孤立系の平均場ダイナミクスにおける非線形応答

∘ 小川駿, 山口義幸, (京都大学大学院情報学研究科数理工学専攻)

1 はじめに

ハミルトニアン平均場 (HMF) モデル (全結合型 XY モデル)

$$H_N = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2} - \frac{1}{2N}\sum_{i\neq j}^{N} \cos(q_i - q_j) + h(t)\sum_{i=1}^{N}\cos q_i, \quad q_i \in [-\pi,\pi),\ p_i \in \mathbb{R},\ i = 1,2,\cdots,N, \tag{1}$$

において, 外場 $h(t)$ に対する秩序変数 $\left(M_x^N, M_y^N\right)^{\mathrm{T}} = \sum_{i=1}^{N}\left(\cos q_i, \sin q_i\right)^{\mathrm{T}}/N$ の $t\to\infty$ における振る舞いを求める. 各空間成分 q_i については各々周期境界条件が課されている. この系は円周上で N 個の粒子が相互作用しながら動き回る系と見なせ, 秩序変数 $M = \sqrt{M_x^{N2} + M_y^{N2}}$ は円周上でどれほど粒子が偏っているのかを表している. また, この系は全結合型 XY モデルとも見なせ, その意味で長距離相互作用系のトイモデルの一つであり, 近年, 長距離相互作用系の非平衡統計力学やダイナミクスの研究でよく用いられている [1].

粒子数 N が大きい極限で, この系の平均場ダイナミクスは一体分布関数 $f(q,p,t)$ で記述され, この一体分布関数は Vlasov 方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \{\mathscr{H}[f], f\} = 0, \quad \text{ただし, Poisson 括弧 } \{\circ,\bullet\} = \frac{\partial\circ}{\partial p}\frac{\partial\bullet}{\partial q} - \frac{\partial\circ}{\partial q}\frac{\partial\bullet}{\partial p}, \tag{2}$$

に従って時間発展する [2]. $\mathscr{H}[f]$ は有効ハミルトニアンであり, 以下の様に定義される.

$$\mathscr{H}[f] = \frac{p^2}{2} + \mathscr{V}[f](q,t) - h\cos q, \quad \mathscr{V}[f] = -\int_{-\pi}^{\pi} dq' \int_{-\infty}^{\infty} \cos(q-q') f(q',p',t)\, dp', \tag{3}$$

さらに $N\to\infty$ における秩序変数は次の様に定義される.

$$M_x[f] = \iint \cos q f(q,p,t)\, dq dp, \quad M_y[f] = \iint \sin q f(q,p,t)\, dq dp, \quad M = \sqrt{M_x[f]^2 + M_y[f]^2}. \tag{4}$$

非線形応答理論に入る前に, 平均場ダイナミクスの線形応答理論 [6, 7] を簡単に紹介する. 外場 $h(t)$ は, $h(t) = h\Theta(t)$ ($\Theta(t)$ はヘヴィサイド関数) であるとし, 初期状態は外場無しの場合の安定定常解 $f_{\mathrm{I}}(p)$ であるとする. 外場をかけることによって生じた $f_{\mathrm{I}}(p)$ からのずれを $f_1(q,p,t)$ とし, h と f_1 の二次以上の項を無視すると線形化方程式

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = -\{\mathscr{H}[f_0], f_1\} - \{\mathscr{V}[f_1] + h\cos q, f_0\} \tag{5}$$

を得る. これを形式的に陰的に解き, 両辺に $\cos q$ をかけて秩序変数 $M_x[f_1]$ の自己無撞着方程式にする. さらにラプラス変換 $\tilde{a}(\omega) = \int_0^\infty a(t)e^{i\omega t}dt$ を施して代数方程式に帰着させてから解き, 逆ラプラス変換を行うと, 秩序変数の応答

$$M_x[f_1](t) = \frac{1}{2\pi}\oint_{\Gamma} \frac{1-D(\omega)}{D(\omega)} \tilde{h}(\omega) e^{-i\omega t}\, d\omega, \quad D(\omega) = 1 + \pi\int_{\mathbb{R}} \frac{f_{\mathrm{I}}'(p)}{p-\omega}\, dp \tag{6}$$

