{-11} \text{ m}^3\text{s}^{-2}\text{kg}^{-1} \quad (2.12)$$

$$\sigma = 0.274 \text{ nm} \quad (2.13)$$

$$\epsilon = 0.500 \times 10^{-21} \text{ J} \quad (2.14)$$

$$m = \frac{20.18}{N_A} \text{ g} \quad (2.15)$$

$$N_A = 6.02 \times 10^{23} \quad (2.16)$$

また粒子間の典型的な距離  $\delta$  は、 $0^\circ\text{C}$ ,  $101.325 \text{ kPa}$  におけるネオンの質量密度  $\rho = 900 \text{ g/m}^3$  を用いると

$$\delta = \left(\frac{m}{\rho}\right)^{1/3} = 3.34 \text{ nm} \quad (2.17)$$

と求まる。従って以上の数値を代入することで、

$$N_C^{\text{neon}} = 1.42 \times 10^{38} = 2.36 \times 10^{14} \text{ mol} \quad (2.18)$$

を得る。これは重さ換算では約 48 億トンほど、長さ換算では<sup>\*2</sup>17km ほどであり、軽い小惑星程度の大きさとなる<sup>\*3</sup>。

## 2.5 目標

以上の結果から、重力の効果も考えてネオンの性質を議論する場合には、長距離相互作用系で伝統的に用いられている  $N^* \propto N^{1-\alpha/d}$  というスケーリングをそのまま適用すると、 $N_C$  よりも巨大な系に対しては正しい結果を得ることができるが、逆にこれよりも小さな系の議論を行う場合には何らかの修正を行わなければならない。それでは、どのように修正を行えばよいだろうか？まず、系の大きさが  $N_C$  よりも非常に小さな場合にはいささか自明である。日常レベルの大きさでは重力の効果は Lennard-Jones ポテンシャル (分子間力) に比べて何桁も小さく、重力の効果を見捨ててしまえばよいだろう。Lennard-Jones ポテンシャルは短距離的であるから、重力を見捨てる近似のもとではこの系は短距離相互作用系であり、 $E \propto N$  という通常のスケーリングが成り立つはずである。従ってこの場合には  $N^* = 1$  とすればよい。

それではこれらの間の領域、つまり重力の効果と Lennard-Jones ポテンシャルの効果と同程度で効いており、これら二つの効果がクロスオーバーしているような場合にはどのようなスケーリングが成り立つだろうか？  $N^* = 1$  と  $N^* = N^{1-\alpha/d}$  の間をうまくつなぐような適切な  $N^*$  を採用すればよさそうだと考えられるが、具体的にはどのような  $N^*$  を取ってくればよいかは自明ではない。

上でみた具体例から分かる通り、重力相互作用のような非常に弱い長距離相互作用が働く系では、系のサイズがかなり大きくなると長距離相互作用による寄与が支配的にならず、我々の知りたい大きさの系では短距離的な効果と長距離的な効果が互いにクロスオーバーしてしまう、ということが起きる場合がある。系の大きさが非常に大きく、長距離的な寄与が支配的な場合にはスケーリングファクタとして  $N^* = N^{1-\alpha/d}$  を採用し、逆に系の大きさがあまり小さくなく、短距離的な寄与が支配的な場合には通常のスケーリングに対応する  $N^* = 1$  を採用すればよかったが、この二つの中間領域ではどのようなスケーリング則が成り立つだろうか？

<sup>\*2</sup> 立方体の容器に詰めた場合の概算値

<sup>\*3</sup> ただし、ここではかなり単純な見積りを行っているため、さほど正確な値ではないことを注意しておく

この疑問に答えるため、簡単な長距離古典格子モデルを数値的にシミュレーションすることで、エネルギーや温度の間の関係を求め、短距離的な効果と長距離的な効果が互いにクロスオーバーするような領域において成り立つスケーリング則を解き明かすことを最終目標として研究を行った。



## 第三章

# モデルと手法

この章では研究に用いたモデル Hamiltonian や具体的な計算手法について解説を行う。

### 3.1 モデル

本研究では二つの異なるモデルを採用し、それぞれに対して数値シミュレーションを行った。どちらのモデルも前章と同様に古典格子系であり、Hamiltonian はそれぞれ以下のように与えられる。

$$H_{\text{sd-cosh}} := \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \sum_{i=1}^N \frac{q_i^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \left( \frac{0.01}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|^{0.5}} + \frac{1}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|^3} \right) [\cosh(q_i - q_j) - 1] \quad (3.1)$$

$$H_{\text{sd-HMF}} := \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \left( \frac{0.01}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|^1} + \frac{1}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|^3} \right) [1 - \cos(q_i - q_j)] \quad (3.2)$$

ただし、後に行う数値的な解析と直接結び付けられるように、適宜無次元化を行っている\*1。前者は正準座標  $q_i$  が互いに cosh 型の相互作用を行いながら  $-\infty < q_i < \infty$  の範囲を動き回るようなモデルである。一方、後者の正準座標は  $-\pi < q_i < \pi$  の範囲を動く古典スピンモデルであり、平均場 Hamiltonian モデル (HMF モデル) を冪減衰型に修正したものとなっている。

なお、格子は二次元 ( $d = 2$ ) の正方格子状とした。また境界条件については、(i) 自由境界とする方法と、(ii) 周期境界として  $\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|$  をトーラス上の最短の距離とする方法の二通りが考えられるが、今回の計算では両者のモデルとも自由境界であるとして計算を行った。格子の並ぶ実空間の次元は 2 だが、運動の自由度を問わず正準座標の次元は 1 であるので、両者の次元を混同しないよう注意されたい。

以降では、前者のモデルを「sd-cosh モデル」、後者のモデルを「sd-HMF モデル」と呼称することとする。ここで“sd”は“slowly decaying”すなわち空間的な減衰が冪的であり遅く減衰することをあらわしている。

#### 3.1.1 $N_C$ について

次の節に移る前に、2.3 節で詳しい議論を行ったクロスオーバの起こる典型的な系の大きさ  $N_C$  が、これら二つのモデルで具体的にどの程度になるのかをみてみよう。

今回のモデルでは、(2.9) 式の各種パラメータは  $d = 2, \delta = 1, A = 0.01, B = 1$  であるから、これらの値を代入することで  $N_C$  の値はそれぞれ

\*1 例えば質量は  $m = 1$ 、格子間隔は  $\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_{i+1}\| = 1$  などとしている

$$\begin{aligned} N_C^{\text{sd-cosh}} &\simeq 464.2 \\ &\simeq 21.5 \times 21.5 \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} N_C^{\text{sd-HMF}} &\simeq 10000 \\ &\simeq 100 \times 100 \end{aligned} \quad (3.4)$$

であると分かる。

現実的な時間内で計算を行うことができる系の大きさは最大で  $128 \times 128$  程度であるため、モデルの式にあらわれる  $0.01$  という係数は  $N_C$  が  $128 \times 128$  と同程度となるように選んでいる。

## 3.2 熱浴

上で与えた Hamiltonian をそれぞれ数値的に解いていき、エネルギーなどを計算すればよいのだが、これでは①系を孤立させてただ待つだけではなかなか平衡緩和しない、②数値シミュレーションだけでは系の温度をどうやって計算すれば良いのかが分からない、といった問題が発生する。そこで本研究のシミュレーションでは系に対して熱浴を接触させることでこれらの問題を回避した。

熱浴のモデルとしては、指定した温度  $T$  の Maxwell 分布で与えられる速度をもった (系の粒子とは異なる) 粒子 (「熱浴粒子」と呼ぶ) を、系の粒子に衝突させる、というものを採用した。

より具体的には、各計算ステップにおいて系の粒子の速度  $v_i$  を

$$v_i \rightarrow \frac{m - M}{m + M} v_i + \frac{2M}{m + M} V_i \quad (3.5)$$

のように変更すればよい。ただし  $m, M$  はそれぞれ系および熱浴粒子の質量、 $V_i$  は  $i$  番目の格子に衝突する熱浴粒子のもつ速度であり、その確率分布は逆温度  $\beta$  で指定される Maxwell 分布

$$\text{Pr}(V_i = V) dV = \sqrt{\frac{M\beta}{2\pi}} \exp\left(-\beta \cdot \frac{1}{2} M V^2\right) dV \quad (3.6)$$

で与えられる。

実際の計算では系の質量は  $m = 1$  であり、熱浴粒子の質量は  $M = 0.1$  とした。

また、時刻がおおよそ  $t = 10^4$  までは全ての粒子と接触させ、それ以降は二次元正方格子上一辺にのみ接触させる、ということを行った。なぜこのような方法を行ったのかというと、系が平衡状態に近づくためにはなるべく熱浴との相互作用を大きくする方が都合が良いため、初期の頃はすべての粒子に対して熱浴を接触させている。しかしながらすべての粒子に対して接触しているのでは系と熱浴の間の相互作用が大きくなってしまい、真の平衡状態とはかけ離れた状態になってしまうため、最終的には系の表面—今回用いたモデルは二次元なので一辺—にのみ接触させるようにした。

### 3.2.1 熱浴の妥当性

次にこの熱浴が「うまく動作すること」すなわち、系の速度分布が熱浴の逆温度  $\beta$  で指定される Maxwell 分布になることをみよう。話を簡単にするために系の相互作用は無視できるものとする\*2。

\*2 以下の議論によれば、相互作用がある場合でも系の速度分布の安定点は、やはり熱浴の逆温度  $\beta$  で指定される Maxwell 分布であることが分かるため、相互作用がないという仮定は、実はそれほど大きな仮定ではない

第  $n$  ステップで系の速度が  $v_i^{n*3}$  であったときに、第  $n+1$  ステップで系の速度が  $v_i^{n+1}$  になる確率は

$$\Pr(v_i^n \rightarrow v_i^{n+1}) dv_i^{n+1} = \sqrt{\frac{M\beta}{2\pi}} \exp\left(-\beta \cdot \frac{1}{2} MV(v_i^n, v_i^{n+1})^2\right) dV \quad (3.7)$$

ただし

$$v_i^{n+1} = \frac{m-M}{m+M} v_i^n + \frac{2M}{m+M} V(v_i^n, v_i^{n+1}) \quad (3.8)$$

である。従って、第  $n$  ステップでの系の速度の確率分布を  $f_i^n(v)$  とおくと、

$$f_i^{n+1}(v) = \int_{-\infty}^{\infty} f_i^n(v') \Pr(v' \rightarrow v) dv' \quad (3.9)$$

$$= \sqrt{\frac{M\beta}{2\pi}} \frac{m+M}{2M} \int_{-\infty}^{\infty} f_i^n(v') \exp\left[-\beta \frac{1}{2} M \left(\frac{m+M}{2M}\right)^2 \left(v - \frac{m-M}{m+M} v'\right)^2\right] dv' \quad (3.10)$$

$$(3.11)$$

という漸化式を得る。次に速度分布の Fourier 変換を考えよう。

$$\tilde{f}_i^n(\kappa) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\kappa v} f_i^n(v) dv \quad (3.12)$$

$$f_i^n(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\kappa v} \tilde{f}_i^n(\kappa) d\kappa \quad (3.13)$$

すると漸化式は、

$$\tilde{f}_i^{n+1}(\kappa) = \frac{m+M}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dv \int_{-\infty}^{\infty} dv' \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa' \left\{ e^{-i\kappa v + i\kappa' v'} \tilde{f}_i^n(\kappa') \exp\left[-\beta \frac{1}{2} M \left(\frac{m+M}{2M}\right)^2 \left(v - \frac{m-M}{m+M} v'\right)^2\right] \right\} \quad (3.14)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dv' \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa' e^{i\kappa' v'} \tilde{f}_i^n(\kappa') \exp\left[-\frac{2M\kappa^2}{\beta(m+M)^2} - i\kappa \frac{m-M}{m+M} v'\right] \quad (3.15)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa' \delta\left(\kappa' - \frac{m-M}{m+M} \kappa\right) \tilde{f}_i^n(\kappa') \exp\left[-\frac{2M\kappa^2}{\beta(m+M)^2}\right] \quad (3.16)$$

$$= \tilde{f}_i^n\left(\frac{m-M}{m+M} \kappa\right) \exp\left[-\frac{2M\kappa^2}{\beta(m+M)^2}\right] \quad (3.17)$$

となる。この漸化式は簡単に解くことができ、

$$\tilde{f}_i^n(\kappa) = \tilde{f}_i^0\left(\left(\frac{m-M}{m+M}\right)^n \kappa\right) \exp\left[-\sum_{l=1}^n \frac{2M}{\beta(m+M)^2} \left(\frac{m-M}{m+M}\right)^{2l-2} \kappa^2\right] \quad (3.18)$$

$$= \tilde{f}_i^0\left(\left(\frac{m-M}{m+M}\right)^n \kappa\right) \exp\left[-\frac{1}{2\beta m} \left(1 - \left(\frac{m-M}{m+M}\right)^{2n}\right) \kappa^2\right] \quad (3.19)$$

となる。従って、計算ステップ数  $n$  が十分大きい極限においては

$$\tilde{f}_i^\infty(\kappa) = \tilde{f}_i^0(0) \exp\left[-\frac{\kappa^2}{2\beta m}\right] \quad (3.20)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{\kappa^2}{2\beta m}\right] \quad (3.21)$$

\*3 以下では格子点の添字を下付きで、時間の添字 (ステップ数) を上付きであらわす

となるから、逆 Fourier 変換をしてもとの速度分布函数に戻すと、

$$f_i^\infty(v) = \sqrt{\frac{\beta m}{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\beta m v^2\right] \quad (3.22)$$

となることが分かる。これは明らかに逆温度  $\beta$  で指定される Maxwell 分布の式である。

### 3.3 数値積分法

多くの数値積分法\*4は孤立系の計算を行うと、保存量 (第一積分) であるはずの系のエネルギーが、数値誤差のために指数的に発散もしくは減衰していつてしまう、という性質をもつ。例えば最も簡単な一次の Euler 法:

$$\mathbf{q}^{n+1} = \mathbf{q}^n + \mathbf{p}^n \Delta t \quad (3.23)$$

$$\mathbf{p}^{n+1} = \mathbf{p}^n - \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}^n) \Delta t \quad (3.24)$$

