

二つの縮約された運動の記述について

(12月26日 受理)

九大理 藤坂 博一

Mori¹⁾によって導入された Heisenberg picture での射影演算子の方法による運動方程式系の縮約に関して、近年いくつかの発展が見られた。Mori の方法は本質的には、注目している物理量 A とそれ以外の物理量 A' に対するそれぞれの運動方程式で、 A' を A の関数 (A の過去の値を含む) として求め、それを A の式に代入すれば得られる。このとき過去の履歴が damping を与え、 A' の初期値が揺動力を与えることになる。

一方、最近 Tokuyama と Mori²⁾によって提案された Heisenberg picture での周波数変調型の運動方程式の遞減は、変数 A' を積分して了っているはずなのに過去の履歴が表われない。この点で筆者には何か奇妙な感じがしていたが、周波数変調型は物理的にどのような操作で A' を消去しているのか理解出来たようなので報告したい。

平衡系を考える。力学量 $A(t)$ (平均値はぬきさっている) の運動方程式は系の Liouville 演算子を L とすると、

$$\frac{d}{dt} A(t) = iLA(t), \quad (1)$$

と書ける。一般に、(1)の右辺は $A(t)$ と $A'(t)$ の線型結合で書ける。ここで $A'(t)$ は一般に $A(t)$ の非線型結合、 $A(t)$ 以外の自由度およびそれらの間の結合した複雑な関数である。これらをまとめて $A'(t)$ とした。 $A'(t)$ をこのように定義すると(1)は、

$$\frac{d}{dt} A(t) = \hat{K}_{11} \cdot A(t) + \hat{K}_{12} \cdot A'(t), \quad (2)$$

となる。更に $A'(t)$ の運動方程式は、

$$\frac{d}{dt} A'(t) = iLA'(t) = \hat{K}_{21} \cdot A(t) + \hat{K}_{22} \cdot A'(t), \quad (3)$$

と書ける。(古典、量子力学系に対して。) 結合行列 \hat{K}_{ij} ($i, j = 1, 2$) はスカラーな定数である。更に $A'(t)$ は、

$$(A(0), A^*(0)) = 0, \quad (4)$$

を満すように選ばれているとしよう。* は Hermite 共役を表わす。ここで (,) は正準相関

$$(X, Y) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta \langle e^{\lambda \mathcal{M}} X e^{-\lambda \mathcal{M}} Y \rangle d\lambda, \quad (5)$$

を表わす。⟨...⟩ は正準集団 $e^{-\beta \mathcal{H}}$ についての平均である。(4) は一般性を失う条件ではない。(2), (3) より

$$(\dot{A}(0), A^*(0)) = \hat{K}_{11} \cdot (A(0), A^*(0)), \quad (6.1)$$

$$(\dot{A}(0), A'^*(0)) = \hat{K}_{12} \cdot (A'(0), A'^*(0)), \quad (6.2)$$

$$(\dot{A}'(0), A^*(0)) = \hat{K}_{21} \cdot (A(0), A^*(0)), \quad (6.3)$$

$$(\dot{A}'(0), A'^*(0)) = \hat{K}_{22} \cdot (A'(0), A'^*(0)), \quad (6.4)$$

(6.1) より \hat{K}_{11} は揺ぎの collective な運動を表わす振動数行列 $i\omega^{\wedge 1}$ に他ならない。

(6.2), (6.3) より $(\dot{A}(0), A'^*(0))^* = (-\dot{A}'(0), A^*(0))$ を用いると

$$(A'(0), A'^*(0)) \cdot \hat{K}_{12}^* = -\hat{K}_{21} \cdot (A(0), A^*(0)), \quad (7)$$

なる関係が導びける。

まず, Mori による記憶関数型の縮約の方法を見てみよう。注目していない部分は "積分する" というのは昔より非平衡統計力学の鉄則³⁾である。我々は今, $A(t)$ のみに注目しているので, $A'(t)$ は積分されねばならない。実際に(3)より $A'(t)$ を積分して,

$$A'(t) = e^{\hat{K}_{22} t} A'(0) + \int_0^t e^{\hat{K}_{22}(t-s)} \hat{K}_{21} \cdot A(s) ds. \quad (8)$$

これを $A(t)$ の式(2)に代入すると,

$$\frac{d}{dt} A(t) = i \hat{\omega} \cdot A(t) - \int_0^t \varphi(t-s) \cdot A(s) ds + f(t), \quad (9)$$