を得る. ただし, Γ はブロムウィッチパスである. $D(\omega)$ は分散関数 (プラズマ物理では誘電関数) と呼ばれるものであり, 今, f_{I} は安定定常解なので, 分散関係 $D(\omega) = 0$ の根は全て下半平面にある. また $\tilde{h}(\omega)$ は外場 $h(t)$ のラプラス変換であり, $h(t) = h\Theta(t)$ なので, $\tilde{h}(\omega) = -h/i\omega$ である. 下半平面にある極からの寄与は全て指数関数的に減衰するので, 長時間残るのは 外場のラプラス変換 $\tilde{h}(\omega) = -h/i\omega$ の $\omega = 0$ からの寄与のみである. 特に分散関係の下半平面の根による減衰を Landau 減衰と言う [3]. 結局, 線形応答の $t\to\infty$ は

$$M_x[f_1](t) \to \chi_{\mathrm{I}} h + O\left(h^3\right), \quad \chi_{\mathrm{I}} = \frac{1-D(0)}{D(0)}, \quad D(0) = 1 + \pi\int_{\mathbb{R}} \frac{f_{\mathrm{I}}'(p)}{p}dp \tag{7}$$

である. χ_{I} を孤立感受率と呼ぶ. ナイーブな高次摂動を用いると $O\left(h^2\right)$ の項は消えるので, 次の項は $O\left(h^3\right)$ である.

本研究の目標は秩序変数の外場 $h(t)$ に対する非線形応答を求めることである. ただし, ここではナイーブな高次の摂動展開は使わず, この線形応答の公式 (7) では (線形な)Landau 減衰が速やかに進むことが仮定されている, という事実に着目する. 実際には線形な Landau 減衰が速やかに進行せず, 非線形効果が現れることがある [4]. 本研究では 1 次元プラズマ系の非線形 Landau 減衰の解析に用いられた遷移 (T-) 線形化の手法を外場付きの HMF モデルに応用し, $t\to\infty$ における秩序変数の非線形応答を求める. また, この線形応答理論やナイーブな高次摂動展開による非線形応答理論は臨界点直上では用いることはできないが, T-線形化による非線形応答理論は臨界点直上でも使えることを紹介する.

2 遷移線形化, 漸近成分の自己無撞着方程式

T-線形化とは簡単に言うと, 初期の定常解 $f_{\rm I}$ の周りではなく, 長時間後の定常解 $f_{\rm A}$ の周りで行う "線形化" である. 平均場 $\mathcal{V}[f]$ を遷移 (T-) 成分 $\mathcal{V}_{\rm T}$ と漸近 (A-) 成分 $\mathcal{V}_{\rm A}=-M_{x,{\rm A}}\cos q$ に分ける. 問題は A-成分 $f_{\rm A}$ をどうやって $f(q,p,t)$ から抽出するかであるが, Bohr 変換 [4]

$$\mathscr{B}_\omega[a]\equiv\lim_{\sigma\to\infty}\frac{1}{\sigma}\int_0^\sigma a(t)e^{-i\omega t}\,dt, \tag{8}$$

を用いる. ここでは $f_{\rm A}$ は定常であるとするので $\omega=0$ とする. つまり, $f_{\rm A}(q,p)=\mathscr{B}_0\left[f\right]$ であり, $M_{x,{\rm A}}=\mathscr{B}_0\left[M_x\left[f\right]\right]=M_x[f_{\rm A}]$ である. ここで長時間後の有効ハミルトニアンを

$$\mathscr{H}_{\rm A}(q,p)=p^2/2-\left(M_{x,{\rm A}}+h\right)\cos q \tag{9}$$

で表しておく. これらを用いて T-線形化された Vlasov 方程式を求めると,

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\left\{\mathscr{H}_{\rm A},f\right\}+\left\{\mathcal{V}_{\rm T},f_{\rm I}\right\}=0 \tag{10}$$

を得る. ここでは $\left\{\mathcal{V}_{\rm T}(q,t),f-f_{\rm I}\right\}$ を微小であるとして無視をした. また T-"線形化" と言うが, 第二項に非線形性が残っている. T-線形化された Vlasov 方程式を形式的に陰的に解く:

$$f(q,p,t)=e^{-t\mathscr{L}_{\rm A}}f_0(q,p)-\epsilon\int_0^t e^{-(t-s)\mathscr{L}_{\rm A}}\left(\left\{\mathcal{V}_{\rm T},f_{\rm I}\right\}\right)\,ds,\quad \mathscr{L}_{\rm A}\bullet=-\{\mathscr{H}_{\rm A},\bullet\}. \tag{11}$$

ここで $\phi_{\rm A}^t$ はハミルトニアン $\mathscr{H}_{\rm A}(q,p)$ に関するハミルトニアンフローであるとすると, 第一項は $f_0\left(\phi_{\rm A}^{-t}(q,p)\right)$ と表せる. 式 (11) を $f(q,p,t)=f_{\rm ON}(q,p,t)+f_{\rm L}(q,p,t)$;

$$f_{\rm ON}(q,p,t)=f_0\left(\phi_{\rm A}^{-t}(q,p)\right),\quad f_{\rm L}(q,p,t)=\int_0^t\left[\frac{\partial\mathcal{V}_{\rm T}}{\partial q}(q,t)\frac{\partial f_{\rm I}}{\partial p}\right]_{\phi_{\rm A}^{-(t-s)}(q,p)}ds, \tag{12}$$