に対して、調和振動子型のポテンシャル

$$V(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{q}^2}{2} \quad (3.25)$$

を考えると、第  $n+1$  ステップ目と、第  $n$  ステップ目のエネルギーの差は、

$$H(\mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{p}^{n+1}) - H(\mathbf{q}^n, \mathbf{p}^n) = \frac{1}{2} \left( \mathbf{p}^n - \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}^n) \right)^2 \quad (3.26)$$

$$= \frac{1}{2} (\mathbf{q}^2 + \mathbf{p}^2) \Delta t^2 > 0 \quad (3.27)$$

であるから、この場合には系のエネルギーは指数的に増大していつてしまうことが分かる。

従って、このような数値積分法を用いた場合には時間刻み幅  $\Delta t$  を十分小さくすることで、計算している時間の範囲内においてはエネルギーがあまり変化しないようにしなければならない。ところが、今回の目的では系が熱緩和するほど十分長い間時間発展をさせるということをしたいため、時間刻み幅をかなり小さくとらなくてはならず、計算時間が膨大となってしまう。とりわけ長距離相互作用系では系の全ての粒子ペアに対して力を計算しなければならないため、なるべく少ないステップ数で計算できるようにしなければならない。

そこで、本研究では系のエネルギーをほぼ一定に保つという著しい性質をもつ数値積分法である シンプレクティック積分を用いた。シンプレクティック積分というのは、その名の通りシンプレクティック性\*5

$$d\mathbf{q}^n \wedge d\mathbf{p}^n = d\mathbf{q}^{n+1} \wedge d\mathbf{p}^{n+1} \quad (3.31)$$

\*4 分子動力学計算では Gear の予測子・修正子法や Störmer-Verlet 法などがよく用いられる。これらの数値積分を孤立系の計算に用いると、系のエネルギーは指数的に減衰していつてしまう。従って、エネルギーが減衰する典型的な時間スケールが十分小さくなるように数値積分のパラメータを調整する (時間刻み幅を十分小さくする) 必要がある。ただし、熱浴や外場・散逸などによる強いエネルギー流入があるような場合には、エネルギーが減衰していつてしまうことが余り問題にならないこともある

\*5 シンプレクティック性の定義にはいくつか異なる形がある。例えば、一ステップの時間発展を表す写像  $\Psi(\mathbf{q}^n, \mathbf{p}^n) = (\mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{p}^{n+1})$  の Jacobi 行列を

$$\partial \Psi := \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{q}^{n+1}}{\partial \mathbf{q}^n} & \frac{\partial \mathbf{q}^{n+1}}{\partial \mathbf{p}^n} \\ \frac{\partial \mathbf{p}^{n+1}}{\partial \mathbf{q}^n} & \frac{\partial \mathbf{p}^{n+1}}{\partial \mathbf{p}^n} \end{bmatrix} \quad (3.28)$$

と書き、またシンプレクティック行列の 正準構造行列 (canonical structure matrix) を

$$J := \begin{bmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{bmatrix} \quad (3.29)$$



を保つ積分方法の総称である [12]。ここで「 $\wedge$ 」はウェッジ積と呼ばれるベクトル間の二項演算であり、次の性質を満たす。

- 交代則 (skew-symmetry) :

$$d\mathbf{a} \wedge d\mathbf{b} = -d\mathbf{b} \wedge d\mathbf{a} \quad (3.32)$$

- 双線形性 (bilinearity) : 任意の  $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$  に対し

$$(\alpha d\mathbf{a} + \beta d\mathbf{b}) \wedge d\mathbf{c} = \alpha d\mathbf{a} \wedge d\mathbf{c} + \beta d\mathbf{b} \wedge d\mathbf{c} \quad (3.33)$$

シンプレクティック積分で得られた解軌道はもとの Hamiltonian に非常に近い別の Hamiltonian  $H_{\Delta t} = H + O(\Delta t)$  の軌道となっていることが知られている。 $H_{\Delta t}$  のことを影の Hamiltonian (shadow Hamiltonian) という。このことから、エネルギーの誤差は任意の時刻において高々  $O(\Delta t)$  になることが保証されることがわかる。

シンプレクティック積分の一つの例として、カエルとび法 (leapfrog method) または 速度 Verlet 法 (velocity Verlet method) と呼ばれる次の数値積分を考えよう [13]。

$$\mathbf{q}^{n+1} = \mathbf{q}^n + \mathbf{p}^n \Delta t - \frac{1}{2} \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}^n) \Delta t^2 \quad (3.34)$$

$$\mathbf{p}^{n+1} = \mathbf{p}^n - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}^n) + \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}^{n+1}) \right) \Delta t \quad (3.35)$$

この積分法がシンプレクティック積分であることは簡単に確かめることができる。

$$d\mathbf{q}^{n+1} \wedge d\mathbf{p}^{n+1} = \left[ d\mathbf{q}^n + \Delta t d\mathbf{p}^n - \frac{1}{2} \partial_{\mathbf{q}}^2 V \Delta t^2 d\mathbf{q}^n \right] \wedge \left[ d\mathbf{p}^n - \frac{1}{2} \partial_{\mathbf{q}}^2 V \Delta t d\mathbf{q}^n - \frac{1}{2} \partial_{\mathbf{q}}^2 V \Delta t \left( d\mathbf{q}^n + \Delta t d\mathbf{p}^n - \frac{1}{2} \partial_{\mathbf{q}}^2 V \Delta t^2 d\mathbf{q}^n \right) \right] \quad (3.36)$$

$$= d\mathbf{q}^n \wedge d\mathbf{p}^n \quad (3.37)$$

一般的にシンプレクティック積分の影の Hamiltonian を解析的に求めるのは非常に困難である\*6が、ポテンシャルが調和振動子型のカエルとび法の影の Hamiltonian に関しては求められている [14] :

$$H_{\Delta t} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m(\Delta t)} + \frac{\mathbf{q}^2}{2} \quad (3.38)$$

ただし

$$m(\Delta t) := 1 - \left( \frac{\Delta t}{2} \right)^2 \quad (3.39)$$

実際に計算してみることで、この式が影の Hamiltonian となっていることは容易に確かめることができる。

と書くと、写像  $\Psi$  がシンプレクティック性をもつというのは、

$$(\partial\Psi)^T J (\partial\Psi) = J \quad (3.30)$$

を満たすことである、としている文献も多い

\*6 影の Hamiltonian を  $H_{\Delta t}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = H + H_1 \Delta t + H_2 \Delta t^2 + \dots$  と Taylor 展開し、 $H_{\Delta t}(\mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{p}^{n+1}; \Delta t) = H_{\Delta t}(\mathbf{q}^n, \mathbf{p}^n; \Delta t)$  となるように Taylor 展開の各次数  $H_1, H_2, \dots$  を順番に決定すれば、原理的には求めることができる。しかしながら、これよりも洗練された統一的な計算方法は殆ど知られていない

$$H_{\Delta t}(\mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{p}^{n+1}) = \frac{(\mathbf{p}^n - \mathbf{q}^n \Delta t/2 - ((1 - \Delta t^2/2)\mathbf{q}^n + \mathbf{p}^n \Delta t)\Delta t/2)^2}{2(1 - (\Delta t/2)^2)} + \frac{(\mathbf{q}^n + \mathbf{p}^n \Delta t - \mathbf{q}^n \Delta t^2/2)^2}{2} \quad (3.40)$$

$$= \frac{((\Delta t^3/4 - \Delta t)\mathbf{q}^n + (1 - \Delta t^2/2)\mathbf{p}^n)^2}{2(1 - (\Delta t/2)^2)} + \frac{((1 - \Delta t^2/2)\mathbf{q}^n + \mathbf{p}^n \Delta t)^2}{2} \quad (3.41)$$

$$= \frac{(\mathbf{p}^n)^2}{2(1 - (\Delta t/2)^2)} + \frac{(\mathbf{q}^n)^2}{2} \quad (3.42)$$

従って、カエルとび法で調和振動子を数値的に解くことは、(3.38) 式で与えられる、もとの Hamiltonian から質量が  $1 - (\Delta t/2)^2$  だけずれた別の Hamiltonian を厳密に\*7解いていることになっている。従ってこの場合には影の Hamiltonian  $H_{\Delta t}$  の値は常に一定値をとることが分かり、影の Hamiltonian とほぼ等しい、もとの Hamiltonian も、ほぼ一定値をとることが分かる。

今回の研究で用いた積分法は、シンプレクティック積分のうち最も簡単な一次のシンプレクティック Euler 法である。

$$\mathbf{q}^{n+1} = \mathbf{q}^n + \mathbf{p}^{n+1} \Delta t \quad (3.43)$$

$$\mathbf{p}^{n+1} = \mathbf{p}^n - \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}) \Delta t \quad (3.44)$$

実際の計算では  $\Delta t = 0.01$  とし、 $10^7$  ステップほど計算を行った。

\*7 もちろん実際の計算では、計算途中で丸め誤差や打ち切り誤差などは発生するが、その誤差は通常、微分方程式を差分化したことにより発生する誤差に比べて非常に小さく、実用的には無視できるため、(精度保証付き計算などの分野以外では) 普通はそのような数値誤差は考えない。ここで「厳密」といっているのは、カエルとび法によって差分化した方程式 (漸化式) の解が、影の Hamiltonian (3.38) 式で与えられる正準方程式 (微分方程式) の解と解析的に一致する、ということを行っている

## 第四章

# 研究結果

この章では前章で説明したモデルと計算手法によって得られた結果と、それに関する考察を述べる。

### 4.1 平衡緩和

我々が知りたいのは、平衡状態の性質であるから、系が正しく平衡緩和しているかどうかを調べる必要がある。そこでマクロ量の時間的な変化や速度分布が Maxwell 分布になるかどうかを確かめた。

まず、マクロ量の時間発展をみたのが図 4.1 である。この時間スケールにおいてはどのマクロ物理量も時間的にほぼ一定値をとっており、正しく熱緩和していることが分かる。時刻がおよそ  $t = 10^4$  までは系の全ての粒子に対して熱浴を接触させているため、全エネルギーは比較的激しく振動しており、それ以降は二次元正方格子上一辺の粒子にのみ熱浴を接触させたため、全エネルギーの振動は比較的落ち着いている。

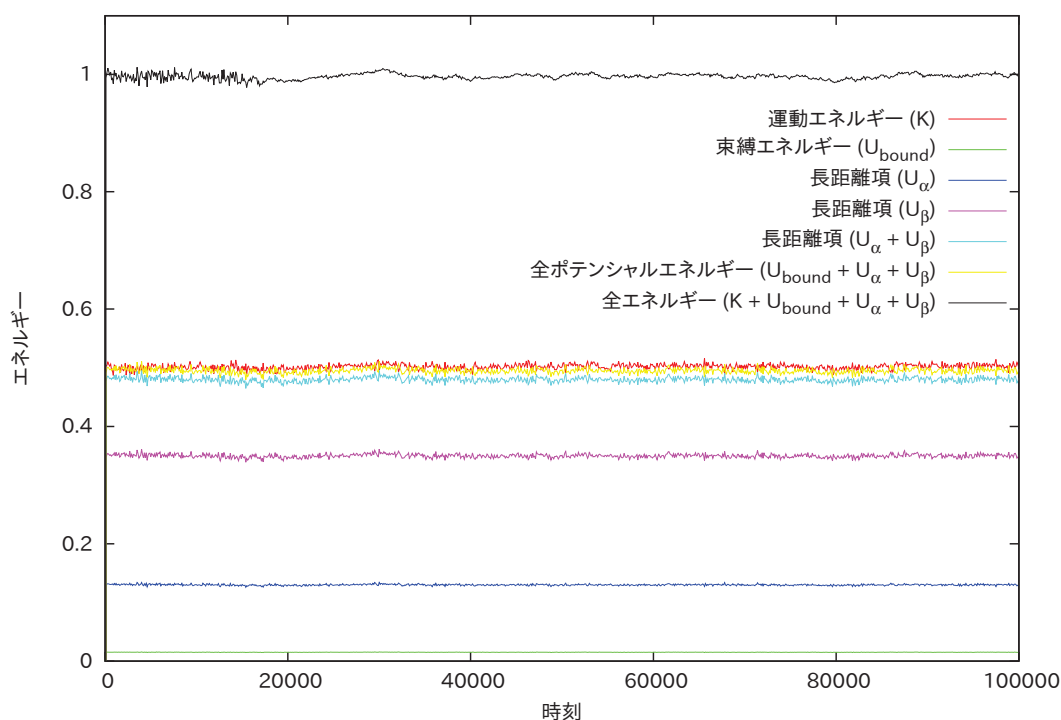


図 4.1 sd-cosh モデルの様々なマクロ物理量の時間発展の様子。系の大きさは  $128 \times 128$ 、温度は  $T = 1$ 。どのマクロ物理量も時間的にほぼ一定値に落ち着いていることが分かる。なお、全エネルギーが一定となっていないのは、熱浴からのエネルギー流出入があるためである

