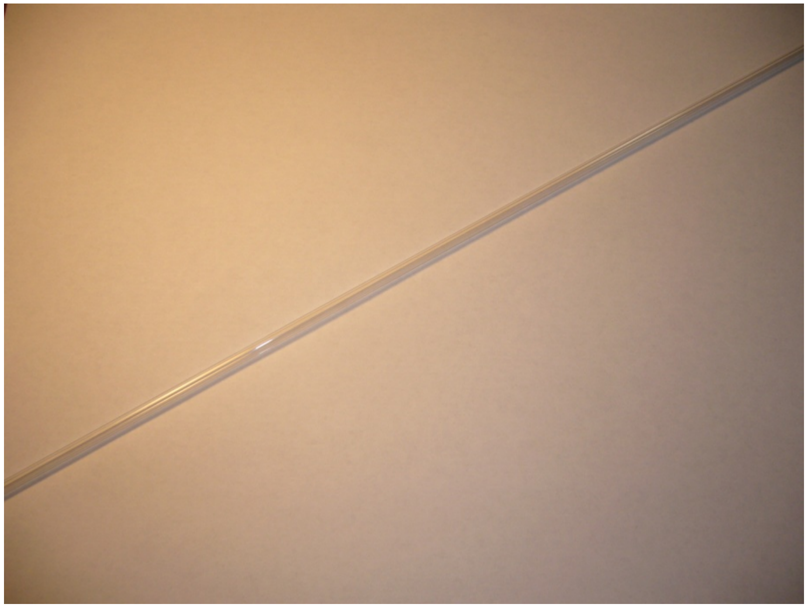
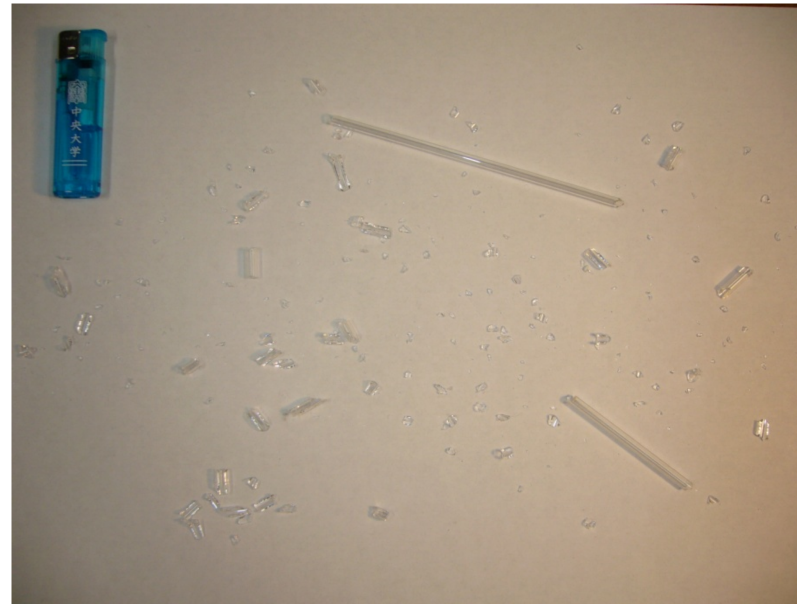
Glauber Dynamics を用いた破壊モデル

