

1次元自己重力リングモデルの熱力学 Thermodynamics of the self-gravitating ring model

立川崇之 (Takayuki Tatekawa)^{1,2}, Freddy Bouchet¹, Thierry Dauxois¹, Stefano Ruffo^{1,3}

1. *Laboratoire de Physique, UMR-CNRS 5672, ENS Lyon, 46 Allée d'Italie, 69364 Lyon cédex 07, France*

2. *Department of Physics, Waseda University, 3-4-1 Okubo, Shinjuku, Tokyo, 169-8555, Japan*

3. *Dipartimento di Energetica, "S. Stecco" and CSDC, Università di Firenze, and INFN, via S. Marta, 3, 50139 Firenze, Italy*

(Dated: April 18, 2005)

我々は、Newton 重力によって互いに相互作用を及ぼす粒子が一次元リングに拘束されている、自己重力リング (SGR) モデルの熱力学的性質を、ミクロカノニカル分布およびカノニカル分布のもとで解析し、相転移等に関するダイアグラムを示す。ソフトニングパラメーターの導入により、短距離での相互作用の発散が防がれる場合には、エントロピーの最大が存在するので、純粋な Newton 重力の性質を解析する事は出来ないが、平均場による近似で熱力学的性質を解析する事が出来る。本モデルは重力系のモデルであるので、アンサンブルの違いにより相転移を起こす臨界エネルギーが変わり、ミクロカノニカル分布による解析では広いエネルギースケールにわたって負の比熱が現れる。また、『三重臨界点』において相転移が二次から一次へと変化するが、このエネルギーはアンサンブルの取り方により異なる。ここで取り扱った SGR モデルは空間一次元において、自己重力モデルを単純化したモデルとして、Newton 重力に特有の特異な性質を示す。SGR モデルの熱平衡状態における安定な分布関数を導出するため、我々は二次元の乱流解析で用いられた方法を参考にし、新たな逐次近似法を導出した。この方法はエントロピーを徐々に増大させて平衡状態に分布関数を収束させるもので、従来のものに比べて高速で、相転移点付近でも十分に使えるものである。この方法で得た平衡状態は、GRAPE-5 を用いた大規模シミュレーションとの比較でもよく一致し、系の安定な平衡状態を表す分布関数を求める際に非常に有用な方法である事も確かめられた。

I. INTRODUCTION

宇宙には球状星団、銀河、銀河団や分子雲のように、自己重力が自身の振る舞いに大きな寄与を及ぼしている天体が存在する [1]。今までに様々な理論的なアプローチが、自己重力系の特異な統計的性質の解析のために提案されてきた。だが系の困難な点として、自己重力系ではポテンシャルが近距離で発散する事、および蒸発現象が見られる事が挙げられる。たとえ系を断熱壁で覆って蒸発を防いだとしても、重力熱不安定として知られている現象を引き起こす [2-4]。ポテンシャルに対して短距離でのソフトニングを導入すると、熱不安定を回避でき、自己重力系は平衡状態に到達する事が出来る。しかし、この状況でも負の比熱は存在する。さらに、粒子が自由粒子のように振る舞う高エネルギー状態から、クラスターを形成する低エネルギー状態の間で、一次相転移を起こす。

三次元自己重力系の計算を直接行くと、相互作用の計算が膨大なものとなる [5]。このため、Newton 重力を計算する事に特化した計算機 GRAPE が開発されている [6]。しかし、粒子数 N に対して相互作用の計算量は $O(N^2)$ となり、遠方からの粒子の相互作用をまとめて計算する Tree 法等の方法を用いても、せいぜい $O(N \log N)$ 程度までしか計算量を減らす事が出来ない。そこで対称性を課したり、空間次元を下げたりして相互作用の計算を軽減する事を考える。自己重力系に対称性を課した簡単なモデルとして、一次元自己重力シート系の解析がなされており [7]、興味深い振る舞いを示す事が報告されているが [8, 9]、系の比熱は常に正であり相転移を起こさない。

