

Kawasaki dynamics における metastability について

- エネルギー最小状態への転移 -

千代延研究室 高木 悠介

本論文の目的

Glauber dynamics と Kawasaki dynamics with open boundary という 2 つのランダム過程における metastability について考察する .

Metastability

あるランダム過程がエネルギーが local minimum (最小でない極小値) である状態からエネルギーの峠を超えてエネルギーが global minimum (最小値) である状態へと転移する様子のことを metastability という . この転移に際して最低限越えねばならないエネルギーの峠の高さのことを communication height と呼ぶ .

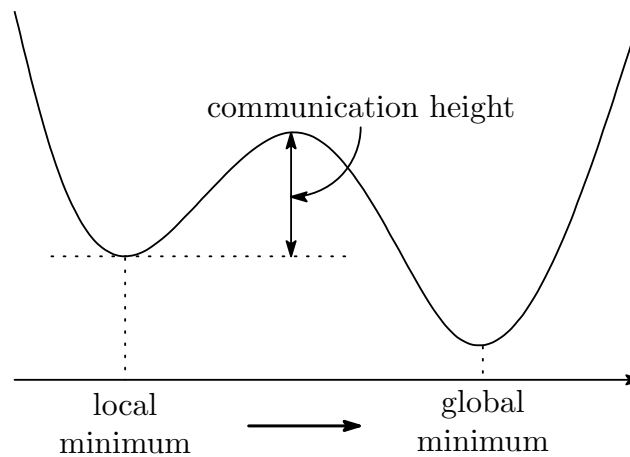


図 1 metastability

2次元イジングモデルにおける Glauber dynamics

2次元イジングモデルは、強磁性体のモデルである . このイジングモデルでは、2次元格子の上のある程度大きく有限の正方形の領域内の各サイト上に -1 (下向き) と $+1$ (上向き) のスピンの配置されている . また、Glauber dynamics は、連続時間マルコフ連鎖を用いてイジングモデルの時間発展を表現した確率モデルである . この Glauber dynamics では、スピンの値を 1 ヶ所反転させることを 1 回の遷移としている .

$\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^2$ を原点を中心とする巨大であるが有限の正方形の領域とする．サイト $x \in \Lambda$ に対して, $\sigma(x) \in \{-1, +1\}$ とする． $\sigma(x) = -1$ ならば, サイト x に -1 スピンが配置されていることを, $\sigma(x) = +1$ ならば, サイト x に $+1$ スピンが配置されていることを表す．格子スピン配置を $\sigma = (\sigma(x); x \in \Lambda) \in \mathcal{X} = \{-1, +1\}^\Lambda$ と表す．各配置 $\sigma \in \mathcal{X}$ は, ハミルトニアン

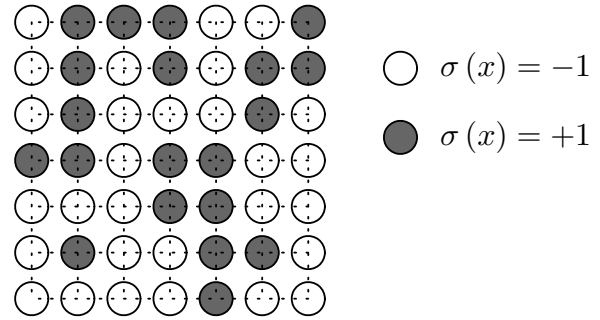


図2 格子スピン配置の例

$$H(\sigma) = -\frac{J}{2} \sum_{(x,y) \in \Lambda^*} \sigma(x)\sigma(y) - \frac{h}{2} \sum_{x \in \Lambda} \sigma(x) \quad (1)$$

をエネルギーとしてもつ．ここで,

$$\Lambda^* = \{(x, y); x, y \in \Lambda, |x - y| = 1\}$$

であり, これは Λ の無向ボンド (隣接するサイト間の無向辺) の集合である．また,

- $J > 0$: Λ 内の隣接するサイト間に働く相互作用
- $h > 0$: Λ 内の各サイトに働く磁場

とし, $h \in (0, 2J)$ を仮定する．さらに, 周期的境界条件を採用する．

定義 1. Glauber dynamics

任意の配置 $\sigma \in \mathcal{X}$ に対して, σ^x を σ からサイト x でのスピンの符号のみを反転させた配置とする．

Glauber dynamics は, 生成作用素

$$(\mathcal{L}f)(\sigma) = \sum_{x \in \Lambda} c_\beta(\sigma, \sigma^x) \{f(\sigma^x) - f(\sigma)\}$$