物理学科４年１組３２番
井上 遥介

破壊

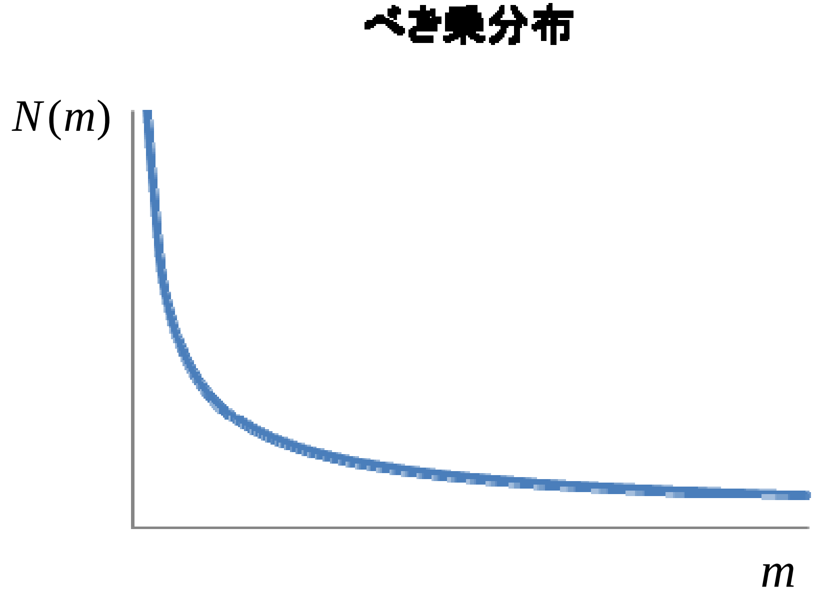


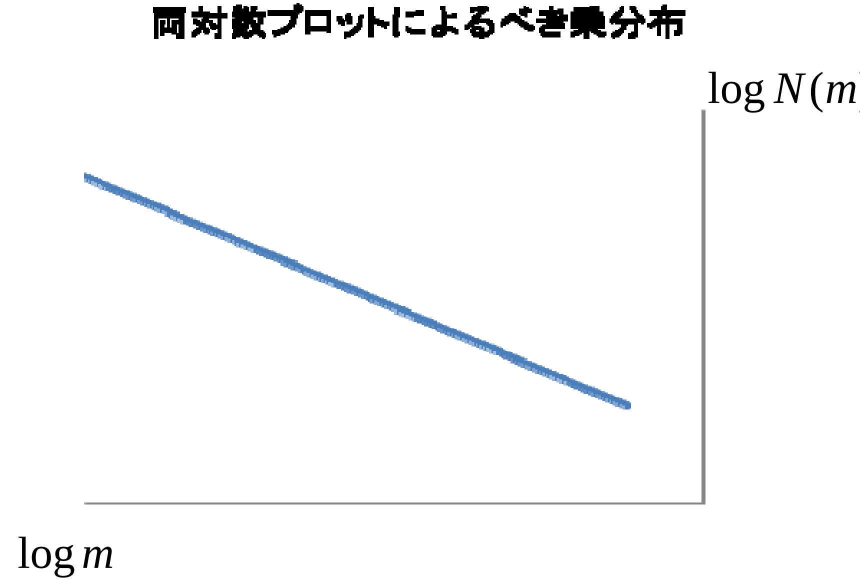


一次元破壊現象の計算機シュミレーションとサイズ分布の統計則の再現

破壊したあとのガラス棒の破片のサイズ分布や質量分布はべき乗則に従う。

$$N(m) \sim m^{-b}$$





Ising模型

1. Ising模型

- １次元系を考える。
- それぞれのサイトでのスピン σ_i は1 か -1 である。
- スピンどうしは最隣接スピンとのみ相互作用をする。
- 外部磁場を h とする。
- このときそれぞれのスピンのエネルギー E_i は

$$E_i = -\sum_{\{\sigma_j\}} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - h\sigma_i$$