で表す. ただし $f_{\rm ON}$ は O' Neil 項, $f_{\rm L}$ は Landau 項と呼ばれる [4]. この分解を用いて, まず $f_{\rm A}$ を次の様に分解する:

$$f_{\rm A}(q,p)=\mathscr{B}_0\left[f_{\rm ON}(q,p,t)\right]+\mathscr{B}_0\left[f_{\rm L}(q,p,t)\right]. \tag{13}$$

これ以降の計算を進めるには, まず, 可積分な有効ハミルトニアン $\mathscr{H}_{\rm A}$ から作用角変数 (θ,J) を導入し, さらに $\mathscr{B}_0[f]$ にある長時間平均を次のエルゴード公式を用いて空間平均で置き換えると良い.

Prop. 1 (エルゴード公式 [4]) 任意の積分可能な関数 $\psi(q,p)$ とほとんど全ての J について次の等式が成立する:

$$\mathscr{B}_0\left[\psi\left(\phi_{\rm A}^{-t}(q,p)\right)\right]=\lim_{\sigma\to\infty}\frac{1}{\sigma}\int_0^\sigma\psi\left(\phi_{\rm A}^{-t}(q,p)\right)\,dt=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\psi\left(q(\theta,J),p(\theta,J)\right)\,d\theta\equiv\langle\psi\rangle_J. \tag{14}$$

そうすると, A-成分のうち, O' Neil 項由来の部分は次の様に求められる:

$$\mathscr{B}_0\left[f_{\rm ON}(q,p,t)\right]=\mathscr{B}_0\left[f_{\rm I}\left(\phi_{\rm A}^{-t}(q,p)\right)\right]=\langle f_{\rm I}\rangle_J. \tag{15}$$

一方, Landau 項由来の部分は

$$\mathscr{B}_0\left[f_{\rm L}(q,p,t)\right]=\lim_{\sigma\to\infty}\int_0^\sigma dt\int_0^t\left[\frac{\partial\mathcal{V}_{\rm T}}{\partial q}(q,s)\frac{\partial f_0}{\partial p}\right]_{\phi_{\rm A}^{-(t-s)}(q,p)}ds \tag{16}$$

である. $u=t-s$ として積分変数 t,s を u,s に変換すると, Landau 項由来の漸近成分は各 s において, エルゴード公式 (14) を用いて次の様に変形できる:

$$\mathscr{B}_0\left[f_{\rm L}(q,p,t)\right]=\lim_{\sigma\to\infty}\int_0^\sigma ds\frac{1}{\sigma}\int_0^\sigma\left[\frac{\partial\mathcal{V}_{\rm T}}{\partial q}(q,s)\frac{\partial f_0}{\partial p}\right]_{\phi_{\rm A}^{-u}(q,p)}du=\int_0^\infty\left\langle\frac{\partial\mathcal{V}_{\rm T}}{\partial q}(q,t)\frac{\partial f_0}{\partial q}\right\rangle_J ds. \tag{17}$$

ここで $f_{\rm I}$ は p について偶であったことと, 等 J 線は変換 $p \mapsto -p$ に関して不変であったことを思い出すと, $\mathscr{B}_0\left[f_{\rm L}(q,p,t)\right] = 0$ であり, 結局, $f_{\rm A}(q,p) = \langle f_{\rm I}\rangle_J(q,p)$ であることが示された. つまり, $f_{\rm A}(q,p)$ は初期の定常分布 $f_{\rm I}$ を $\mathscr{H}_{\rm A}$ の等 J 線で再分配したものである. これは, ある初期の非定常状態からどの定常解へ行くのかを予想する際に, 一粒子エネルギーの保存を仮定して得られた結果 [5] の理論的導出になっている. 結局, $M_{x,{\rm A}}$ を決める自己無撞着方程式は,

$$M_{x,{\rm A}} = M_x\left[\langle f_{\rm I}\rangle_J\right] = \iint \cos q \langle f_{\rm I}\rangle_J(q,p)\ dqdp = \iint \langle\cos q\rangle_J(q,p) f_{\rm I}(q,p)\ dqdp \tag{18}$$

であることが示された. 三つ目の等号は変換 $(q.p) \mapsto (\theta, J)$ が正準変換であることから簡単に示される.