我々はかつて、相互作用は空間三次元のものと同じ Newton 重力で与えられ、粒子はリングに拘束されているという、一次元モデルを提案した [10]。短距離ではソフトニングを導入しているため、粒子の衝突時に相互作用は発散せず、シミュレーションで時間発展を追う事も困難ではない。このモデルは一次元自己重力リング (SGR) モデルと名付けられている。100 体の粒子を用いた過去の解析では、ソフトニングが十分に小さければ負の比熱や相転移といった、三次元重力ポテンシャルの特異な性質を SGR モデルでも示す事が分かった。また、ソフトニングを非常に大きく取った極限では、長距離力の簡単なモデルとして盛んに研究されている、Hamiltonian Mean-Field (HMF) モデル [11] に近づく。HMF モデルでは系は二次相転移を起こし、負の比熱は現れない。

我々はまず、SGR モデルの熱力学的平衡状態を、カノニカル分布とミクロカノニカル分布の両方で導出した。我々が解析したソフトニングパラメーターの範囲では、モデルは常に熱平衡状態を持つ。しかしソフトニングが十分に小さければ、ミクロカノニカル分布で SGR モデルは負の比熱を示し、一次相転移を起こす。一方でカノニカル分布のもとでは負の比熱が現れないので、SGR モデルでは、アンサンブルによる相転移の違いが現れる [12, 13]。このような性質は自己重力系で知られている現象であるので、SGR モデルは現実の三次元重力モデルの性質をよく示す簡単なモデルとして有用であると考えられる。

本集録ではまず II 章で SGR モデルの性質と過去の数値計算の結果を手短に示す [10]。次に III 章では、統計力学の基本問題ではあるが、Boltzmann-Gibbs エントロピーを最大にする分布関数を、ミクロカノニカル分布のもとで導出する。IV 章で我々が開発した平衡分布を導出する新たな逐次近似の手法を解説する。この手法は二次元乱流の極大エントロピーを導出する方法 [14] を手がかりとして、開発した方法である。新たな逐次近似の手法を導出した事により、我々は相転移点付近の系の振る舞いを詳細に解析する事が可能となった。この手法は、今後の応用が幅広く期待できる。V

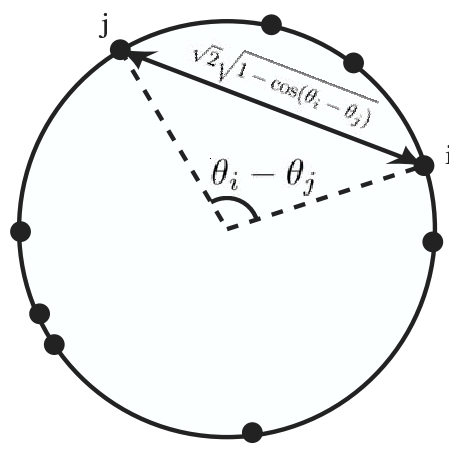


FIG. 1: 半径を 1 とした一次元自己重力リング。粒子はリングに固定されており、その位置は角度によって識別される。 θ_i と θ_j に存在する粒子対は、三次元重力と同じ逆二乗則で力を及ぼしあう。この際の距離は、粒子対がなす弦の長さであり、弧の長さではない。

章では新たな逐次近似の方法を用いて導出した、SGR モデルの熱力学的性質を説明する。VI 章では GRAPE-5 を用いたシミュレーションと、平衡状態の比較を行う。最後に VII 章において、今後の展望を述べる。Appendix A では、新たな逐次近似の方法を導出する際に用いた数学の諸定理について簡単に解説する。Appendix B では、我々が示した逐次近似の手法を他のモデルに応用した例を示す。

本集録は、2005 年 3 月 9-12 日にぐんま天文台で開催された、ぐんま天体力学 N 体力学研究会（第 37 回天体力学 N 体力学研究会）での発表内容に関する事をまとめたもので、我々の論文 [15] の内容を加筆修正したものである。

II. 一次元自己重力リングモデル

ここでまず、一次元自己重力リング (SGR) モデルについて手短かに説明を行う [10]。一次元リングモデルはリングに拘束された粒子が、三次元 Newton ポテンシャルによって互いに相互作用を及ぼすモデルである (図 1)。

SGR モデルのハミルトニアンは以下のように与えられる。

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N p_i^2 + \frac{1}{2N} \sum_{i,j} V_\varepsilon(\theta_i - \theta_j), \quad (1)$$

$$V_\varepsilon(\theta_i - \theta_j) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1 - \cos(\theta_i - \theta_j) + \varepsilon}}, \quad (2)$$

ε はソフトニングパラメーターで、近距離でのポテンシャルの発散を防ぐ。 ε を大きく取った極限では、ポテンシャルが

$$V_\varepsilon = \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}} \left[\frac{1 - \cos(\theta_i - \theta_j)}{2\varepsilon} - 1 \right] + O(\varepsilon^{-2}), \quad (3)$$