と書ける。

2. 全エネルギー

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_i h\sigma_i$$

- 最初の和はすべての最隣接スピンのペアについての和である。
- J_{ij} は交換相互作用定数である。
- 外部磁場 h は $h = 0$ とした。

シュミレーション

1. モンテカルロ法

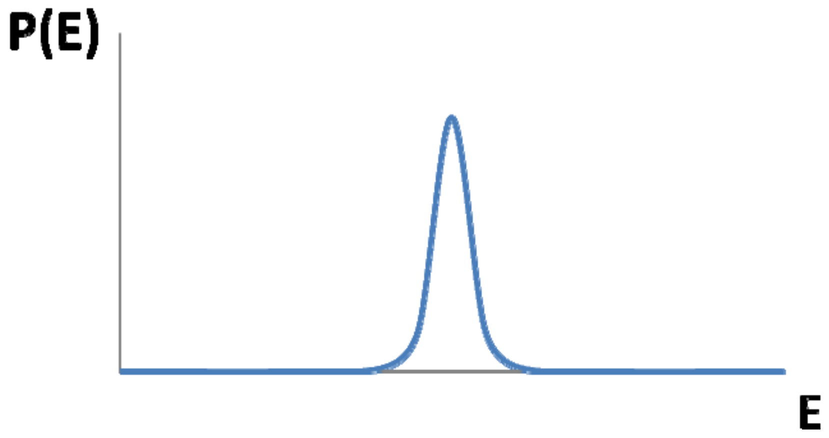
統計力学での物理量A のカノニカル平均は

$$\langle A \rangle = \frac{TrAe^{-\beta H}}{Z} \quad , \quad Z = Tre^{-\beta H}$$

であたえられる。一般に状態数が非常に多く、全状態での和をとることが困難である時この和をランダムサンプリングに置き換えることが考えられる。

$$\frac{\displaystyle\sum_{\text{すべての状態}} Ae^{-\beta H}}{\displaystyle\sum_{\text{すべての状態}} e^{-\beta H}} \to \frac{\displaystyle\sum_{\text{サンプリング}} Ae^{-\beta H}}{\displaystyle\sum_{\text{サンプリング}} e^{-\beta H}} = \langle A \rangle_{sample}$$

これをモンテカルロ法という。



単にランダムに状態を選ぶとほとんどすべてのサンプルは熱力学的性質に寄与しない状態となってしまい、きわめて効率が悪い。
そこで状態を選ぶ確率をボルツマン因子 $\exp(-\beta H)$ に比例するようにとる。

$$\langle A \rangle \to \frac{\sum_i P_{eq}(i) A(i)}{\sum_i P_{eq}(i)} \to \frac{\sum_{i}{}_{MC} A(i)}{\sum_{i}{}_{MC}}$$

ここで $\sum_{i}{}_{MC}$ は各状態 i を確率 $P_{eq}(i)$ でサンプリングしたものの和を意味する。

状態を選ぶ確率をボルツマン因子に比例するようにとるには次の二つの条件を満たせばよい。

条件

(1)エルゴード性

$$w > 0$$

（wは遷移確率）

(2)詳細つり合い

$$P_{eq}(j) w_{j \to i} = P_{eq}(i) w_{i \to j}$$

書き換えると

$$\frac{w_{i \to j}}{w_{j \to i}} = \frac{P_{eq}(j)}{P_{eq}(i)} = e^{-\beta(E_j - E_i)}$$

2. Glauber Dynamics

- $$w(\sigma_k \to -\sigma_k) = \frac{e^{-\beta E(-\sigma_k)}}{e^{-\beta E(\sigma_k)} + e^{-\beta E(-\sigma_k)}}$$
  $$= \frac{1}{1 + e^{\beta \Delta E}}$$