で与えられる \mathcal{X} 上の連続時間マルコフ連鎖と定義される．ここで,

- $c_\beta(\sigma, \sigma^x) = e^{-\beta \max\{H(\sigma^x) - H(\sigma), 0\}}$
- $\beta > 0$: 温度の逆数

とする．

(1) 式のハミルトニアンに関するギブス測度

$$\mu_\beta(\sigma) = \frac{e^{-\beta H(\sigma)}}{Z_\beta} \quad \left(Z_\beta = \sum_{\sigma \in \mathcal{X}} e^{-\beta H(\sigma)} \right)$$

が Glauber dynamics の定常分布である .

- $\square = \{ \sigma \in \mathcal{X} ; \forall x \in \Lambda, \sigma(x) = -1 \}$
- $\boxplus = \{ \sigma \in \mathcal{X} ; \forall x \in \Lambda, \sigma(x) = +1 \}$

と定義すると , \square は local minimum であり , \boxplus は global minimum である .

Λ 内にある $l \times l$ の正方形 ($l \in \mathbb{N}$) の内部の全てのサイトでスピンの値が $+1$ で , 他のサイトでスピンの値が -1 である配置を $l \times l$ ドロップレットと呼ぶ . H が最大となるドロップレットを臨界ドロップレットと呼び , その臨界ドロップレットの一辺の長さを l_c と表わす . ドロップレットは , $l < l_c$ であれば小さくなりやすく , $l \geq l_c$ であれば大きくなりやすいという性質をもつ . また , $\beta \rightarrow \infty$ においては , ほぼ確率 1 で \square から各 $l \times l$ ドロップレット ($l \in \mathbb{N}$) を経て \boxplus に到達する .

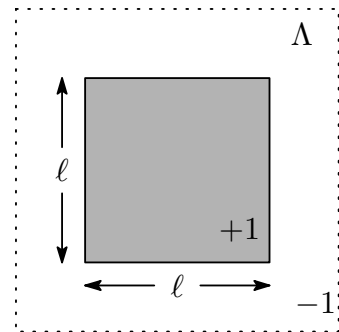


図 3 $l \times l$ ドロップレット

\square と \boxplus との間の communication height を Γ_G と表わすと ,

$$\Gamma_G = 4Jl_c - h(l^2 - l_c + 1)$$

である .

定理 2. Glauber dynamics の metastability

$\forall \delta > 0$ に対して ,

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \mathbb{P}_{\square} \left(e^{(\Gamma_G - \delta)\beta} < \tau_{\boxplus} < e^{(\Gamma_G + \delta)\beta} \right) = 1$$

となる . ここで ,

- τ_{\boxplus} : \boxplus の初到達 (再帰) 時間
- \mathbb{P}_{\square} : \square から出発する dynamics の確率法則

である .

Kawasaki dynamics with open boundary

Kawasaki dynamics with open boundary は、連続時間マルコフ連鎖を用いて 2 次元格子上的ある程度大きく有限の正方形の箱に出入りする粒子のランダムな動きをモデル化した確率モデルである。この Kawasaki dynamics では、箱の境界でのみ粒子の数は増減し、内部では粒子の総数は保存される。粒子は隣接するサイトをランダムに 1 歩ずつ移動する。この際、すでに移動先に粒子が居る場合は移動できない。

$\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^2$ を原点を中心とする巨大であるが有限の正方形の箱とする。サイト $x \in \Lambda$ に対して、 $\eta(x) \in \{0, 1\}$ とする。 $\eta(x) = 1$ ならば、サイト x に粒子がいることを、 $\eta(x) = 0$ ならば、サイト x に粒子がないことを表す。格子ガス配置を $\eta = (\eta(x); x \in \Lambda) \in \mathcal{X} = \{0, 1\}^\Lambda$ と表す。