となり、HMF モデル [11] のポテンシャルに近づく。HMF モデルは二次相転移を示し、二相に分かれる事がよく知られている。二相の一方は粒子が一個のクラスターを形成する低エネルギー相である。もう一方は、運動エネルギーが大きく粒子は一様に分布し、自由粒子の様に振る舞う高エネルギー相である。

ところで、本研究で用いているようなモデルの熱力学的性質を示すグラフとして、温度曲線と呼ばれるグラフがある。これは一粒子あたりの運動エネルギーを二倍したもの $T \equiv \beta^{-1} = 2 \langle K \rangle / N$ を温度として、一粒子あたりの全エネルギー $U \equiv H/N$ との関係を示したものである。SGR モデルのポテンシャルが HMF モデルのものに近づく $\varepsilon = 10$ の条件のもとでは、シミュレーションから温度曲線は図 2(a) のように与えられる。一様分布の相 $U > U_c(\varepsilon)$ では、曲線はほぼ線形関係になり、一方でクラスターを形成する相 $U < U_c(\varepsilon)$ では折れ曲がる。この場合には、温度はエネルギー増加により上昇し、負の比熱は現れない。だが一方でソフトニングを小さく取ると、三次元重力のように、負の比熱の相が現れる。図 2(b) では、過去の論文 [10] で行ったシミュレーションのうち、二つの異なる値の ε に対して曲線を描いた。 ε が小さい場合には、SGR モデルでは相は三つに分類される。

- 低エネルギーでクラスターを形成する相 $U < U_{top}(\varepsilon)$ 。 U_{top} は比熱が 0 ($\partial T / \partial U = 0$) になるエネルギーである。
- 中間状態の相 $U_{top}(\varepsilon) < U < U_c(\varepsilon)$ 。この相で負の比熱が現れる。

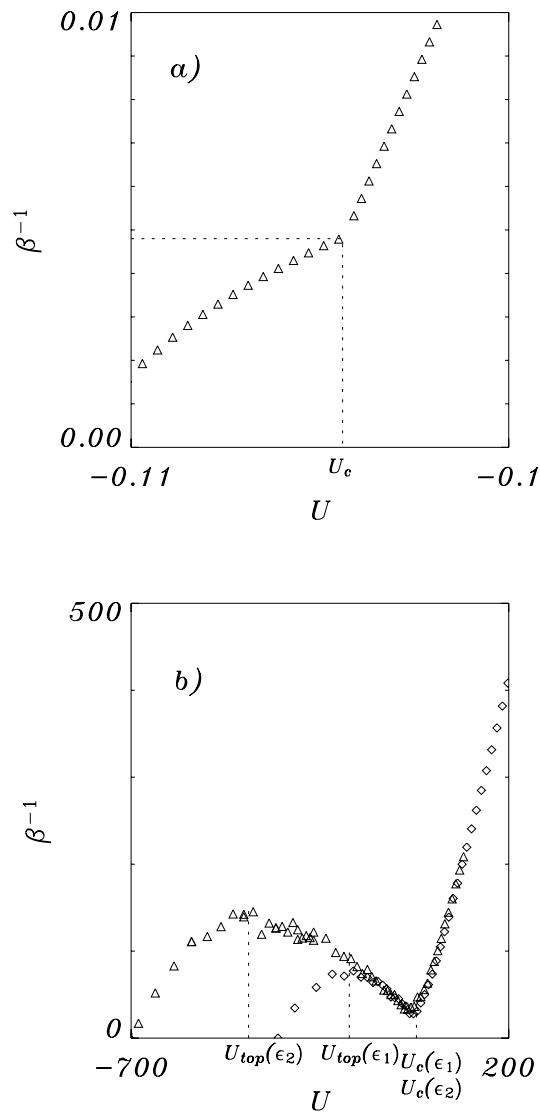


FIG. 2: 数値計算によって得られた SGR モデルの温度曲線. いずれも粒子数は $N = 100$ である. (a) は $\epsilon = 10$ とした場合で, U_c で系は二次相転移を起こす. この時は負の比熱は現れない. (b) は $\epsilon_1 = 1.0 \times 10^{-6}$ と $\epsilon_2 = 2.5 \times 10^{-7}$ の場合. 相転移はミクロカノニカル分布で一次相転移となる. 二つのエネルギー $U_c(\epsilon_1)$ と $U_c(\epsilon_2)$ は非常に近い値となり, 相転移エネルギーは ϵ にあまり依存しないようである. 一方, $U_{top}(\epsilon_1)$ は明らかに $U_{top}(\epsilon_2)$ より小さく, ϵ を小さくすると減少する. 負の比熱は $U_{top} < U < U_c$ で現れ, ソフトニングを小さくするとエネルギースケールが広がる.