- ランダムにスピンをひとつ選ぶ。

- そのスピンが反転したときのエネルギー差を計算する。

- [0,1] の間の一様乱数 X をつくり、$X < w(\sigma_k \to -\sigma_k)$ のときスピンを反転させる。

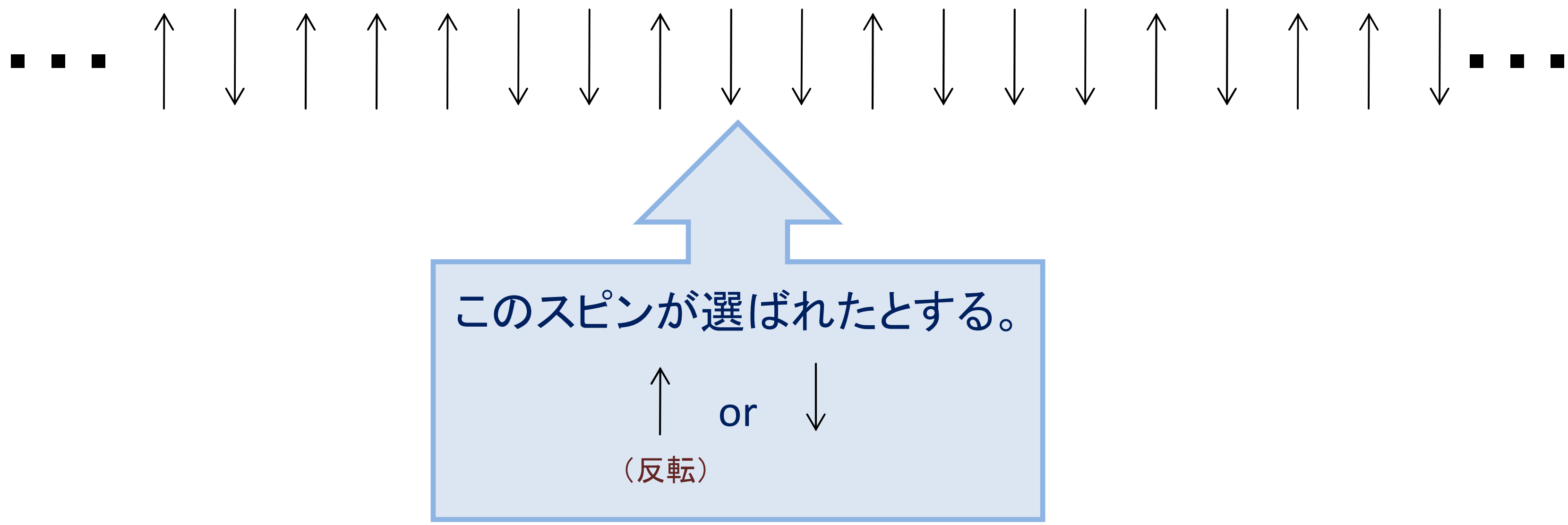
このような遷移確率の取り方を熱浴法といい、特にIsing模型ではGlauber Dynamicsという。