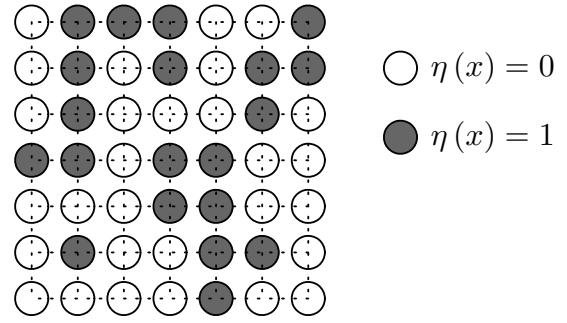


図 4 格子ガス配置の例

粒子の出入りを表現する為に、 Λ の境界を二重にする。 Λ の内部境界、外部境界を

$$\partial^- \Lambda = \{x \in \Lambda; \exists y \notin \Lambda, |y - x| = 1\} \quad \partial^+ \Lambda = \{x \notin \Lambda; \exists y \in \Lambda, |y - x| = 1\}$$

とする。また、

$$\Lambda^- = \Lambda \setminus \partial^- \Lambda \quad \Lambda^+ = \Lambda \cup \partial^+ \Lambda$$

とする。

各配置 $\eta \in \mathcal{X}$ は、ハミルトニアン

$$H(\eta) = -U \sum_{(x,y) \in \Lambda^{*, -}} \eta(x)\eta(y) + \Delta \sum_{x \in \Lambda} \eta(x) \quad (2)$$

をエネルギーとしてもつ。ここで、

$$\Lambda^{*, -} = \{(x, y); x, y \in \Lambda^-, |x - y| = 1\}$$

であり、これは Λ^- の無向ボンドの集合である。また、

- $U > 0$: Λ^- 内の隣接する粒子間に働く結合エネルギー
- $\Delta > 0$: Λ 内の粒子に働く活性化エネルギー

とし、 $\Delta \in (U, 2U)$ を仮定する。

$b = (x \rightarrow y)$: 有向ボンド (隣接するサイト間の有向辺) とする . また ,

$$\begin{aligned}\Lambda^{*,\text{orie}} &= \{b = (x \rightarrow y) ; x, y \in \Lambda\} \\ \partial\Lambda^{*,\text{in}} &= \{b = (x \rightarrow y) ; x \in \partial^+\Lambda , y \in \partial^-\Lambda\} \\ \partial\Lambda^{*,\text{out}} &= \{b = (x \rightarrow y) ; x \in \partial^-\Lambda , y \in \partial^+\Lambda\} \\ \bar{\Lambda}^{*,\text{orie}} &= \Lambda^{*,\text{orie}} \cup \partial\Lambda^{*,\text{in}} \cup \partial\Lambda^{*,\text{out}}\end{aligned}$$

とする .

定義 3.

$\forall \eta \in \mathcal{X}$ 、 $\forall b \in \bar{\Lambda}^{*,\text{orie}}$ に対して、 $T_b\eta$ を

- $b = (x \rightarrow y) \in \Lambda^{*,\text{orie}}$ ならば、サイト x と y での値を入れ替える .
- $b = (x \rightarrow y) \in \Lambda^{*,\text{in}}$ ならば、サイト y での値を 1 にする .
- $b = (x \rightarrow y) \in \Lambda^{*,\text{out}}$ ならば、サイト x での値を 0 にする .

のようにして η から得られる配置とする .

定義 4. Kawasaki dynamics with open boundary

Kawasaki dynamics with open boundary は、生成作用素

$$(\mathcal{L}f)(\eta) = \sum_{b \in \bar{\Lambda}^{*,\text{orie}}} c_\beta(\eta, T_b\eta) \{f(T_b\eta) - f(\eta)\}$$

で与えられる \mathcal{X} 上の連続時間マルコフ連鎖と定義される . ここで、

- $c_\beta(\eta, T_b\eta) = e^{-\beta \max\{H(T_b\eta) - H(\eta), 0\}}$
- $\beta > 0$: 温度の逆数

とする .

(2) 式のハミルトニアンに関するギブス測度

$$\mu_\beta(\eta) = \frac{e^{-\beta H(\eta)}}{Z_\beta} \quad \left(Z_\beta = \sum_{\eta \in \mathcal{X}} e^{-\beta H(\eta)} \right)$$

が Kawasaki dynamics の定常分布である .