- 高エネルギーのガス状の相 $U_c(\epsilon) < U$.

低エネルギーの相は, 粒子同士の距離がゼロになった時の発散を回避するために導入した, ϵ の存在によって現れる, ある意味人為的な相である. 一方, 高エネルギーの相では粒子はポテンシャルの影響をほとんど受けず, 自由粒子のように振る舞う. 中間状態の相が重力の特徴をよく示していると考えられ, ϵ を小さくする事により中間状態の相のエネルギースケールが広がる.

後で我々は, SGR モデルの熱力学的性質を解析し, ϵ を変化させた時の相転移の変移を詳細に調査する予定である.

本研究では空間一次元モデルである SGR モデルへの応用を考えて、一次元系での式を記述するが、空間三次元のモデルでも議論の流れは同じである。以下、空間一次元でかつ周期 2π で閉じているモデルの場合を想定して、式を導出していく。

長さを固定して粒子数を $N \rightarrow \infty$ とする平均場の極限 [16] で、一点分布関数 $f(p, \theta)$ を考える事が出来る。 $f(p, \theta) dp d\theta$ は相空間の領域 $[\theta, \theta + d\theta][p, p + dp]$ に存在する粒子の密度を表す。 f を用いると、ポテンシャルエネルギーは

$$E_P[f] = \frac{1}{2} \int d\theta d\phi dp dp' f(p, \theta) V_\varepsilon(\theta - \phi) f(p', \phi) \quad (4)$$

$$= \frac{1}{2} \int d\phi d\theta \rho(\theta) \rho(\phi) V_\varepsilon(\theta - \phi), \quad (5)$$

と記述する事が出来る。 $\rho(\theta)$ は質量密度を表し、

$$\rho(\theta) = \int dp f(p, \theta), \quad (6)$$

と記述される。運動エネルギーは

$$E_K[f] = \frac{1}{2} \int d\theta dp p^2 f(p, \theta), \quad (7)$$

となり、全エネルギーは

$$E[f] = E_K[f] + E_P[f]. \quad (8)$$

である。

Boltzmann-Gibbs エントロピー

$$S[f] = - \int d\theta dp f \log f, \quad (9)$$

が最大になる場合の、ミクロカノニカル分布での平衡分布を、全エネルギー、全運動量、全質量保存の拘束条件のもとで求める。固定する物理量は全エネルギー $E[f] = U$ 、全質量

$$M[f] = \int \rho d\theta = 1, \quad (10)$$

および全運動量

$$p[f] = \int p f(p, \theta) d\theta dp = 0, \quad (11)$$

である。ここでは全運動量は 0 とした [29]。

エントロピー最大の条件を得るため、Lagrange の未定乗数法を用いる。

$$F[f] \equiv S[f] - \beta E[f] - \alpha \int f dp d\theta - \gamma p[f]. \quad (12)$$

α, β, γ は Lagrange の未定乗数である。分布関数に関して変分をとり、0 になる分布関数を得る。

$$\frac{\delta F[f]}{\delta f} = -\log f - 1 - \beta \left(\frac{p^2}{2} + W(\theta) \right) - \alpha - \gamma p = 0. \quad (13)$$

ここで導入した $W(\theta)$ は次のように定義した。

$$W(\theta) \equiv \int_{-\pi}^{+\pi} \rho(\phi) V_\varepsilon(\theta - \phi) d\phi. \quad (14)$$

運動量 $p[f] = 0$ であるから、未定乗数 γ は消える。式 (13) から、規格化された分布関数は次のように書かれる。

$$f(p, \theta) = A \exp \left[-\beta \left(\frac{p^2}{2} + W(\theta) \right) \right]. \quad (15)$$