破壊モデル

… ↑ ↓ ↑ ↑ ↑ ↓ ↓ ↑ ↓ ↓ ↑ ↓ ↓ ↓ ↑ ↓ ↑ ↑ …

一次元上にたくさんのスピンがならんでいる系を考える。

最初この系は熱平衡状態であるとする。



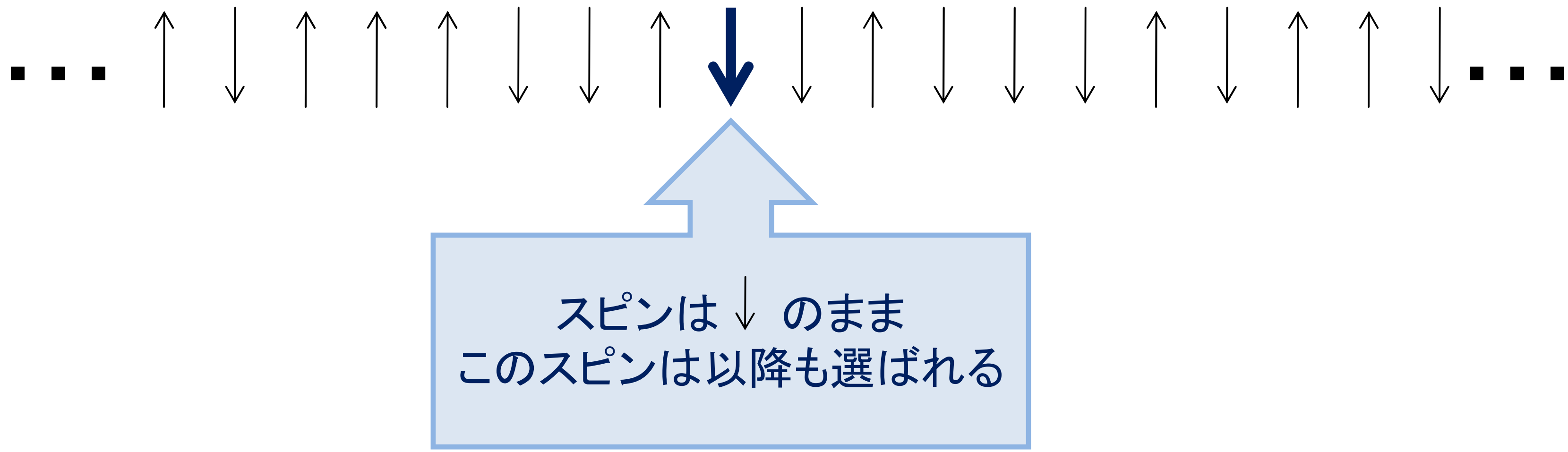
ランダムにスピンをひとつ選ぶ。

選ばれたスピンは遷移確率によりその後の状態を決める。

・・・ ↑ ↓ ↑ ↑ ↑ ↓ ↓ ↑ **↑** ↓ ↑ ↓ ↓ ↓ ↑ ↓ ↑ ↑ ↓ ・・・

スピンが ↓ から ↑ へ反転
このスピンを破壊点とする

反転した場合はそれ以降のSTEPでは選ばれないとするが、スピン相互作用は以降もあるとする。
そしてこのスピンを破壊点とみなす。



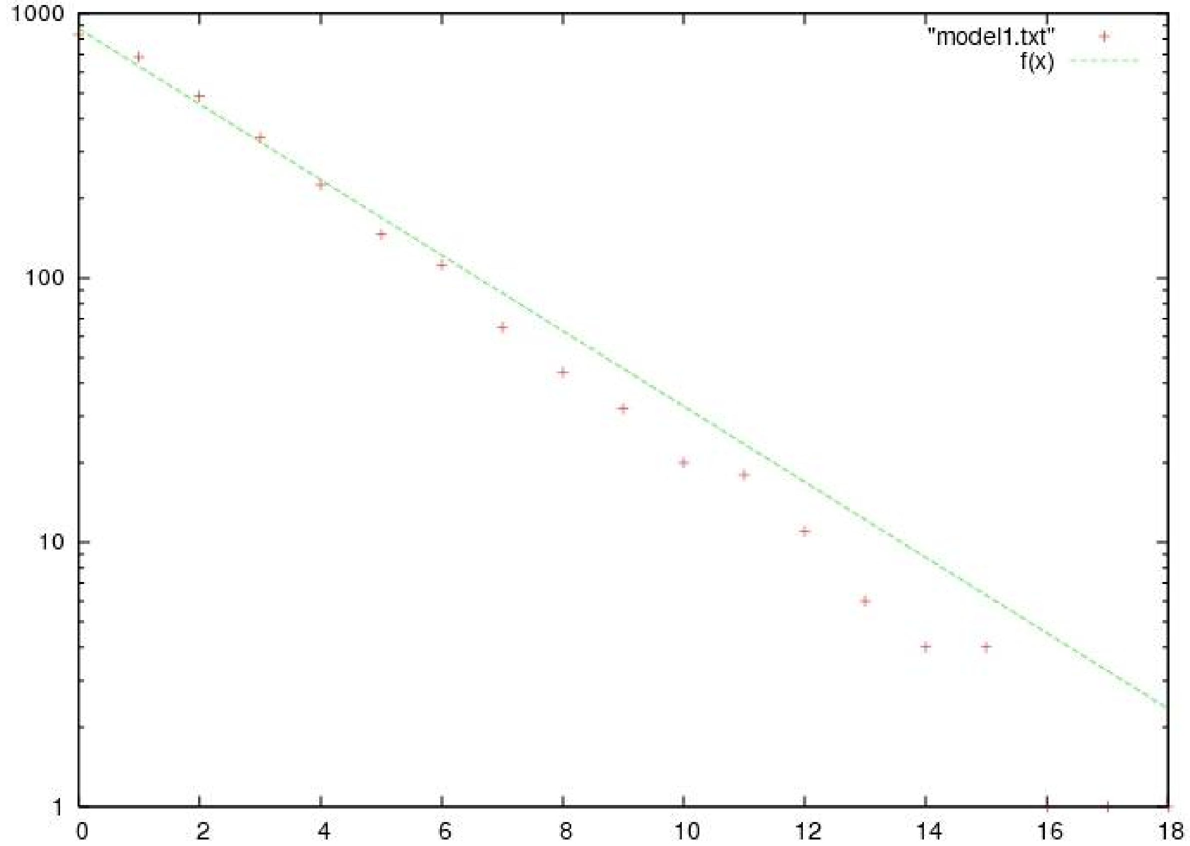
選ばれたスピンが反転しなかった場合はそのままの状態で残るとし、以降のSTEPでも選ばれうるものとする。