- $\square = \{\eta \in \mathcal{X} ; \forall x \in \Lambda , \eta(x) = 0\}$
- $\blacksquare = \{\eta \in \mathcal{X} ; \forall x \in \Lambda^- , \eta(x) = 1 , \forall y \in \partial^- \Lambda , \eta(y) = 0\}$

と定義する . Λ が $H(\square) > H(\blacksquare)$ を満たすくらい大きいと仮定すると , \square は local minimum であり , \blacksquare は global minimum である .

Λ^- 内にある $l \times l$ の正方形 ($l \in \mathbb{N}$) の内部の全てのサイトでの値が 1 で , 他のサイトでの値が 0 である配置を $l \times l$ ドロップレットと呼ぶ . H が最大となるドロップレットを臨界ドロップレットと呼び , その臨界ドロップレットの一辺の長さを l_c と表わす . ドロップレットは , $l < l_c$ であれば小さくなりやすく , $l \geq l_c$ であれば大きくなりやすいという性質をもつ . また , $\beta \rightarrow \infty$ においては , ほぼ確率 1 で \square から各 $l \times l$ ドロップレット ($l \in \mathbb{N}$) を経て \blacksquare に到達する .

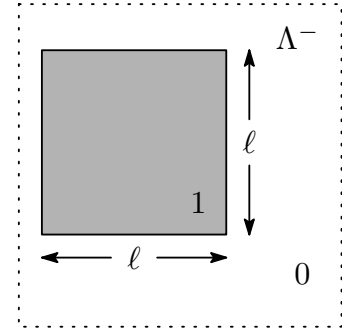


図 5 $l \times l$ ドロップレット

\square と \blacksquare との間の communication height を Γ_K と表わすと ,

$$\Gamma_K = -U (2l_c^2 - 4l_c + 2) + \Delta (l_c^2 - l_c + 2)$$

である .

定理 5. Kawasaki dynamics の metastability

$\forall \delta > 0$ に対して ,

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \mathbb{P}_{\square} \left(e^{(\Gamma_K - \delta)\beta} < \tau_{\blacksquare} < e^{(\Gamma_K + \delta)\beta} \right) = 1$$

となる . ここで ,

- τ_{\blacksquare} : \blacksquare の初到達 (再帰) 時間
- \mathbb{P}_{\square} : \square から出発する dynamics の確率法則

である .

Glauber dynamics と Kawasaki dynamics の対比

Glauber dynamics と Kawasaki dynamics において各サイト x に与えられた値 σ, η には,

$$\sigma(x) = 2\eta(x) - 1$$

という関係式が成り立つ。また, $J = \frac{U}{2}, h = 2U - \Delta$ とすると, それぞれのハミルトニアンは一致し, 臨界ドロップレットの一边の長さ ℓ_c も一致する。さらに, 先ほど仮定した

$$\Delta \in (U, 2U) \quad h \in (0, 2J)$$

の2つの条件は同値な条件になる。

以上より, Glauber dynamics と Kawasaki dynamics は遷移の仕組みのみが異なる確率モデルであるといえる。特に, Kawasaki dynamics は保存的な確率モデル, Glauber dynamics は非保存的な確率モデルであると言われている。

Glauber dynamics と Kawasaki dynamics それぞれの communication height Γ_G, Γ_K には,

$$\Gamma_G = \Gamma_K - \Delta$$

という関係式が成り立つ。Glauber dynamics と Kawasaki dynamics それぞれのメインの結果より, $\beta \rightarrow \infty$ において, Glauber dynamics における global minimum に至る時間 $\tau_{\text{田}}$ は $\tau_{\text{田}} \approx e^{\Gamma_G \beta}$ であり, Kawasaki dynamics における global minimum に至る時間 $\tau_{\text{■}}$ は $\tau_{\text{■}} \approx e^{\Gamma_K \beta}$ である。ここで, \approx は近似を表わす。したがって, 次のことが分かる。

$\beta \rightarrow \infty$ において, Glauber dynamics は Kawasaki dynamics より約 $e^{-\Delta \beta}$ 倍短い時間で global minimum に到達する。

この結果は, Kawasaki dynamics における Λ の内部では粒子の総数は保存されるという制約からも素直に受け入れられる結果である。