を得る。ここで

$$i \hat{\omega} \equiv (\dot{A}(0), A^*(0)) \cdot (A(0), A^*(0))^{-1}; \quad (10.1)$$

$$\varphi(s) \equiv -\hat{K}_{12} \cdot e^{s \hat{K}_{22}} \cdot \hat{K}_{21}, \quad (10.2)$$

$$f(t) \equiv \hat{K}_{12} \cdot e^{t \hat{K}_{22}} \cdot A'(0), \quad (10.3)$$

$$(f(t), A^*(0)) = 0, \quad (10.4)$$

である。

第二種の揺動-散逸定理は、

$$\begin{aligned} & (f(s), f^*(0)) \cdot (A(0), A^*(0))^{-1}, \\ &= \hat{K}_{12} \cdot e^{s \hat{K}_{22}} \cdot (A'(0), A^*(0)) \cdot \hat{K}_{12}^* \cdot (A(0), A^*(0))^{-1}, \\ &= -\hat{K}_{12} \cdot e^{s \hat{K}_{22}} \cdot \hat{K}_{21}, \end{aligned} \quad \longleftarrow (7) \quad (11)$$

より、

$$\varphi(s) = (t(s), f^*(0)) \cdot (A(0), A^*(0))^{-1}, \quad (12)$$

と求められる。(10.1), (10.4), (12)の関係を持つ式(9)は揺動力 $f(t)$ の explicit な表式を別にすれば、Mori の与えた一般式と同じ結果を与える。

次に、周波数変調型の縮約の方法について述べよう。行列 \hat{K}_{ij} からなる行列 \hat{K} を導入すると(2), (3)は、

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} A(t) \\ A'(t) \end{pmatrix} = \hat{K} \cdot \begin{pmatrix} A(t) \\ A'(t) \end{pmatrix}, \quad (13)$$

のように書ける。この方程式は解けて、

$$A(t) = \hat{U}_{11}(t) \cdot A(0) + \hat{U}_{12}(t) \cdot A'(0), \quad (14)$$

$$A(t) = \hat{U}_{21}(t) \cdot A(0) + \hat{U}_{22}(t) \cdot A'(0), \quad (15)$$

となる。ただし、 $\hat{U}_{ij}(t)$ は、

$$\begin{aligned} \hat{U}_{11}(0) &= 1, & \hat{U}_{12}(0) &= 0, \\ \hat{U}_{21}(0) &= 0, & \hat{U}_{22}(0) &= 1, \end{aligned} \quad (16)$$

を初期値に持つ行列

$$\hat{U}(t) \equiv e^{t\hat{K}}, \quad (17)$$

の sub-行列である (14) より、 $A(0)$ を解くと、

$$A(0) = \hat{U}_{11}^{-1}(t) \cdot [A(t) - \hat{U}_{12}(t) \cdot A'(0)], \quad (18)$$

これを (15) に代入して、

$$A(t) = \hat{U}_{21}(t) \cdot \hat{U}_{11}^{-1}(t) \cdot A(t) + [\hat{U}_{22}(t) - \hat{U}_{21}(t) \cdot \hat{U}_{11}^{-1}(t) \cdot \hat{U}_{12}(t)] \cdot A'(0) \quad (19)$$

従って、注目していない量 $A'(t)$ が注目している量 A の関数として求められたことになる。(19) は (8) に対応した式になっていることは明らかである。この表式を (2) に代入すると、

$$\frac{d}{dt} A(t) = [i\hat{\omega} - \Psi(t)] \cdot A(t) + g(t), \quad (20)$$

を得る。ここで、 $i\hat{\omega}$ は (10.1) のそれと同じであり、又、

$$\Psi(t) \equiv -\hat{K}_{12} \cdot \hat{U}_{21}(t) \cdot \hat{U}_{11}(t), \quad (21.1)$$

$$\begin{aligned} g(t) &\equiv \hat{K}_{12} \cdot [\hat{U}_{22}(t) - \hat{U}_{21}(t) \cdot \hat{U}_{11}^{-1}(t) \cdot \hat{U}_{12}(t)] \cdot A'(0), \\ &= [\Psi(t) \cdot \hat{U}_{12}(t) + \hat{K}_{12} \cdot \hat{U}_{22}(t)] \cdot A'(0), \end{aligned} \quad (21.2)$$

$$(g(t), A^*(0)) = 0, \quad (21.3)$$

である。

$\Psi(t)$ と $g(t)$ の関係をみるために、(21.1) を微分すると、

$$\begin{aligned}\dot{\Psi}(t) &= - [\hat{K}_{12} \cdot \dot{\hat{U}}_{21}(t) + \Psi(t) \cdot \dot{\hat{U}}_{11}(t)] \cdot \hat{U}_{11}^{-1}(t), \\ &= - [\Psi(t) \cdot \hat{U}_{12}(t) + \hat{K}_{12} \cdot \hat{U}_{22}(t)] \cdot \hat{K}_{21} \cdot \hat{U}_{11}^{-1}(t),\end{aligned}\quad (22)$$