この操作をなんども行う。
（シュミレーションではひとつひとつのスピンが
平均一回選ばれるようにした。）

反転したスピン間の距離を破壊現象での破片
の長さと対応させてサイズ分布をグラフにした。

１．モデル１

- スピンは最隣接スピンとのみ相互作用をする。
- 遷移確率はGlauber Dynamics には従わず次の決まりに従うとする。
  1. 選ばれたスピンの両端のスピンが上向きのときはそのスピンは必ず上を向き、下向きのときは必ず下を向く。
  2. 選ばれたスピンが上下のスピンで挟まれているときは二分の一の確率で上向きか、下向きかを決める。



$$f(x) = 10^{-0.142876\,x + 2.94299}$$

２．モデル２

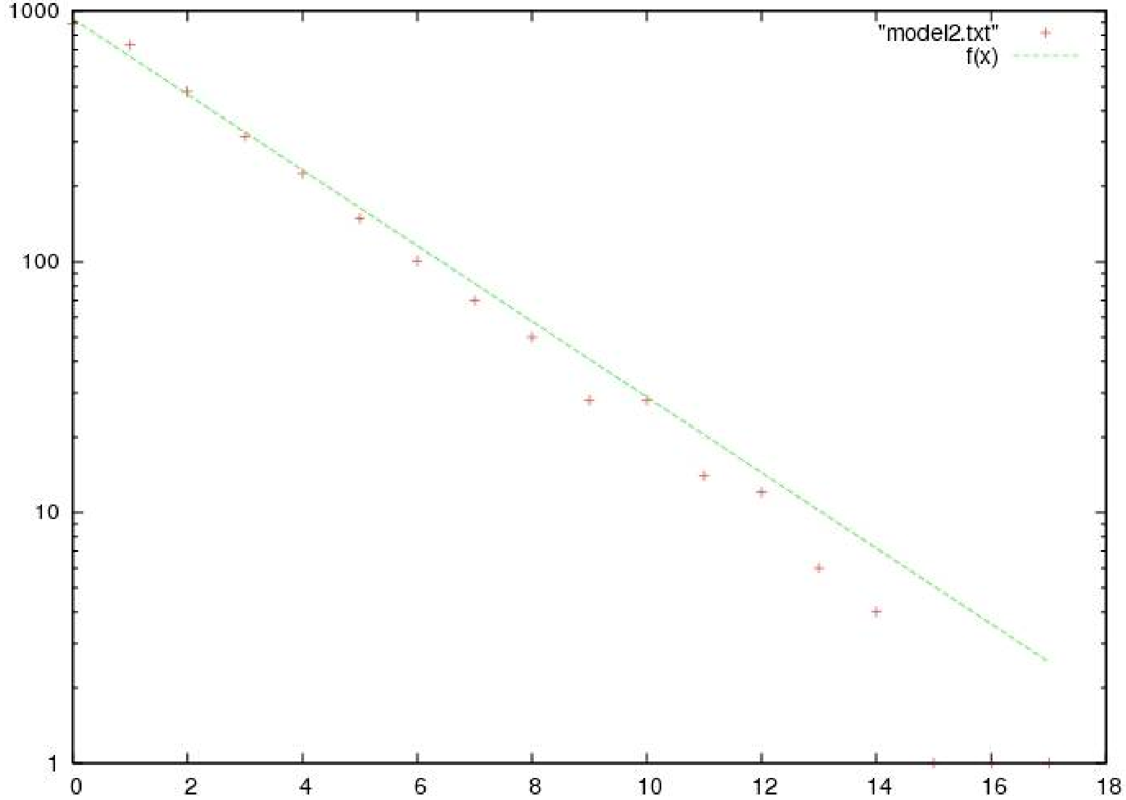
- スピンは最隣接スピンとのみ相互作用をする。i サイトのエネルギーを