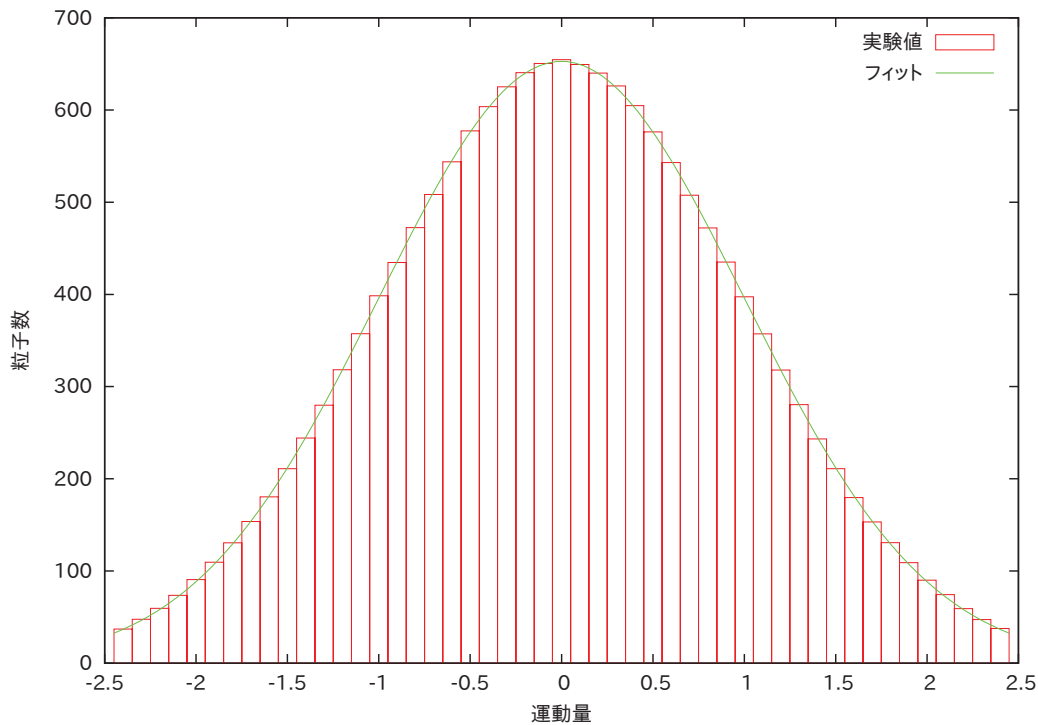


図 4.2 sd-cosh モデルの  $t = 10^5$  での速度分布。系の大きさは  $128 \times 128$ 、熱浴の温度は  $T = 1$ 。緑色の曲線は Maxwell 分布  $f(v) \propto \exp(-v^2/2T)$  でフィットしたものであり、フィッティングパラメータは  $T = 1.00017 \pm 0.00158$  である。熱浴の温度で与えられる Maxwell 分布に非常に近い速度分布となっていることが分かる

次に、シミュレーション時間の一番最後での運動量分布をプロットしたものが図 4.2 である。赤い箱で示したものが数値計算による結果であり、これを Maxwell 分布

$$f(v) = a \exp\left(-\frac{p^2}{2T}\right) \tag{4.1}$$

でフィッティングしたものが緑色の曲線である。ただし、フィッティングは gnuplot を用いており\*1、フィッティングパラメータは

$$a = 652.809 \pm 0.4388 \tag{4.2}$$

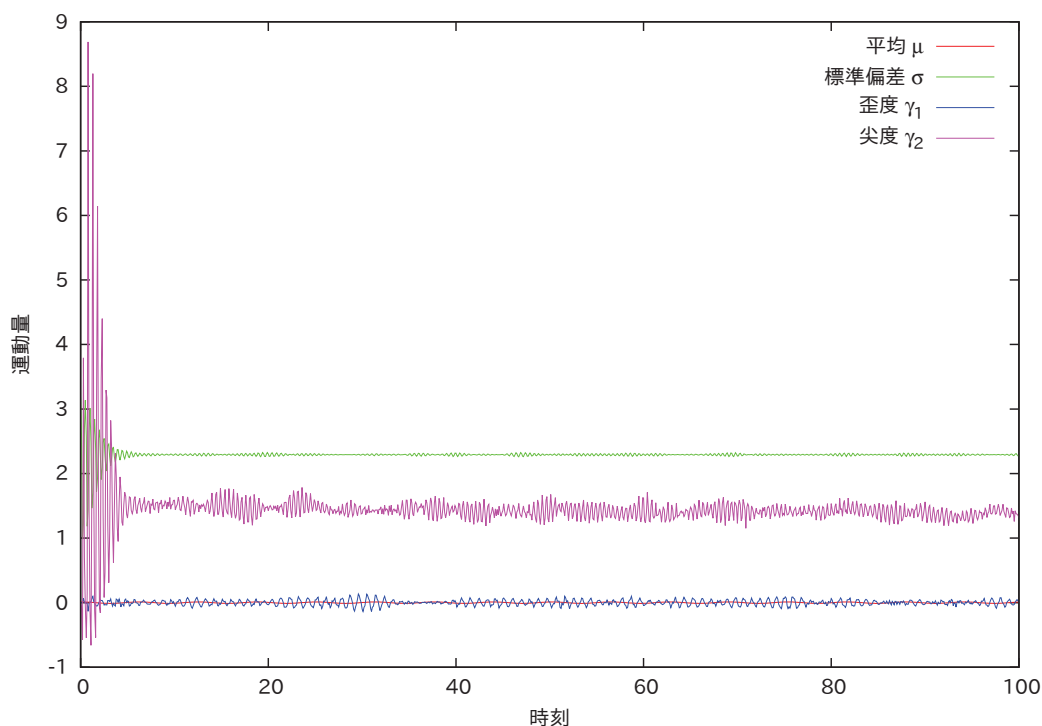
$$T = 1.00017 \pm 0.00158 \tag{4.3}$$

であった。このことから、熱浴の温度  $T = 1$  で与えられる Maxwell 分布に非常に近い速度分布になっているため、確かに系は平衡緩和していることが分かる。

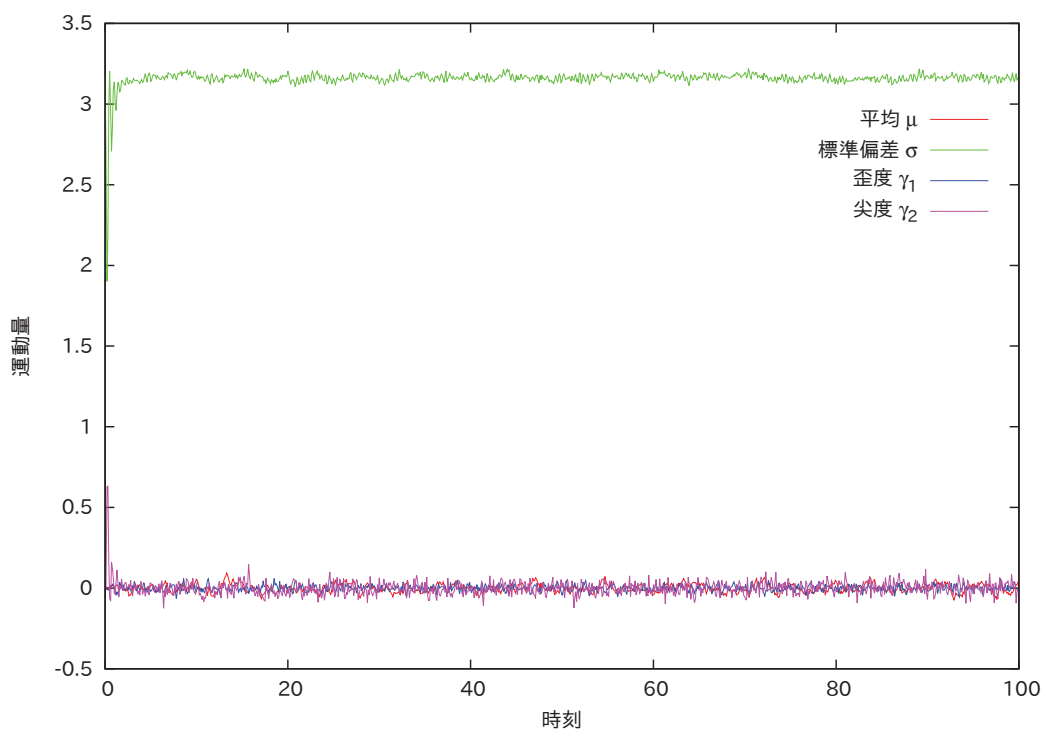
## 4.2 緩和時間

シミュレーション開始時の様子を図 4.3 に示す。ここで平均  $\mu$ 、標準偏差  $\sigma$ 、歪度  $\gamma_1$ 、尖度  $\gamma_2$  は

\*1 gnuplot は Levenberg-Marquardt アルゴリズム [15, 16] を用いた最小二乗法でフィッティングを行っている [17]



(a) 熱浴がない場合



(b) 熱浴がある場合

図 4.3 sd-cosh モデルの熱浴がない場合 (上段) と熱浴がある場合 (下段) での、運動量分布の平均  $\mu$  (赤)、標準偏差  $\sigma$  (緑)、歪度  $\gamma_1$  (青) および尖度  $\gamma_2$  (紫)。系の大きさは  $128 \times 128$ 、熱浴の温度は  $T = 10$  とした。また熱浴がない場合には初期の運動エネルギーが  $K = (1/2)NT$  となるように初期条件を与えている。Maxwell 分布においては平均  $\mu$ 、歪度  $\gamma_1$ 、尖度  $\gamma_2$  は全て 0 となる。熱浴がある場合にはこれらの量はすぐさま 0 になっているが、熱浴がない場合には尖度  $\gamma_2$  は 0 ではない値をとっていることが分かる

$$\mu := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p_i \tag{4.4}$$

$$\sigma := \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (p_i - \mu)^2} \tag{4.5}$$

$$\gamma_1 := \frac{N^{-1} \sum_{i=1}^N (p_i - \mu)^3}{\sigma^3} \tag{4.6}$$

$$\gamma_2 := \frac{N^{-1} \sum_{i=1}^N (p_i - \mu)^4}{\sigma^4} - 3 \tag{4.7}$$

で与えられる量である\*2。Maxwell 分布ではこれらの値は

$$\mu = \gamma_1 = \gamma_2 = 0 \tag{4.9}$$

$$\sigma = \sqrt{T} \tag{4.10}$$

となる。グラフにおいて熱浴がある場合 (下段) には平均、歪度および尖度はすぐさま 0 に近い値になっており、また標準偏差も  $\sqrt{T} = \sqrt{10} \simeq 3.16$  に近い値になっていることが分かる。従って、熱浴がある場合には、系全体が非常に素早く平衡状態に緩和してくれていることが分かる。ところが熱浴がない場合 (上段) をみてみると、平均や歪度はすぐに 0 に近い値になっているが、グラフの範囲内の時間では尖度  $\gamma_2$  は 1.5 付近の値にとどまっており、 $t = 100$  程度では平衡化はしていないことが分かる。

### 4.3 スケーリング

以下では計算によって求められたエネルギーと温度の関係に対して、様々なスケーリング則を適用し、それらを吟味しながら比較してみよう。

まず、モデル Hamiltonian の相互作用ポテンシャル部分を思い出すと、

$$U := \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \left( \frac{0.01}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|^\alpha} + \frac{1}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|^3} \right) \begin{cases} [\cosh(q_i - q_j) - 1] & \text{sd-cosh} \\ [1 - \cos(q_i - q_j)] & \text{sd-HMF} \end{cases} \tag{4.11}$$

という形であった。

そうすると、考えられるスケーリング則としては以下の三通りがあるだろう。

#### ケース A (漸近形を用いた場合)

ポテンシャルに含まれる長距離項は総和の第一項の

$$\frac{0.01}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|^\alpha} \tag{4.12}$$

である。系が十分大きければ長距離的な項が支配的になるため、この項の冪の大きさのみでスケーリングは決まるはずであるから、全系のエネルギー  $E$  と温度  $T$  との関係は

$$E(N, T) \simeq NN_{\text{asym}}^* \mathcal{E}_{\text{asym}}^* \left( \frac{T}{N_{\text{asym}}^*} \right) \quad \text{ただし } N_{\text{asym}}^* := N^{1-\alpha/d} \tag{4.13}$$

というスケーリング則をもつ。

\*2 尖度を

$$\beta_2 := \frac{N^{-1} \sum_{i=1}^N (p_i - \mu)^4}{\sigma^4} \tag{4.8}$$

とする定義も存在するが、本論文では  $\gamma_2 = \beta_2 - 3$  を尖度としていることに注意されたい。 $\gamma_2$  を用いると、Gauß分布の尖度が 0 となり都合が良いため、 $\gamma_2$  の方を用いる定義を採用した。(  $\beta_2$  を尖度として用いると、Gauß分布の尖度は  $\beta_2 = 3$  である )

## ケース B (個別にみた場合)

ポテンシャルの総和部分を第一項と第二項に分解し、それぞれを

$$U_{l.r.} := \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{0.01}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|^\alpha} \begin{cases} [\cosh(q_i - q_j) - 1] & \text{sd-cosh} \\ [1 - \cos(q_i - q_j)] & \text{sd-HMF} \end{cases} \quad (4.14)$$

$$U_{s.r.} := \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{1}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|^3} \begin{cases} [\cosh(q_i - q_j) - 1] & \text{sd-cosh} \\ [1 - \cos(q_i - q_j)] & \text{sd-HMF} \end{cases} \quad (4.15)$$

と書くことにする。まず、 $U_{s.r.}$  は冪が 3 乗であり、空間次元  $d = 2$  よりも大きな冪であるので、この  $U_{s.r.}$  という項は短距離的な項である。従って  $U_{s.r.}$  のみに注目すれば

$$U_{s.r.}(N, T) = N U_{s.r.}(T) \quad (4.16)$$

というスケーリングを持つ。

次に  $U_{l.r.}$  に注目すると、この項は空間次元  $d = 2$  よりも小さな冪を持つ長距離的な項であるから、 $U_{l.r.}$  は

$$U_{l.r.}(N, T) = N N_{\text{indv}}^* \mathcal{U}_{l.r.} \left( \frac{T}{N_{\text{indv}}^*} \right) \quad \text{ただし } N_{\text{indv}}^* := N^{1-\alpha/d} \quad (4.17)$$