となる。ただし、

$$\dot{\hat{U}}_{ij}(t) = \sum_{\ell=1,2} \hat{U}_{i\ell}(t) \cdot \hat{K}_{\ell j}, \quad (23)$$

を用いた。更に、 $\psi(t)$ を

$$\psi(t) \equiv (g(t), g^*(0)) \cdot (A(t), A^*(0))^{-1}, \quad (24)$$

で定義すると、 $\hat{U}_{11}(t) = (A(t), A^*(0)) \cdot (A(0), A^*(0))^{-1}$ を用いて、(24)は

$$\begin{aligned}\psi(t) &= [\Psi(t) \cdot \hat{U}_{12}(t) + \hat{K}_{12} \cdot \hat{U}_{22}(t)] \cdot (A(0), A^*(0)), \\ &\quad \cdot \hat{K}_{12} \cdot (A(0), A^*(0)) \cdot \hat{U}_{11}^{-1}(t), \\ &= - [\Psi(t) \cdot \hat{U}_{12}(t) + \hat{K}_{12} \cdot \hat{U}_{22}(t)] \cdot \hat{K}_{21} \cdot \hat{U}_{11}^{-1}(t), \quad \leftarrow (7),\end{aligned}\quad (25)$$

と書ける。従って (22), (25)より、 $\Psi(0)=0$ を考慮して、

$$\Psi(t) = \int_0^t \psi(s) ds, \quad (26)$$

の関係を得る。(21.3), (24), (26) の関係を持つ式 (20)は揺動力 $g(t)$ の

explicit な表式を別にすれば Tokwiyamaと Mori によって提案された周波数変調型の縮約の一般論と同じものを与える。

最後に、周波数変調型の縮約の方法は、記憶関数型とは異ったやり方で注目していない部分を“積分” ((15), (19)) していることがわかった。ここに述べた小論で新し

いものが出るというわけではないが、二つの型の縮約の仕方の相違はある程度理解出来ると思う。

文 献

- 1) H. Mori, Prog. Theor. Phys. 33 (1965), 423
- 2) M. Tokuyama and H. Mori, Prog. Theor. Phys. 55 (1976), No2
- 3) R. Zwanzig. J. Chem. Phys. 33 (1960), 1338 ;
Phys. Rev. 124 (1961), 983

One - spin - flip Ising model における 非 線 形 緩 和

金沢大理 MC 池 田 博

One - spin - flip Ising model^{1), 2)} における critical slowing down²⁾ の研究にはいくつかの方法がある。その一つは高温展開法^{2), 3)} であり、他は計算機 simulation によるモンテ・カルロ法⁴⁾ である。その他にも厳密な不等式^{6), 7)} や dynamic scaling⁴⁾ があるが、numerical な方法は上の二つである。

最近 Rácz が dynamic scaling law⁵⁾ を基礎として linear と nonlinear の critical slowing down に対する関係式 $\Delta^{\ell} - \Delta^{n \cdot \ell} = \beta$ を導いた。⁸⁾ ここで Δ^{ℓ} , $\Delta^{n \cdot \ell}$ はそれぞれ linear と nonlinear の relaxation time⁸⁾ に関する臨界指数、 β は磁化の臨界指数、すなわち

$$\tau_{\ell} \sim \varepsilon^{-\Delta^{\ell}}, \quad \tau_{n \cdot \ell} \sim \varepsilon^{-\Delta^{n \cdot \ell}}, \quad M \sim (-\varepsilon)^{\beta}$$

$$\varepsilon = \frac{T}{T_c} - 1 .$$

これに対して one - spin - flip Ising model で今までに得られた結果は、 $\beta = 1/8$ の 2次元 lattice 上で高温展開法では $\Delta^{\ell} \sim \Delta^{n \cdot \ell} \sim 2.0$ ^{2), 9)}, モンテ・カルロ法でも $\Delta^{\ell} \sim \Delta^{n \cdot \ell} \sim 1.9$ ⁴⁾ であり、わずかな指数の差 1/8 は判別できていない。しかし、実は高温展