$$E_i = -\sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

　とする。

- 遷移確立はGlauber Dynamicsに従う。

- 温度Tは $T=1$ とした。



$$f(x) = 10^{-0.150872x + 2.96893}$$

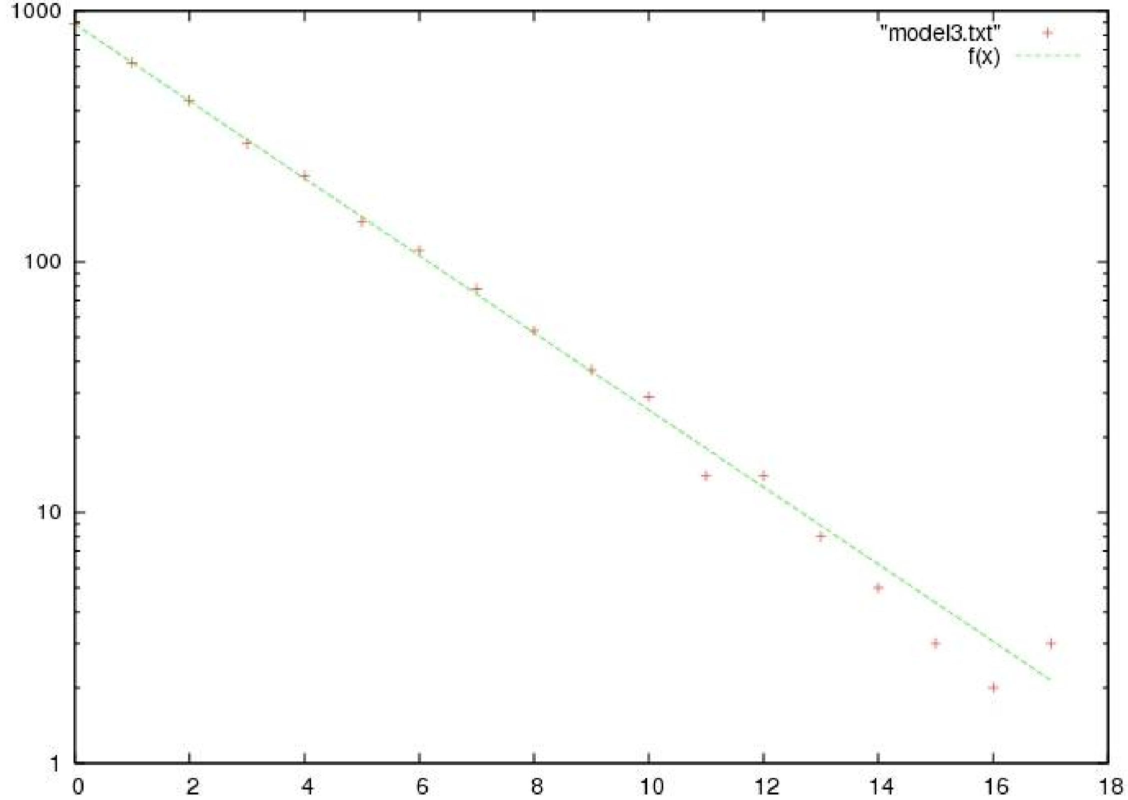
３．モデル３

- i サイトのエネルギーを

$$E_i = -\sum_j \frac{1}{\left|i-j\right|^{\alpha}} \sigma_i \sigma_j$$

とし、和はすべてのサイトについて考えた。
つまりすべてのスピンと相互作用をする。

- 上式のαは$\alpha = 1$とした。
- 遷移確率はGlauber Dynamics に従う。
- 温度Tは$T = 1$とした。



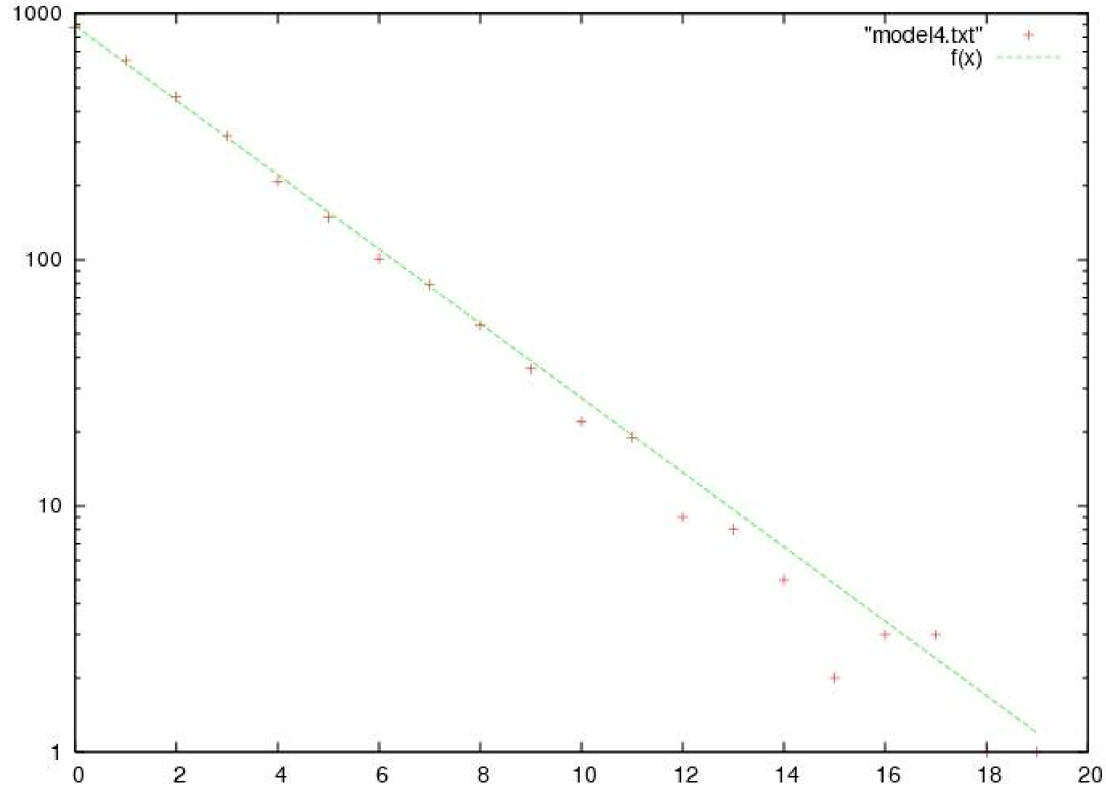
$$f(x) = 10^{-0.153962x+2.94819}$$

４．モデル4

- エネルギーとして湯川ポテンシャルの形を用いた。

$$E_i = -\sum_j \frac{1}{|i-j|} e^{-\kappa|i-j|} \sigma_i \sigma_j$$

- 上式で$\kappa = 1/\text{サイト数}$とした。
- 遷移確率はGlauber Dynamics に従う。
- 温度Tは$T = 1$とした。



$$f(x) = 10^{-0.15117x + 2.9496}$$

このモデルについて

- 結果としてこれらのモデルではべき乗分布は再現できなかった。
- 今回のモデルは相互作用定数をさまざまに変えてみたものだが、すべて指数分布となり傾きなどにもあまり変化が見られなかった。
- このモデルの次の発展として時間変化のモンテカルロ法が考えられるだろう。

参考文献

物理学基礎シリーズ４　熱･統計力学

宮下精二　著