というスケーリングを持つ。

## ケース C (総和を用いた場合)

ポテンシャルには短距離的な項と、長距離的な項の両者が含まれている。系の大きさが非常に大きな場合 (小惑星ほどの大きさの場合) には長距離的な項のみが支配的になるため、短距離的な項は無視してしまってもスケーリングを考えれば良いかもしれないが、日常レベルの大きさでは短距離的な効果も比較的大きく、無視することはできないだろう。そこで長距離的な効果と、短距離的な効果の両者を取り入れて、

$$N_{\text{sum}}^* := \frac{1}{N} \sum_{i \neq j=1}^N \left( \frac{0.01}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|^\alpha} + \frac{1}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|^3} \right) \simeq 0.01 C(\alpha) N^{1-\alpha/d} + C(3), \quad (4.18)$$

$$C(m) := \begin{cases} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\|\mathbf{R}_i\|^m} & m > d \\ \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N N^{1-m/d}} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\|\mathbf{R}_i\|^m} & m < d \end{cases} \quad (4.19)$$

という量を考え、これを用いて

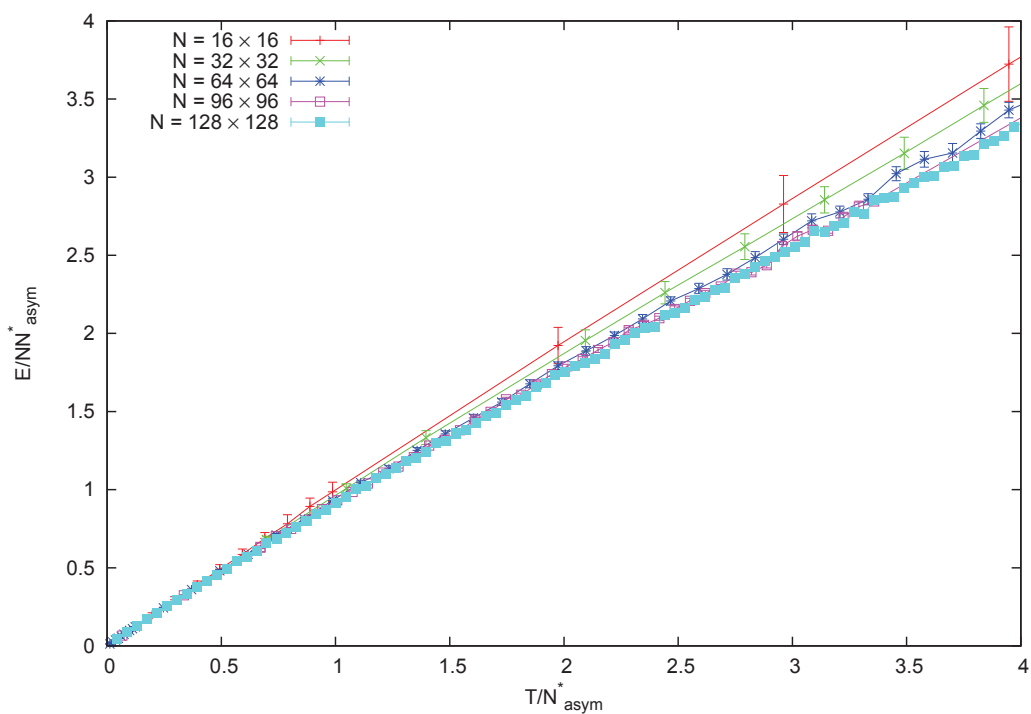
$$U(N, T) \simeq N N_{\text{sum}}^* \mathcal{U}_{\text{sum}}^* \left( \frac{T}{N_{\text{sum}}^*} \right) \quad (4.20)$$

というスケーリングを考えればよい。

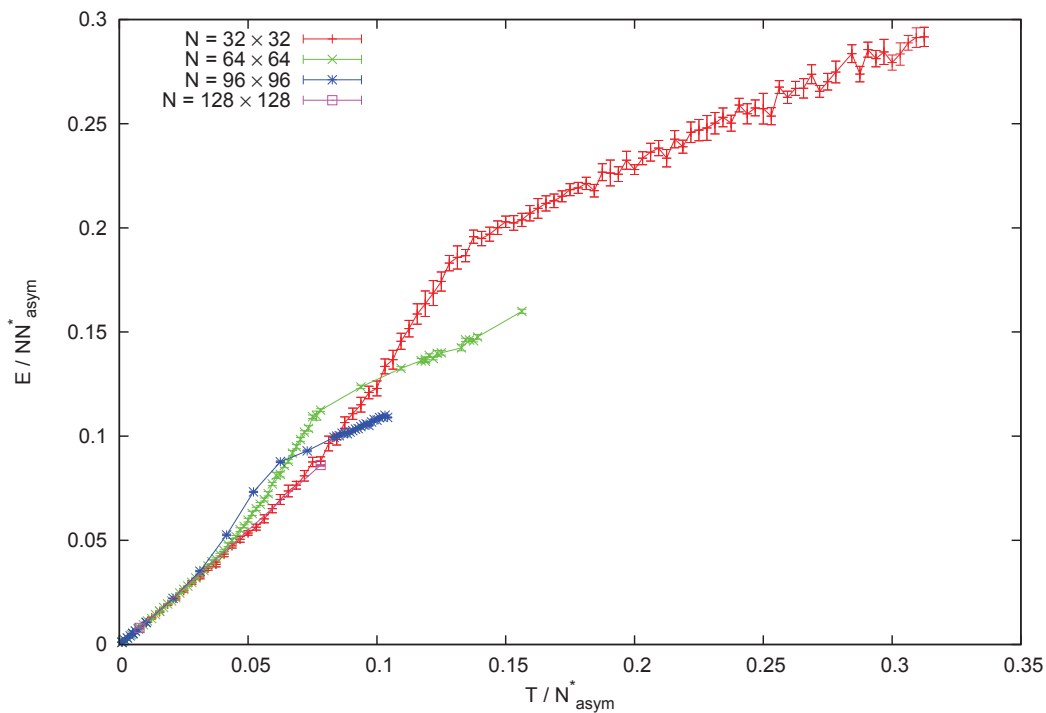
以下では、これら三通りのスケーリング方法に従って、数値計算によって得られた結果をそれぞれプロットしていこう。

## 4.3.1 漸近形を用いた場合

ケース A の漸近形を用いた場合を考え、グラフを作成すると図 4.4 を得ることができた。



(a) sd-cosh モデル



(b) sd-HMF モデル

図 4.4  $H_{sd-cosh}$  および  $H_{sd-HMF}$  に対して  $E/NN^*_{asym}$  対  $T/N^*_{asym}$  をプロットしたもの。ただし  $N^*_{asym} := N^{1-\alpha/d}$ 。上図が sd-cosh モデル、下図が sd-HMF モデルの計算結果である。エラーバーは時間的なエネルギー変化量 (熱ゆらぎ) をプロットしている



## 4.3 スケーリング

まず sd-cosh モデルのグラフ (図 4.4(a)) に注目すると、系の大きさが  $N = 96 \times 96$  および  $N = 128 \times 128$  のものはほぼ重なっているが、それよりも小さなもの ( $N = 16 \times 16, 32 \times 32, 64 \times 64$ ) は系の大きさによって違う曲線になってしまっていることが分かる。従って sd-cosh モデルの場合には系の大きさが  $N = 96 \times 96$  よりも大きい場合には、漸近形を用いたスケーリング則がよく成り立つが、それよりも小さな系に対しては成り立たなくなってしまうことが分かる。なお、sd-cosh モデルがクロスオーバを起こす系の大きさの見積り値は 3.1.1 節によれば、おおよそ  $N_C \simeq 22 \times 22$  程度であるから、この見積り値と同程度のオーダで実際にクロスオーバが起きていることが分かるだろう。

次に sd-HMF モデルのグラフ (図 4.4(b)) に注目しよう。こちらのグラフは sd-cosh の場合と比べると系のサイズ依存性がかなり顕著に現れてしまっていることが分かる。特に、実験した最大のサイズである  $N = 128 \times 128$  であってもまだ収束しておらず、かなり巨大な系を用意しない限り漸近形を用いたスケーリング則では正しい予言を与えることができないことを示唆している。特に sd-HMF の  $N_C$  はおおよそ  $N_C \simeq 100 \times 100$  であったから、 $128 \times 128$  程度では収束しないことは  $N_C$  の見積り値とも矛盾していないことが分かる。

以上の結果から、系の大きさが漸近領域に達するほど十分大きい場合 (例えば、惑星程度の大きさの場合) には漸近形  $N_{\text{asym}}^* := N^{1-\alpha/d}$  を用いたスケーリング則が十分な精度で成り立つ場合でも、我々が知りたい系がこれよりも小さなサイズである場合には、このスケーリング則では不十分であることが分かる。

## 4.3.2 個別にみた場合

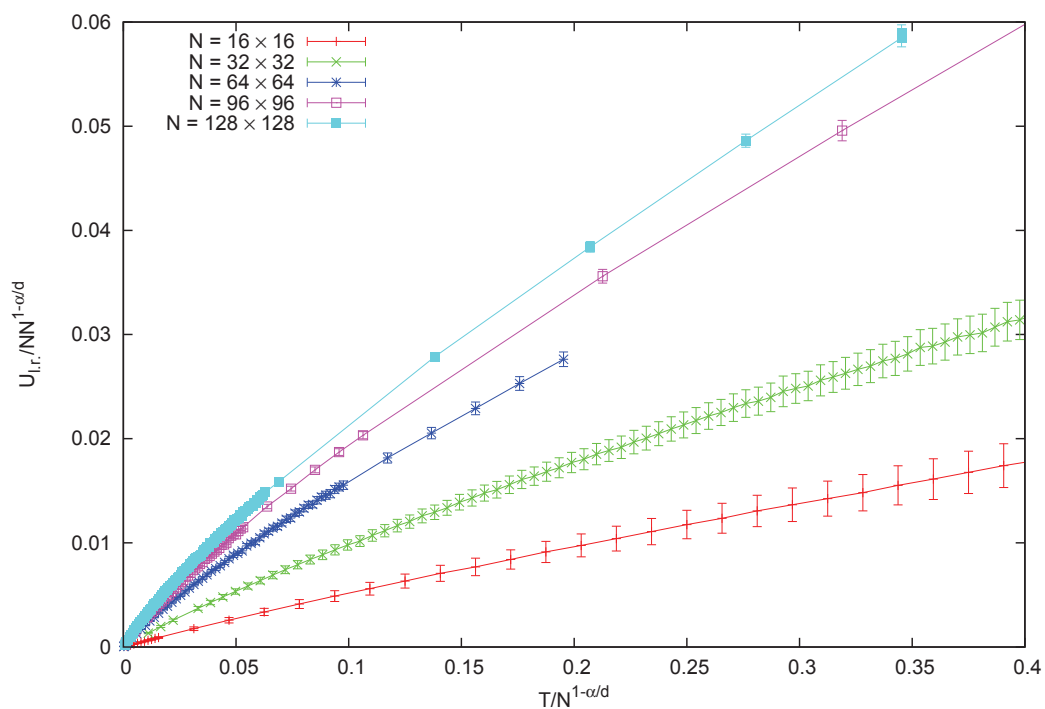
ポテンシャルエネルギーを長距離的項と、短距離的項に分けた場合を考えよう。まず sd-cosh モデルに対してプロットを行うと図 4.5 を得る。このグラフによると、長距離的ポテンシャル  $U_{l,r}$  についても、短距離的ポテンシャル  $U_{s,r}$  についても系のサイズに大きく依存しており、どちらの場合も予想されるスケーリングは全く成り立っていないことが分かる。

sd-HMF モデルに関しても同様にグラフを作成すると図 4.6 のようになる。この場合にも系の振る舞いは系のサイズに大きく依存しており、個別に見た場合にはスケーリングが成り立っていないことが分かる。なお sd-HMF モデルはスピンモデルであるから、エネルギーは有界であり長距離的ポテンシャルは高温の場合にはほぼ一定値に収束していることが見て取れる。

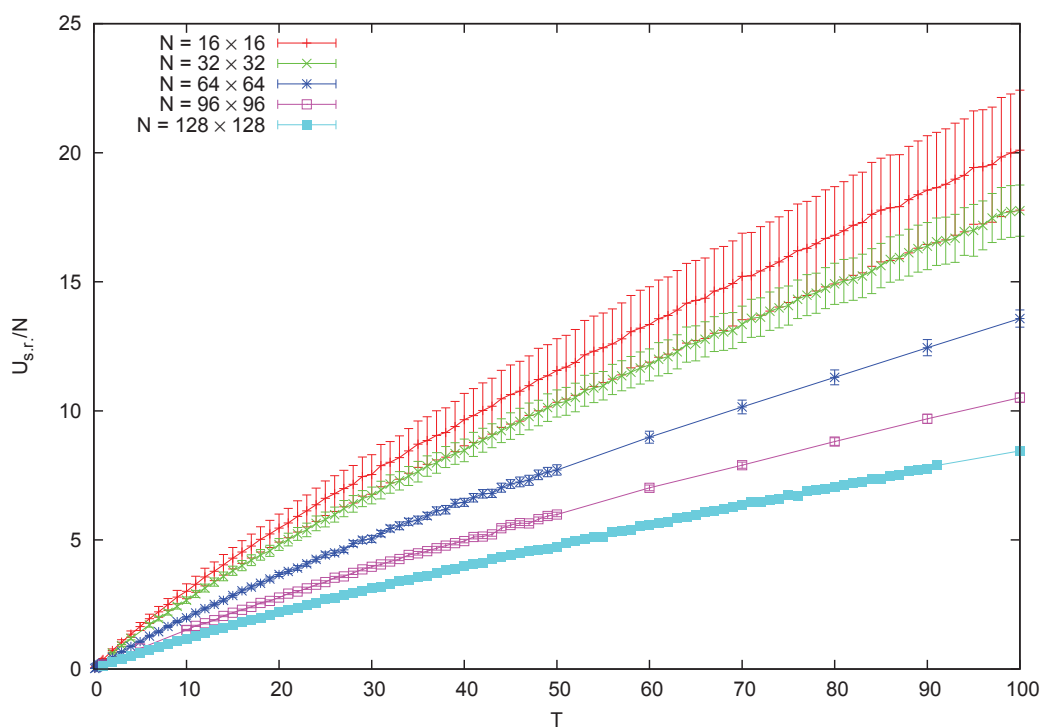
どちらの場合も  $U_{l,r}, U_{s,r}$  は系のサイズに大きく依存してしまっており、スケーリングは成り立っていないことが分かる。特に短距離的ポテンシャル  $U_{s,r}$  が  $O(N)$  でスケールしない、すなわち  $U_{s,r} \propto N$  とはならないことに注意されたい。長距離力が全く無い場合には短距離的ポテンシャルは系のサイズに比例するはずであるが、長距離力が混ざっている場合には長距離力の影響によって 短距離的なポテンシャルは  $O(N)$  の量とはならないのである。これは長距離力がある場合には系のサイズの増大に伴って系全体の運動は凍りついていってしまうために、短距離的なポテンシャルは 0 に向かって減衰していってしまうためだと考えることができる。