3 非線形応答

ここで $M_{x,{\rm A}}$ を単に $M_{\rm A}$ で表す. 自己無撞着方程式 (18) の右辺を $M_{\rm A}$ と h が小さいとして $M_{\rm A}+h$ で展開すると次の式を得る:

$$D(0)(M_{\rm A}+h) - h + L_{3/2}(M_{\rm A}+h)^{3/2} = O\left((M_{\rm A}+h)^{7/4}\right). \tag{19}$$

ただし, $L_{3/2}$ は次の様に求められる:

$$L_{3/2} = \frac{f_{\rm I}''(0)}{\sqrt{M_{\rm A}+h}} \iint \langle\cos q\rangle_J^2\ dqdp = 16 f_{\rm I}''(0)\left[\int_0^1 kK(k)\left(\frac{2E(k)}{K(k)}-1\right)^2\ dk + \int_1^\infty K(1/k)\left(2k^2\frac{E(1/k)}{K(1/k)} - 2k^2 + 1\right)^2 dk\right]. \tag{20}$$

ただし, $f_{\rm I}'' = d^2 f_{\rm I}/dp^2$, $K(k)$, $E(k)$ は各々第一種, 第二種完全楕円積分であり, $k = \sqrt{(\mathscr{H}_{\rm A}+M_{\rm A}+h)/2(M_{\rm A}+h)}$ である. またこの最右辺は $\sqrt{M_{\rm A}+h}$ 依存性が無いことに注意しておく.

自己無撞着方程式 (19) において, $(M_{\rm A}+h)^{3/2}$ も高次項として無視すると

$$D(0)(M_{\rm A}+h) - h = O\left((M_{\rm A}+h)^{3/2}\right) \Rightarrow M = \chi_{\rm I} h + O\left(h^{3/2}\right),\ \chi_{\rm I} = \frac{1-D(0)}{D(0)} \tag{21}$$

となり, 線形応答理論の公式 (7) に帰着するが, 次のオーダー $O\left(h^{3/2}\right)$ がナイーブな摂動展開から得られる非線形応答 $O\left(h^3\right)$ とは異なる. 数値シミュレーションは新しく得た結果 (21) とよく一致している.

この手法は臨界点直上でも使えることを強調しておく. HMF 系は熱平衡状態において高温側 $T > T_{\rm c}$ では無秩序状態 $M = 0$ であり, 臨界温度 $T = T_{\rm c} = 1/2$ で二次相転移が起こり, $T < T_{\rm c}$ では秩序状態 $M > 0$ が実現される [1]. 臨界点 $f_{\rm c}(p) = e^{-p^2/2T_{\rm c}}/\sqrt{(2\pi)^3 T_{\rm c}}$ の場合について考察する. 臨界温度 $T = T_{\rm c}$ では $D(0) = 0$ であるので, $-h + L_{3/2}(M_{\rm A}+h)^{3/2} = O\left((M_{\rm A}+h)^{7/4}\right)$ となり, これを解くと $M_{\rm A} = h^{2/3}/(L_{3/2}^{2/3}) + O\left(h^{5/6}\right)$ を得る. これは平衡状態に限らず, 二次相転移を起こす定常解の任意の族についても成立する. 臨界点で $M \sim h^{1/\delta}$ とスケールされるとすると, 臨界指数は $\delta = 3/2$ であることが分かる. 通常の平衡統計力学から得られる臨界指数は $\delta = 3$ である.

参考文献

[1] A. Campa, T. Dauxois, and S. Ruffo, *Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions*, Phys. Rep. **480**, 57 (2009).

[2] W. Braun and K. Hepp, *The Vlasov dynamics and its fluctuations in the* $1/N$ *limit of interacting classical particles*, Commun. Math. Phys. **56**, 101 (1977).

[3] L. D. Landau, *On the vibration of the electronic plasma*, J. Phys. U.S.S.R. **10**, 25 (1946). *Collected papers of L. D. Landau* edited by D. T. Haar (Pergamon Press, Oxford, 1965).

[4] C. Lancellotti and J. J. Dorning, *Critical Initial States in Collisionless Plasmas*, Phys. Rev. Lett. **81**, 5137 (1998); *Nonlinear Landau damping*, Trans. Th. Stat. Phys. **38**, 1 (2009).

[5] P. de Buyl, D. Mukamel, and S. Ruffo, *Self-consistent inhomogeneous steady states in Hamiltonian mean field dynamics*, Phys. Rev. E **84**, 061151 (2011).

[6] A. Patelli, S. Gupta, C. Nardini, and S. Ruffo, *Linear response theory for long-range interacting systems in quasistationary states*, Phys. Rev. E **85**, 021133 (2012).

[7] S. Ogawa and Y. Y. Yamaguchi, *Linear response theory in the Vlasov equation for homogeneous and for inhomogeneous quasistationary states*, Phys. Rev. E **85**, 061115 (2012).