## 4.3.3 総和を用いた場合

最後にケース C で定義した  $N_{\text{sum}}^*$  を用いて  $E/NN_{\text{sum}}^*$  対  $T/N_{\text{sum}}^*$  をプロットしたものを図 4.7 に示す。sd-cosh モデルに対しても、sd-HMF モデルに対しても、系のサイズが大きいところから小さいところに渡って非常によい精度でスケーリングをしていることが見て取れる。なお、sd-HMF モデルのグラフ (図 4.7(b)) において  $N = 128 \times 128$  のものがズレてしまっているように見えるのは、データ点が足りないためであり、データ点のあるところでは他の曲線と同じ所に乗っていることを注意しておく。

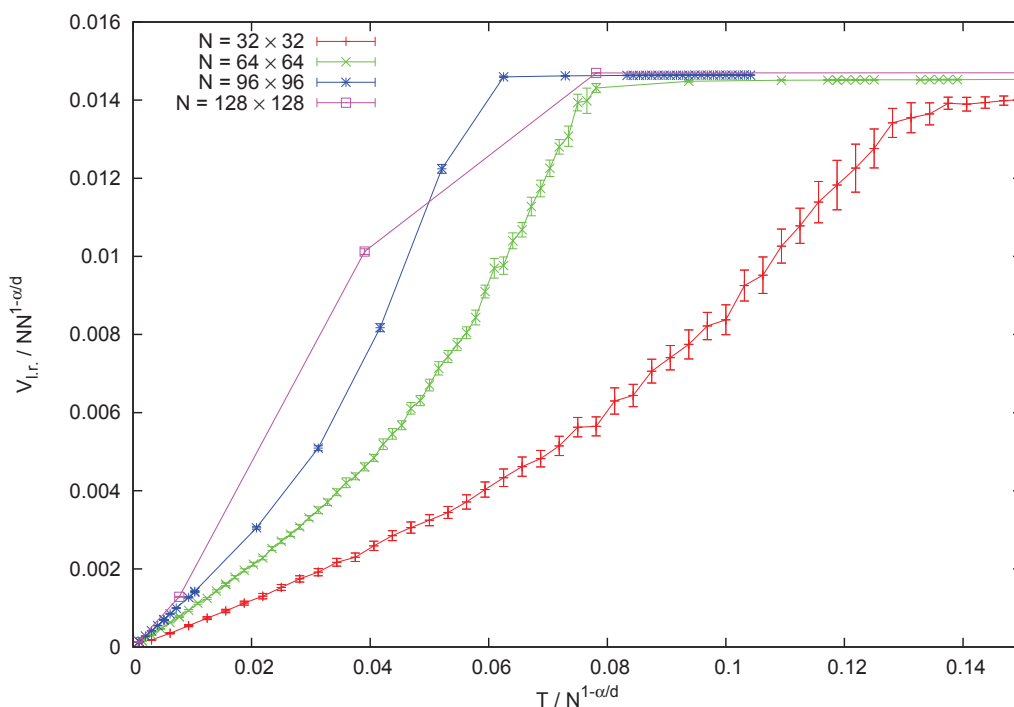


(a) 長距離的ポテンシャル  $U_{l,r}$ .

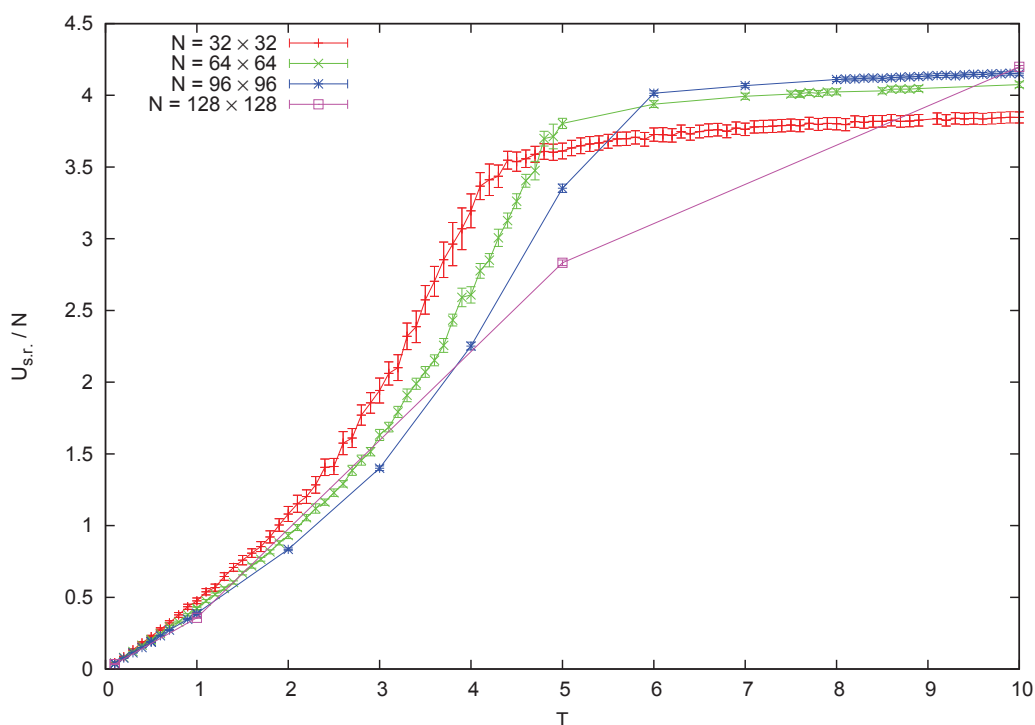


(b) 短距離的ポテンシャル  $U_{s,r}$ .

図 4.5 sd-cosh モデルの長距離的ポテンシャル  $U_{l,r}$ . (上図) および短距離的ポテンシャル  $U_{s,r}$ . (下図) をプロットしたもの。長距離的ポテンシャルは、空間的減衰の冪が  $\alpha = 0.5$  なので、 $N_{\text{indv}}^* := N^{1-\alpha/d} = N^{0.75}$  として  $U_{l,r}/NN_{\text{indv}}^*$  対  $T/N_{\text{indv}}^*$  をプロットした。短距離的ポテンシャルは、通常の場合と同様に  $U_{s,r}/N$  対  $T$  をプロットした

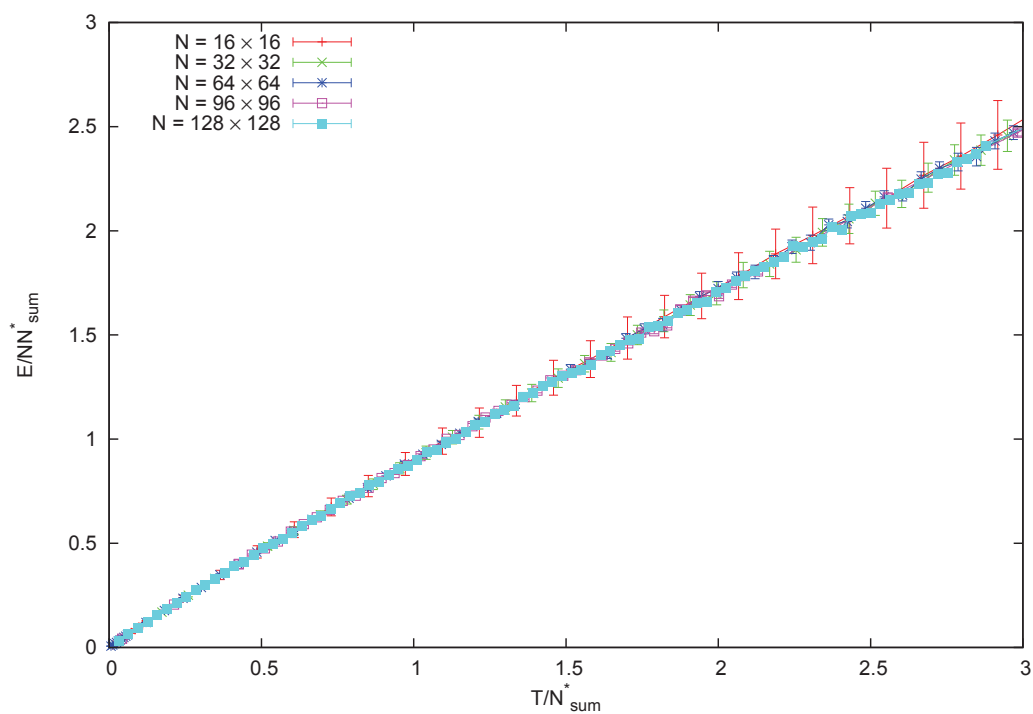


(a) 長距離的ポテンシャル  $U_{l.r.}$ .

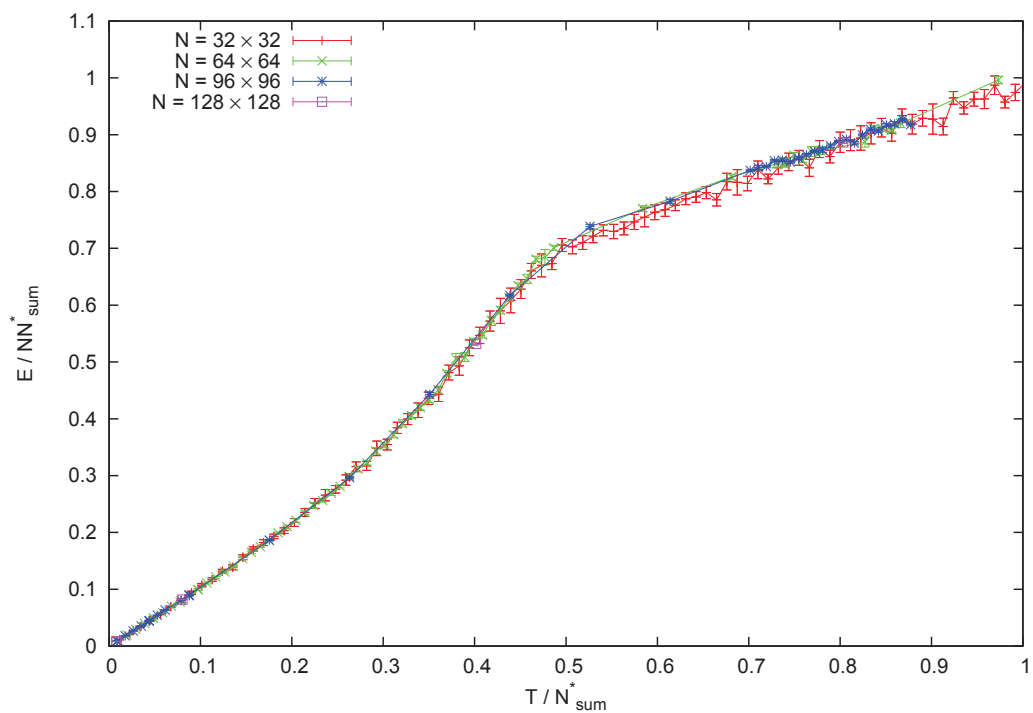


(b) 短距離的ポテンシャル  $U_{s.r.}$ .

図 4.6 sd-HMF モデルの長距離的ポテンシャル  $U_{l.r.}$  (上図) および短距離的ポテンシャル  $U_{s.r.}$  (下図) をプロットしたもの。長距離的ポテンシャルは、空間的減衰の冪が  $\alpha = 0.5$  なので、 $N_{indv}^* := N^{1-\alpha/d} = N^{0.75}$  として  $U_{l.r.}/NN_{indv}^*$  対  $T/N_{indv}^*$  をプロットした。短距離的ポテンシャルは、通常の場合と同様に  $U_{s.r.}/N$  対  $T$  をプロットした



(a) sd-cosh モデル



(b) sd-HMF モデル

図 4.7 sd-cosh モデル (上図) および sd-HMF モデル (下図) に対して  $N_{\text{sum}}^*$  を用いて  $E/NN_{\text{sum}}^*$  対  $T/N_{\text{sum}}^*$  をプロットしたもの。系のサイズに依らず、互いにほぼ一定の曲線を描いており、かなり精度のよいスケーリングとなっていることが分かる。

## 4.4 エネルギーの原点

以上で①ケース A 漸近形を用いた場合、②ケース B 個別にみた場合、③ケース C 総和を用いた場合、という直感的には正しそうな相異なる三通りの方法を用いてスケールリングが成り立つかどうかをチェックした。その結果、少なくとも我々が調べたモデルの範囲内では①および②ではうまくスケールしなかったが、③の総和を用いた場合には非常によいスケールリングが得られることを確認することができた。

## 4.4 エネルギーの原点

以上の結果から、少なくとも本研究で取り扱ったモデルに関しては系全体のエネルギーに関して  $N_{\text{sum}}^*$  をスケールリングファクターとしたスケールリング則を適用すると、非常に精度の良いスケールリングを得られることがわかったが、逆にエネルギーの原点の選び方の任意性の議論から、スケールリングファクターとして  $N_{\text{sum}}^*$  を用いなければいけないことがいえる。

ミクロな理論である力学の範疇では、Hamiltonian には正準変数を含まない任意の項を付け加えても運動方程式は変わらないため、エネルギーの原点は任意に選ぶことができる。ところが、熱力学や統計力学のように系の粒子数  $N$  を非常に大きくとったときの極限を考える場合には、Hamiltonian に  $N$  を含む項を付け加えてエネルギーの原点をずらしてしまうと不都合が生じることがある。例えば短距離的な Hamiltonian を

$$H \longrightarrow H' := H + N^2 \quad (4.21)$$

のように変更すると、系のエネルギー密度は

$$\mathcal{E}(T) := \frac{E(N, T)}{N} \longrightarrow \mathcal{E}'(T) := \frac{E'(N, T)}{N} = \mathcal{E}(T) + N \quad (4.22)$$

のようになり、短距離相互作用系であってもエネルギーの原点を変更した後のエネルギー密度  $\mathcal{E}'(T)$  は一定とならず、もはや  $O(N)$  の量になってしまう。

しかしながらこの問題は短距離相互作用系ではあまり本質的ではない。なぜならば、Hamiltonian にわざわざ  $O(N)$  よりも大きな項を付け加えるというグローバルな変更を人工的に加えた場合にしか発生せず、二体ポテンシャル  $u(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j)$  の原点を変更するといったローカルな変更では高々  $O(N)$  程度の違いしか発生しないためである。

それでは長距離相互作用系でも同じことがいえるだろうか？もちろん、Hamiltonian に  $N$  の任意関数  $f(N)$  を加えるというグローバルな変更を行ってしまうと一般にはもとの Hamiltonian のもつスケールリングから変わってしまうのは明らかであるが、二体ポテンシャルを定数だけずらすというローカルな変更を行った場合にはどうだろうか？今までと同様に、二つの異なる冪減衰をもつ次の Hamiltonian を考えよう。

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{J}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \left[ \frac{A}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|^\alpha} + \frac{B}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|^\beta} \right] [u(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) + \epsilon] \quad (4.23)$$

第二項に現れる  $\epsilon$  がこの系のエネルギーの原点を決めていると考えることができる。そこでこの  $\epsilon$  を含む項のみを抜き出してみると、

$$E_0 := \frac{\epsilon J}{2} \sum_{i \neq j}^N \left[ \frac{A}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|^\alpha} + \frac{B}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|^\beta} \right] = \frac{\epsilon J}{2} N_{\text{sum}}^* \quad (4.24)$$

と分かる。ここで  $N_{\text{sum}}^*$  は (4.18) 式で定義したスケールリングファクターである。従って、 $\epsilon$  が 0 の場合と 0 でない有限の大きさをもつ場合での系のエネルギーの大きさを比べてみると、

$$E(N, T; \epsilon) = E(N, T; \epsilon = 0) + \frac{\epsilon J}{2} N_{\text{sum}}^* \quad (4.25)$$

という関係が成り立つ。ここでスケーリングファクタを  $N^*(N)$  として Tsallis のスケーリング則  $E(N, T; \epsilon) = NN^*\mathcal{E}^*(T/N^*; \epsilon)$  を考えると、

$$NN^*\mathcal{E}^*(T/N^*; \epsilon) = NN^*\mathcal{E}^*(T/N^*; \epsilon = 0) + \frac{\epsilon J}{2}N_{\text{sum}}^* \quad (4.26)$$

を得るため、この式がすべての  $N$  に対して成り立つ<sup>\*3</sup>ためには、

$$N^* = N_{\text{sum}}^* \quad (4.27)$$

である必要があるとわかる。従って、二体ポテンシャルの原点を定数だけずらすというローカルな変更を行ったとしても、系全体のエネルギーに対してスケーリング則が成り立つためには、本研究の提案する  $N_{\text{sum}}^*$  を用いなければいけないということが分かる。

## 4.5 スケーリングの使い方

以上でみたような  $N_{\text{sum}}^*$  を用いたスケーリング則が存在することは、それ自体が物理的に非常に興味深いものであるのみならず、少なくとも次のような有用性をもつ。

多くの数値計算では計算時間や使用するメモリ量などの制約から、あまり大きな系を計算することはできない。また、現実の系で実験をする場合にも、非常に大きな系を用意するのは大変であるし、逆にあまり小さな系では操作を行ったり測定を行ったりすることは難しくなってしまう。従って、数値計算や実験では、ある限られた大きさの系しか取り扱えない場合がほとんどであろう。

このことは短距離相互作用系ではあまり問題にならない。なぜならば、短距離相互作用系ではエネルギーや磁化などの物理量は系の大きさに単純に正比例するため、取り扱うのが簡単な、適当な大きさの系に対してのみ数値計算もしくは実験を一度だけ行い、あとは得られた物理量の値を本当に知りたい系の大きさに合わせて何倍かするだけで、簡単に求まってしまうからである。ところが、長距離相互作用系では第一章で詳しく述べた通り、系の性質が系の大きさや形によって顕に変わってしまうために、このような単純な議論を行うことができない。すなわち、長距離相互作用系では様々な大きさの系の性質を知りたいのであれば、様々な大きさの系をすべて用意し、それぞれに対して系の性質 — 例えば温度とエネルギーの関係式など — を求めていかなくてはならず、いわば「各個撃破」するしかないのである。

しかしながら、もし考えている系に  $N_{\text{sum}}^*$  を用いたスケーリング則が成り立つのであればこの限りではない。本研究で計算を行った sd-cosh モデルや sd-HMF モデルでは、現実的な計算時間で計算を行えるのはせいぜい  $N = 100 \times 100$  程度までであり、これ以上大きな系の計算はできない。ところがどちらのモデルでも  $N_{\text{sum}}^*$  を用いたスケーリング則の成立が今回の実験によって確認できたため、このスケーリング則を  $N = 100 \times 100$  を超えた領域に適用することで、一般には「各個撃破」するしかなかった長距離系であるにもかかわらず、いくらでも大きな系の性質を予言することができてしまうのである。以下では、このことをもう少し詳しく見ていこう。

まず、どんな大きさでも構わないので、最も計算や実験しやすい大きさの系（粒子数  $N_0$ ）を一つだけ用意する。例えば今回の計算で用いた sd-cosh モデルや sd-HMF モデルであれば、 $N_0 = 50 \times 50$  くらいのもので採用するのが最適であろう。そして、いま用意した系に対して計算や実験を行い、その性質 — ここでは例としてエネルギーと温度の関係 — を調べることで

$$E_0(T) := E(T; N_0) \quad (4.28)$$

<sup>\*3</sup> 熱力学や統計力学の範囲での議論であるから、マクロな大きさだとみなせないほど小さな  $N$  に対しては成り立つ必要はない。つまり、マクロな大きさだとみなせるほど十分大きな  $N$  に対して  $N^*(N) = N_{\text{sum}}^*(N)$  であればよい。しかしながら、実用的にはすべての  $N$  に対して  $N^*(N) = N_{\text{sum}}^*(N)$  を要求してしまっても問題はないだろう



## 4.5 スケーリングの使い方

という関係  $E_0(T)$  が得られたとしよう。もしもスケーリング則が成り立つのであれば、

$$E_0(T) = N_0 N_{\text{sum}}^*(N_0) \mathcal{E}^* \left( \frac{T}{N_{\text{sum}}^*(N_0)} \right) \quad (4.29)$$

すなわち

$$\mathcal{E}^* \left( \frac{T}{N_{\text{sum}}^*(N_0)} \right) = \frac{E_0(T)}{N_0 N_{\text{sum}}^*(N_0)} \quad (4.30)$$

である。スケーリング則の主張は、上式の左辺が  $T/N_{\text{sum}}^*$  に依存しない、ということであったから、これはすなわち任意の  $N$  に対して

$$\mathcal{E}^* \left( \frac{T}{N_{\text{sum}}^*(N)} \right) = \frac{E_0 \left( \frac{T}{N_{\text{sum}}^*(N)} \cdot N_{\text{sum}}^*(N_0) \right)}{N_0 N_{\text{sum}}^*(N_0)} \quad (4.31)$$

が成立することを主張している。系の全エネルギーはこの式の両辺に  $NN_{\text{sum}}^*(N)$  を乗じたものであったから、

$$E(T; N) = NN_{\text{sum}}^*(N) \mathcal{E}^* \left( \frac{T}{N_{\text{sum}}^*(N)} \right) \quad (4.32)$$

$$= \frac{NN_{\text{sum}}^*(N)}{N_0 N_{\text{sum}}^*(N_0)} E_0 \left( \frac{T}{N_{\text{sum}}^*(N)} \cdot N_{\text{sum}}^*(N_0) \right) \quad (4.33)$$

$$= \frac{NN_{\text{sum}}^*(N)}{N_0 N_{\text{sum}}^*(N_0)} E_0 \left( \frac{N_{\text{sum}}^*(N_0)}{N_{\text{sum}}^*(N)} T \right) \quad (4.34)$$

が、すべての系のサイズに対して成り立つのである。

それでは実際にこのスケーリング則を用いて、sd-HMF モデルのエネルギーと温度の関係を求めてみよう。まず、計算のしやすい大きさとして  $N_0 = 64 \times 64$  のものを採用する。この程度の大きさであれば一回の計算は約 10 時間程度で完了する<sup>\*4</sup>ため、非常に扱いやすい。一方、本当に知りたい系の大きさは  $N = 128 \times 128$  であるとしよう。なお、本研究においては  $N = 128 \times 128$  のものも何回か計算を行ってはいるが、一回の計算に約 1 週間程かかるため、計算をしやすい大きさであるとは、とても言うことはできない。

実際に、粒子数  $N_0 = 64 \times 64$  の小さなサイズの系の計算結果から得られたエネルギーと温度の関係に対して、スケーリング則の適用により粒子数  $N = 128 \times 128$  の大きなサイズの系のエネルギーと温度の関係を推定してみると、図 4.8 の赤色の実線を得ることができる。また、粒子数  $N = 128 \times 128$  の大きなサイズの系を実際に計算し、直接的に得られた値を緑色のバツ印で重ねてプロットしている<sup>\*5</sup>。グラフからすぐに分かる通り、計算の容易な粒子数  $N_0 = 64 \times 64$  のものから得られた推定値は、実際に粒子数  $N = 128 \times 128$  の系を計算することで得られた実測値とほぼ同じ値をとっており、取り扱いの容易な小さな系の解析のみから、計算が困難なほど巨大な系の性質を予言することができていることがわかる。

\*4 ただし、研究室で保有する計算機 (Intel Xeon E5-2670 × 2) で計算した場合。もちろん、スパコンなどを用いて並列化を行えば、その分計算時間は短縮できる。あくまでも、計算時間のおおよその目安だと思って欲しい

\*5 すでに述べた通り、粒子数  $N = 128 \times 128$  の大きさになると非常に長い計算時間を要するため、データ点は非常に少なく、グラフに載せた範囲内では 4 個程度しかとることができなかった

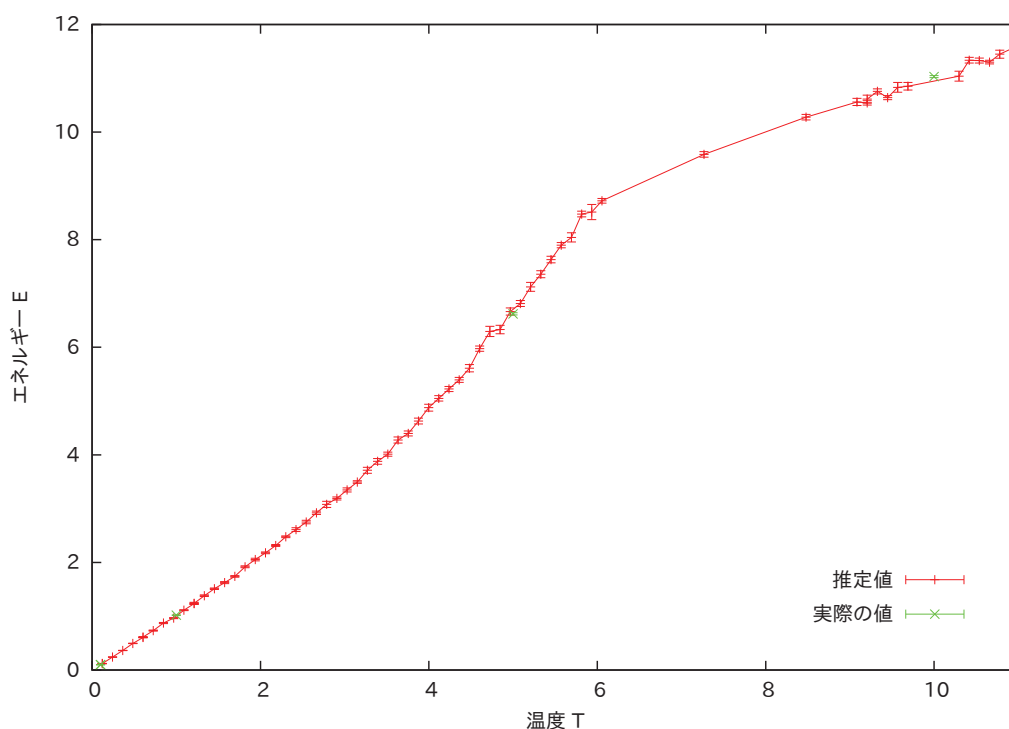


図 4.8 赤色の実線は sd-HMF モデルにおいて、粒子数  $N_0 = 64 \times 64$  の系におけるエネルギーと温度の関係の計算結果から、粒子数  $N = 128 \times 128$  の系におけるエネルギーと温度の関係をスケーリング則を適用することで求めたものを示している。一方、緑色のバツ印で示したものは実際に  $N = 128 \times 128$  の大きさの系を計算して得られた結果である。小さな系に対してスケーリング則を適用することで求めたエネルギーと温度の関係と、実際に大きな系を計算して得られたエネルギーと温度の関係はほぼ等しく、スケーリング則によって巨大な系の予言が正しく与えられていることが分かる



## 第五章

# おわりに

### 5.1 考察

本研究で提案する  $N_{\text{sum}}^*$  を用いたスケーリング則は我々の計算したモデルでは非常にうまくいった。しかしながら、なぜこのようなスケーリング則が成り立つのかを明確に答える術は現在のところ持ち合わせていない。従って、本スケーリングは我々の計算したモデル（およびそれに類似したモデル）でのみ成り立つが、一般的には成り立たない、という可能性もあるだろう。特に、今回は相互作用の減衰の冪を変えることで長距離的な項と短距離的な項を作ったが、いくつかのモデルにおいて短距離の場合と、長距離の場合では異なる性質をもつことが知られている。そのようなモデルでは短距離的な性質から長距離的な性質への遷移は Tsallis のスケーリング則のような形で書くことは難しいと思われる。また、そもそも格子モデルでない長距離モデルの場合には  $N_{\text{sum}}^*$  をどのように計算していいのか定かではない、といった問題もある。

このように、本研究の提案するスケーリング則は全く万能ではない。しかしながら、逆に考えれば冪の大きさによって性質が変わらないような古典格子系であれば、このスケーリング則は一般的に成り立つ。特に、冪の大きさを変えても<sup>\*1</sup>平均場モデルと厳密に一致する場合があることが知られており [18, 19]、こういったモデルに関しては今回のようなスケーリングが厳密に成り立っていることはほぼ間違いないだろう。

### 5.2 まとめ

本研究では、短距離相互作用と長距離相互作用が同程度の強さで働き、短距離的な効果と長距離的な効果がクロスオーバーするような大きさの系に対して、従来の長距離相互作用系の議論で用いられていた Tsallis によるスケーリング則をどのように適用すればよいのかを具体的な古典モデルの分子動力学計算を通して調べた。その結果、①長距離的な項でのみ決まるスケーリングファクター  $N^* = N^{1-\alpha/d}$  を用いてスケーリングを行うと、クロスオーバーする領域よりも小さなところでは良いスケーリングが得られないこと、②系のポテンシャルエネルギーを短距離的な項  $U_{\text{s.r.}}$  と長距離的な項  $U_{\text{l.r.}}$  の二つに分解し、それぞれに対して従来通りのスケーリング  $U_{\text{s.r.}} \sim N, U_{\text{l.r.}} \sim N^{1-\alpha/d}$  を適用したとしてもスケーリングが得られないことを示した。しかしながら、③本研究で提案する新しいスケーリングファクター  $N_{\text{sum}}^*$  を用いて従来と同様のスケーリング則を適用してみると、非常によい精度のスケーリングがみられることを示した。

---

<sup>\*1</sup> ただし、任意の値に対して成り立つわけではない

## 5.3 展望

### 5.3.1 異なる二体ポテンシャル

今回対象としたモデルは二体ポテンシャルの形は同じ ( $\cosh(q_i - q_j)$  または  $\cos(q_i - q_j)$ ) だが、その空間的な減衰の仕方が異なるものを互いに足し合わせたもの ( $A/\Delta R^\alpha + B/\Delta R^\beta$ ) であった。しかしながら一般には、全く異なる形をした二体ポテンシャルが足しあわさったようなモデルも考えられるであろう。そのようなモデルでは今回のような単純なスケールリング則がそのまま成り立つとは思えない。そうしたモデルに対しても何らかの解析を行い、どのようなスケールリング則が成り立つのか、もしくはそもそもスケールリング則は一つも成り立っておらず、系の大きさに<sup>あらわ</sup>顕に依存したエントロピーや自由エネルギーを考えなければ本質的なことは何もいえないのか、などを解明することが求められるだろう。

### 5.3.2 古典格子系以外のモデル

本研究でもそうしたように、長距離相互作用系の多くの議論では古典格子系のみに限って議論することが多い。しかしながら現実の相互作用を考えると自由に動きまわる粒子たちが互いに長距離的な引力もしくは斥力を受けて運動するようなモデル、具体的には重力多体系や Coulomb 多体系のようなものが数多くある。このようなモデルに対しても同様のスケールリング則が成り立つのかどうかを調べる必要がある。

また、量子系を調べるのも面白いだろう。なぜならば、古典力学においては例えば  $-1/r$  といった冪減衰型のポテンシャルはいくらでも負の方向にいくらでも大きなポテンシャルエネルギーをとってしまうが、量子力学においては水素原子のエネルギースペクトルの解析などをみれば分かる通り、冪減衰型のポテンシャルであってもポテンシャルエネルギーに下限ができる。この補正は物質が比較的高密度で存在する場合には顕に効いてくるはずである。実際、次のようなパラドックスが知られている [4]。

#### 定理 5.1 (古典統計力学によれば、すべての物質は負の比熱をもつ)

我々の身の回りの現象に関わってくるのは、もとを正せば原子や電子の間の相互作用、すなわち Coulomb 相互作用だけである。従って「万物の Hamiltonian」は以下のように書けるだろう。

$$H = \underbrace{\sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}}_K + \frac{k_C}{2} \underbrace{\sum_{i \neq j=1}^N \frac{e_i e_j}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|}}_U \quad (5.1)$$

ここで古典力学におけるビリアル定理 (付録 B 参照) から、次の等式が成り立つ。

$$\overline{K} = -\frac{1}{2}\overline{U} \quad (5.2)$$

ただし  $\overline{\phantom{x}}$  は長時間平均操作をあらわすものとする。ここで長時間平均とアンサンブル平均が一致すること (エルゴード性) を要請する\*2と、等重率の原理から  $\overline{K} = (3/2)NT$  であるから、系の全エネルギーは

$$\overline{E} = \overline{K} + \overline{U} = \frac{3}{2}NT - 3NT = -\frac{3}{2}NT \quad (5.3)$$

である。従って比熱を求めると、

$$C = \frac{dE}{dT} = -\frac{3}{2}N < 0 \quad (5.4)$$

となり、すべての物質は負の比熱をもつことが分かる。 ■

実際の物質では当然比熱は正であるから、どこかに矛盾点や、現実との齟齬があることは明白である。具体的にはこの定理のどこが間違っていたのであろうか？

間違いが起きた理由の一つ目として、証明の途中でビリアル定理を使っていることに注目してみよう。ビリアル定理では粒子が動きまわることのできる領域が有限であることを暗に仮定しているが、電荷の符号が一緒の粒子同士には互いに斥力が働いているため、この仮定が実は成り立たない。一方で、容器の中に閉じ込めてしまえば運動する領域は有限となるうえに、その方が現実的な状況に即していると思われるかもしれない。ところが、今度はビリアル定理は成り立つものの、このときには容器と荷電粒子の間でのビリアルを考慮に入れなければならない、やはりこの場合でも上の証明は途中で破綻をきたしてしまう。

この定理の問題点としてもう一つ考慮に入れなければいけないことは、量子力学的な効果である。特に凝縮系を考える場合には、電子や陽子が量子力学的な効果を考えなければいけないほど互いに接近しているため、この補正は非常に大きいと思われる。

ところで、生の Coulomb 相互作用は長距離相互作用であるから、電子と原子から構成される身の回りの物質は非相加的であって然るべきであるが、我々の日常経験からはほとんどすべての物質が相加的になっているというのも、よく考えてみれば不思議である。正電荷と負電荷が同程度ある場合にはスクリーニングが起こるために有効的には短距離になってしまう、と簡単に説明されてしまうことが多いが、例えばプラズマ化するほど高温になってしまえば長距離的な効果が無視できなくなってくるのが予想されるため、統一的に理解されているとはとても言い難い。この場合には温度によって短距離的な領域から長距離的な領域へのクロスオーバーが起きていると考えることができるのではないだろうか。

---

\*2 エルゴード性が熱力学や統計力学の基礎づけではないことはよく知られているが、それはエルゴード性が必要な条件ではないと主張しているだけであり、エルゴード性を要請することは熱力学や統計力学の基礎づけに関する議論とは何ら矛盾しないことに注意されたい



## 付録 A

# 厳密解

具体的な長距離モデルの厳密解を求めることは一般には非常に困難であるが、いくつかのモデルに対しては厳密解を求めることができる。ここでは厳密解の知られているいくつかのモデルを紹介しよう。なお、長距離相互作用系の厳密な結果について詳しく書かれたレビューとして [20] をあげておく。

### A.1 同次函数型

ポテンシャルが同次函数型をしている場合には厳密解を求めることができる。

#### A.1.1 モデル

以下の Hamiltonian で与えられる古典正方格子<sup>\*1</sup>系を考えよう。

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{J}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{|q_i - q_j|^b}{\|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|^\alpha} \quad (\text{A.1})$$

ただし  $\mathbf{R}_i$  は  $i$  番目の格子点の位置をあらわしており、以下では格子間隔  $a := \|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\|$  (ただし、 $\mathbf{R}_i$  と  $\mathbf{R}_j$  は互いに隣接している格子点) を陽に取り扱うために単位格子ベクトルを  $\mathbf{r}_i := \mathbf{R}_i/a$  とおく。また  $m$  や  $J$  は 1 としても一般性を失わないことに注意し 1 に設定する。 $d$  を空間次元とすると、 $\alpha \leq d$  の場合にはこのモデルは長距離相互作用系になる。

#### A.1.2 ビリアル定理からいえること

Hamiltonian のポテンシャル部分は正準座標に関して同次函数型であるから、ビリアル定理 (付録 B 参照) :

$$\overline{K} = \frac{b}{2} \overline{V} \quad (\text{A.2})$$

が成り立つ。ここで  $\overline{\ast}$  は長時間平均をあらわす。従って全エネルギーは、

$$\overline{E} = \overline{K} + \overline{V} = \frac{b+2}{b} \overline{K} \quad (\text{A.3})$$

となる。アンサンブル平均と長時間平均が一致するのであれば (エルゴード性が成り立つのならば)、長時間平均  $\overline{\ast}$  をアンサンブル平均  $\langle \ast \rangle$  に置き換えることができ、また速度分布が温度  $T$  の Maxwell-Boltzmann 分布に従っていること (エネルギー等分配則) を仮定すると、 $\langle K \rangle = (1/2)NT$  であるから、

$$\langle E \rangle = \frac{b+2}{2b} NT \quad (\text{A.4})$$

<sup>\*1</sup> 以下の議論は正方格子でなくともほぼ同じことが言えるが、ここでは簡単のため正方格子に限定した話をするにすることにする

が与えられる。従ってこの系の格子点一つあたりの比熱は、

$$c = \frac{1}{N} \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_{V,N} = \frac{b+2}{2b} \quad (\text{A.5})$$

であるとわかり、この値は  $\alpha$  によらない。これはたとえ長距離的なパラメータ領域 ( $\alpha < d$ ) でも成り立つことに注意する。

この結果は、以下で求めるミクロカノニカル分布およびカノニカル分布による計算結果と矛盾しないことが簡単に分かる。

### A.1.3 ミクロカノニカル解

状態数  $\Omega_{\alpha,b}(E, V, N)$  は以下の式であらわされる図形の内側の体積である。

$$\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2a^\alpha} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{|q_i - q_j|^b}{\|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|^\alpha} = E \quad (\text{A.6})$$

従って、

$$\Omega_{\alpha,b}(E, V, N) = \left[ \frac{b+2}{2b} e^{-N(\ln N + c_{\alpha,b}(N))} \right] (a^\alpha E)^{N/b} E^{N/2} \quad (\text{A.7})$$

ここで、

$$\frac{b+2}{2b} e^{-N(\ln N + c_{\alpha,b}(N))} \quad (\text{A.8})$$

は以下の式で表される図形の内側の体積である。

$$\sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{|Q_i - Q_j|^b}{\|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|^\alpha} = 1 \quad (\text{A.9})$$

従ってミクロカノニカル分布から計算されるエントロピーは不要な定数を除いて、

$$S(E, V, N) = N \left[ \frac{b+2}{2b} \ln \frac{E}{N} + \frac{\alpha}{bd} \ln \frac{V}{N} - c_{\alpha,b}(N) \right] \quad (\text{A.10})$$

である。

### A.1.4 カノニカル解

分配関数は、

$$Z_K = \left[ \int \exp \left[ -\beta \frac{p^2}{2} \right] dp \right]^N = \left( \frac{2\pi}{\beta} \right)^{N/2} \quad (\text{A.11})$$

$$Z_V = \int \exp \left[ -\frac{\beta}{2a^\alpha} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{|q_i - q_j|^b}{\|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|^\alpha} \right] \prod_{i=1}^N dq_i \quad (\text{A.12})$$

$$= \left( \frac{2a^\alpha}{\beta} \right)^{N/b} \underbrace{\int \exp \left[ -\sum_{i \neq j=1}^N \frac{|q_i - q_j|^b}{\|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|^\alpha} \right] \prod_{i=1}^N dq_i}_{=:\exp(-Nc_{\alpha,b}^{\text{can}}(N))} \quad (\text{A.13})$$

とすると、

$$Z = Z_K Z_V \quad (\text{A.14})$$

で与えられる。従って Helmholtz の自由エネルギーを無次元化した  $\Phi(T, V, N) := -\ln Z$  は不要な定数を除いて、

$$\Phi(T, V, N) = N \left[ -\frac{b+2}{2b} \ln T - \frac{\alpha}{bd} \ln \frac{V}{N} + c_{\alpha,b}^{\text{can}}(N) \right] \quad (\text{A.15})$$

とわかる。最後の  $c_{\alpha,b}^{\text{can}}(N)$  という項は、アンサンブルの等価性からミクロカノニカル解で出てきた項  $c_{\alpha,b}(N)$  と漸近的に一致しなくてはならない。すなわち、

$$c_{\alpha,b}^{\text{can}}(N) \sim c_{\alpha,b}(N) \quad (\text{A.16})$$

が成り立つ。

## A.2 平均場 Hamiltonian モデル

以下の Hamiltonian で与えられる平均場モデルを平均場 Hamiltonian (Hamiltonian mean field; HMF) モデルと呼ぶ。

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{J}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(q_i - q_j)] \quad (\text{A.17})$$

このモデルはミクロカノニカルエントロピーや自由エネルギーの具体的な表式を解析的に求めることのできる数少ない例であり、多くの解析計算や数値実験が行われている。パラメータ  $J$  が正の場合には強磁性的となり、負の場合には反強磁性的となる。ここでは  $J > 0$  の強磁性的な場合にのみ限って話を進める。

### A.2.1 ミクロカノニカル解

ミクロカノニカル解は大偏差理論を用いることで求めることができる [21] が、前提知識が多く必要であり煩雑でもあるので、詳細は参考文献に譲ることにし、ここでは詳しく解説しない。

### A.2.2 カノニカル解

カノニカル分布を用いた計算は Hubbard–Stratonovich 変換 [22, 23] を用いることで計算することができる [24]。分配関数を運動量部分と座標部分に分けると、

$$Z = Z_K Z_V \quad (\text{A.18})$$

$$Z_K = \left[ \int \exp \left[ -\beta \frac{p^2}{2} \right] dp \right]^N = \left( \frac{2\pi}{\beta} \right)^{N/2} \quad (\text{A.19})$$

$$Z_V = \exp \left( -\frac{\beta J N}{2} \right) \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} \exp \left( \frac{\beta J}{2N} \sum_{i,j=1}^N \cos(q_i - q_j) \right) \prod_{i=1}^N dq_i}_{I} \quad (\text{A.20})$$

と書ける。ここでスピンベクトルを

$$\mathbf{m}_i := \begin{bmatrix} \cos q_i \\ \sin q_i \end{bmatrix} \quad (\text{A.21})$$

と定義すると、三角関数の加法定理から

$$\cos(q_i - q_j) = \cos q_i \cos q_j + \sin q_i \sin q_j = \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \quad (\text{A.22})$$

がいえる。従って、積分  $I$  にあらわれる二重和は、和と積の順序を取り替えることによって

$$\sum_{i,j=1}^N \cos(q_i - q_j) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \quad (\text{A.23})$$

$$= \left( \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i \right) \cdot \left( \sum_{j=1}^N \mathbf{m}_j \right) \quad (\text{A.24})$$

$$= \left( \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i \right)^2 \quad (\text{A.25})$$

と書きなおすことができる。これより積分  $I$  は

$$I = \int_{-\pi}^{\pi} \exp \left[ \frac{\beta J}{2N} \left( \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i \right)^2 \right] \prod_{i=1}^N dq_i \quad (\text{A.26})$$

と変形できる。

ここで Hubbard–Stratonovich 変換 [22, 23]

$$\exp \left( \frac{ax^2}{2} \right) = \frac{1}{2\pi a} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left( -\frac{y^2}{2a} + x \cdot y \right) dy \quad (\text{A.27})$$

を適用すると、

$$I = \frac{N}{2\pi\beta J} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{i=1}^N dq_i \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} \exp \left( -\frac{N}{2\beta J} \mathbf{y}^2 + \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{y} \right) \quad (\text{A.28})$$

$$= \frac{N}{2\pi\beta J} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} \exp \left( -\frac{N}{2\beta J} \mathbf{y}^2 \right) \prod_{i=1}^N \left[ \int_{-\pi}^{\pi} dq_i \exp(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{y}) \right] \quad (\text{A.29})$$

$$= \frac{N}{2\pi\beta J} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} \exp \left( -\frac{N}{2\beta J} \mathbf{y}^2 \right) \left[ \int_{-\pi}^{\pi} dq \exp(|\mathbf{y}| \cos q) \right]^N \quad (\text{A.30})$$

$$= \frac{N}{2\pi\beta J} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} \exp \left( -\frac{N}{2\beta J} \mathbf{y}^2 \right) [2\pi I_0(|\mathbf{y}|)]^N \quad (\text{A.31})$$

$$= (2\pi)^N \frac{N}{\beta J} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp \left( -\frac{N}{2\beta J} y^2 \right) I_0(y)^N \quad (\text{A.32})$$

$$= (2\pi)^N \frac{N}{\beta J} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp \left[ N \left( -\frac{1}{2\beta J} y^2 + \ln I_0(y) \right) \right] \quad (\text{A.33})$$

ただし  $I_0(x)$  は第一種変形 Bessel 関数である。

$$I_0(x) := \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \exp(x \cos \theta) d\theta \quad (\text{A.34})$$

粒子数  $N$  が十分大きい場合を考えると、Laplace の方法 (鞍点法)

$$\int e^{Nf(x)} dx \simeq \inf_x \sqrt{\frac{2\pi}{N|f''(x)|}} e^{Nf(x)} \quad (\text{A.35})$$



が使えて、

$$I \propto (2\pi)^N \frac{N}{\beta J} \inf_y \exp \left[ N \left( -\frac{1}{2\beta J} y^2 + \ln I_0(y) \right) \right] \quad (\text{A.36})$$

と評価できる。従って、自由エネルギーを無次元化した  $\Phi(\beta, N) := \beta F(\beta, N) = -\ln Z(\beta, N)$  は  $O(N)$  未満の項および不要な定数を除いて

$$\Phi(\beta, N) = N \left[ \frac{1}{2} \ln(\beta J) + \frac{\beta J}{2} + \inf_y \left( \frac{y^2}{2\beta J} - \ln I_0(y) \right) \right] \quad (\text{A.37})$$

と求まる。



## 付録 B

# ビリアル定理

ここでは古典力学でよく知られているビリアル<sup>\*1</sup>定理

$$\overline{K} = -\frac{1}{2} \overline{\sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i \cdot \mathbf{F}_i} \quad (\text{B.1})$$

を証明する。ただし  $K = \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i^2/2$  は運動エネルギーであり、 $\overline{\phantom{x}}$  は長時間平均をあらわす。特に相互作用ポテンシャルが同次関数型

$$U(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) = \frac{a}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j\|^{n+1} \quad (\text{B.2})$$

である場合には、

$$\overline{K} = \frac{n+1}{2} \overline{U} \quad (\text{B.3})$$

が成り立つことも示そう。

### B.1 証明

ビリアル定理の証明の方針は、ビリアル (virial)

$$G := \sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i \cdot \mathbf{p}_i \quad (\text{B.4})$$

の時間変化の長時間平均が 0 になることを示すことである。

まずビリアルの時間微分を計算すると、

$$\frac{dG}{dt} = \sum_{i=1}^N \frac{d\mathbf{q}_i}{dt} \cdot \mathbf{p}_i + \sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i \cdot \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} \quad (\text{B.5})$$

$$= \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{m} + \sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i \cdot \mathbf{F}_i \quad (\text{B.6})$$

$$= 2K + \sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i \cdot \mathbf{F}_i \quad (\text{B.7})$$

<sup>\*1</sup> 「ビリアル」という単語は、「力」や「エネルギー」といった意味をもつラテン語 “vis” が語源となっており、1870 年に Rudolf Clausius により命名された [25]

であるから、この式の長時間平均をとることを考えると、左辺は

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \frac{dG}{dt} dt = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{G(t) - G(0)}{t} = 0 \quad (\text{B.8})$$

であると分かる。ただし最後の等号ではビリアルが有界であることを仮定した。これより

$$0 = 2\bar{K} + \overline{\sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i \cdot \mathbf{F}_i} \quad (\text{B.9})$$

が成り立つ。これはビリアル定理にほかならない。 ■

## B.2 同次関数型の場合

相互作用ポテンシャルが同次関数型の場合には

$$\mathbf{F}_i = -\nabla_{\mathbf{q}_i} U \quad (\text{B.10})$$

$$= -a(n+1) \sum_{j \neq i}^N (\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j) \|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j\|^{n-1} \quad (\text{B.11})$$

$$= -a(n+1) \sum_{j \neq i}^N \mathbf{F}_{i,j} \quad (\text{B.12})$$

が成り立つ。ただし

$$\mathbf{F}_{i,j} := -a(n+1)(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j) \|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j\|^{n-1} = -\mathbf{F}_{j,i} \quad (\text{B.13})$$

とした。従ってビリアル定理から

$$\bar{K} = -\frac{1}{2} \overline{\sum_{i \neq j=1}^N \mathbf{q}_i \cdot \mathbf{F}_{i,j}} \quad (\text{B.14})$$

がいえる。右辺の二重和を  $i < j$  の和と  $j < i$  の和に分割し、添字を入れ替えることで

$$\sum_{i \neq j=1}^N \mathbf{q}_i \cdot \mathbf{F}_{i,j} = \sum_{i < j} \mathbf{q}_i \cdot \mathbf{F}_{i,j} + \sum_{i > j} \mathbf{q}_i \cdot \mathbf{F}_{i,j} \quad (\text{B.15})$$

$$= \sum_{i < j} \mathbf{q}_i \cdot \mathbf{F}_{i,j} + \sum_{i < j} \mathbf{q}_j \cdot \mathbf{F}_{j,i} \quad (\text{B.16})$$

$$= \sum_{i < j} \mathbf{q}_i \cdot \mathbf{F}_{i,j} - \sum_{i < j} \mathbf{q}_j \cdot \mathbf{F}_{i,j} \quad (\text{B.17})$$

$$= \sum_{i < j} (\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j) \cdot \mathbf{F}_{i,j} \quad (\text{B.18})$$

$$= -(n+1) \sum_{i < j} a \|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j\|^{n+1} \quad (\text{B.19})$$

$$= -(n+1) U(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) \quad (\text{B.20})$$

が成り立つ。これより

$$\bar{K} = \frac{n+1}{2} \bar{U} \quad (\text{B.21})$$

を得る。 ■

## 参考文献

- [1] P. Hertel and W. Thirring, A soluble model for a system with negative specific heat, *Annals of Physics* **63**, 520 (1971).
- [2] D. H. Gross and E. Votyakov, Phase transitions in “small” systems, *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems* **15**, 115 (2000).
- [3] F. Leyvraz and S. Ruffo, Ensemble inequivalence in systems with long-range interactions, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **35**, 285 (2002).
- [4] W. Thirring, Systems with negative specific heat, *Zeitschrift für Physik* **235**, 339 (1970).
- [5] D. Lynden-Bell and R. Wood, The gravo-thermal catastrophe in isothermal spheres and the onset of red-giant structure for stellar systems, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **138**, 495 (1968).
- [6] A. Campa, A. Giansanti, D. Mukamel, and S. Ruffo, Dynamics and thermodynamics of rotators interacting with both long-and short-range couplings, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **365**, 120 (2006).
- [7] A. Ramírez-Hernández, H. Larralde, and F. Leyvraz, Systems with negative specific heat in thermal contact: Violation of the zeroth law, *Physical Review E* **78**, 061133 (2008).
- [8] A. Ramírez-Hernández, H. Larralde, and F. Leyvraz, Violation of the zeroth law of thermodynamics in systems with negative specific heat, *Physical review letters* **100**, 120601 (2008).
- [9] C. Tsallis, Nonextensive thermostatics and fractals, *Fractals* **3**, 541 (1995).
- [10] M. Kac, G. Uhlenbeck, and P. Hemmer, On the van der waals theory of the vapor-liquid equilibrium. i. discussion of a one-dimensional model, *Journal of Mathematical Physics* **4**, 216 (1963).
- [11] 日本機械学会, editor, 機械工学便覧 基礎編  $\alpha$  6 計算力学, 日本機械学会, 2007.
- [12] B. Leimkuhler and S. Reich, Simulating hamiltonian dynamics, volume 14, Cambridge University Press, 2004.
- [13] W. C. Swope, H. C. Andersen, P. H. Berens, and K. R. Wilson, A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters, *The Journal of Chemical Physics* **76**, 637 (1982).
- [14] J. Gans and D. Shalloway, Shadow mass and the relationship between velocity and momentum in symplectic numerical integration, *Physical Review E* **61**, 4587 (2000).
- [15] K. Levenberg, A method for the solution of certain non-linear problems in least squares, *Quarterly of Applied Mathematics* **2**, 164 (1944).
- [16] D. W. Marquardt, An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters, *Journal of the Society for Industrial & Applied Mathematics* **11**, 431 (1963).
- [17] gnuplot 4.6 – an interactive plotting program, page 62, [http://www.gnuplot.info/docs\\_4.6/gnuplot.pdf](http://www.gnuplot.info/docs_4.6/gnuplot.pdf).

- [18] S. A. Cannas, A. De Magalhães, and F. A. Tamarit, Evidence of exactness of the mean-field theory in the nonextensive regime of long-range classical spin models, *Physical Review B* **61**, 11521 (2000).
- [19] T. Mori, Analysis of the exactness of mean-field theory in long-range interacting systems, *Physical Review E* **82**, 060103 (2010).
- [20] A. Campa, T. Dauxois, and S. Ruffo, Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions, *Physics Reports* **480**, 57 (2009).
- [21] J. Barré, F. Bouchet, T. Dauxois, and S. Ruffo, Large deviation techniques applied to systems with long-range interactions, *Journal of statistical physics* **119**, 677 (2005).
- [22] R. L. Stratonovich, On a Method of Calculating Quantum Distribution Functions, *Soviet Physics Doklady* **2**, 416 (1957).
- [23] J. Hubbard, Calculation of partition functions, *Physical Review Letters* **3**, 77 (1959).
- [24] M. Antoni and S. Ruffo, Clustering and relaxation in hamiltonian long-range dynamics, *Physical Review E* **52**, 2361 (1995).
- [25] R. Clausius, Xvi. on a mechanical theorem applicable to heat, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **40**, 122 (1870).

# 謝辞

まずはじめに、指導教員の清水明先生には「長距離相互作用系」という大変興味深い研究テーマを頂き、またこのような挑戦的なテーマに対して多くの議論と指摘を頂いたことに大変感謝いたします。

東京大学宮下研の森貴司氏には長距離相互作用系の基本的な考え方や現状でどのように理解されているのかなどの事柄をお教えいただき、また今回の研究内容に対しても、様々な有益なアドバイスを頂きました。特に本修士学位論文の内容にも丁寧に目を通していただき、貴重なご意見を多く頂き、より完成度の高い内容に纏め上げることができました。ここに謝意を表したいと思います。

最後に、多くの議論に付きあっていただいた同研究室の杉浦祥氏、李凡氏、長谷川直紀氏に感謝をしたいと思います。