$A = \exp(-1 - \alpha)$ は規格化定数である。質量密度は以下のように書かれる。

$$\rho(\theta) = \tilde{A} e^{-\beta W(\theta)}. \quad (16)$$

ここで $\tilde{A} = A\sqrt{2\pi/\beta}$ である。

(14) と (16) を組み合わせる事により、我々は閉じた式を得る事が出来る。

$$W(\theta) = \tilde{A} \int_{-\pi}^{+\pi} e^{-\beta W(\phi)} V_\varepsilon(\theta - \phi) d\phi. \quad (17)$$

あるいは

$$\rho(\theta) = \tilde{A} \exp \left[-\beta \tilde{A} \int_{-\pi}^{+\pi} \rho(\phi) V_\varepsilon(\theta - \phi) d\phi \right], \quad (18)$$

である。

平衡状態の分布関数を記述するには、積分方程式 (17) または (18) をそれぞれ $W(\theta)$, $\rho(\theta)$ について解く必要がある。次章ではこれらの積分方程式の数値解法について考える。静的な質量分布 ρ と関数 W が ε の値に対して得られれば、一点分布関数が (15) により得られる。ポテンシャルエネルギーと運動エネルギーはそれぞれ (5) と (7) から求められ、温度曲線は $U = E_K + E_P$ と $T \equiv \beta^{-1} = 2E_K$ の関係として得られる。温度の逆数 β については、以下の式でも説明される。

$$\beta = \left\{ 2U - \int_{-\pi}^{+\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} \rho(\theta) \rho(\phi) V_\varepsilon(\theta - \phi) d\theta d\phi \right\}^{-1}. \quad (19)$$

IV. 逐次近似の方法

A. 従来から用いられている方法

(17) または (18) を解く際、三次元 Newton 重力の場合には、Poisson 方程式と連立させる事により、球対称モデルのように対称性を課したモデルでは微分方程式に置き換えて解く事が容易になった [1]。また、HMF モデルでは右辺の積分がうまく整理できて、容易に解く事が可能であった [11]。

しかし一般のポテンシャルの場合には、直接これらの方程式を解かなければならない。そこで、逐次近似の方法を用いる。ここでは質量密度に着目し、(18) を解く事を考えよう。

従来からよく用いられている逐次近似の方法では、(18) を用いて次のような手順で解いていた [17]。

1. 密度分布 $\rho_k(\theta)$ が与えられていると仮定する。この密度分布は (16) のように $\tilde{A}$ と β , $W(\theta)$ を用いて記述されるべきである。また、 ρ_k は質量保存 (10) を満たしているとする。($\tilde{A}$ の部分は、質量保存の操作から ρ_k に取り込めるので、消去する事が出来る。)
2. まず ρ_k を用いて (14) から W_k を求める。
3. 次にエネルギー保存 $U = E_K + E_P$ が満たされているので

$$\beta_k = \left\{ 2U - \int_{-\pi}^{+\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} \rho_k(\theta) \rho_k(\phi) V_\varepsilon(\theta - \phi) d\theta d\phi \right\}^{-1}. \quad (20)$$

から β_k を求める。

4. (18) を用いて

$$\rho_{k+1}(\theta) \equiv \tilde{A}_{k+1} \exp \left[-\beta_k \int_{-\pi}^{+\pi} \rho_k(\phi) V_\varepsilon(\theta - \phi) d\phi \right]. \quad (21)$$

から ρ_{k+1} を求める。ここで現れる $\tilde{A}_{k+1}$ は、後で ρ_{k+1} を規格化する事で消去できる。

しかし、この方法で平衡解の導出を試みると、困難が生じる事がある。例えば分布関数が収束しなかったり、本来は運動エネルギーから定義されるために非負であるべき β が負の値に収束してしまう事が起きるのである。後で示すように、SGR モデルでは比熱が負になるエネルギースケールでは収束が非常によくない。

我々は IV A 節で示した逐次近似の方法を用いて、平衡状態の分布関数の導出を試みた。しかし (18) に対して逐次近似の方法を用いても、収束があまり良くない。そこで我々は Turkington and Whittaker [14] が二次元乱流での極大エントロピーを求める際に用いた方法をもとに、新たな逐次近似の方法を提案する。この方法では逐次近似の段階でエントロピーが増大しながら収束する。

エントロピー極大での分布関数を求める際に、我々が開発した方法ではエントロピーを最大にする汎関数 $S[f]$ の性質と、質量およびエネルギーに関する拘束条件を課している。エネルギーは (5) で示したように、一般に分布関数に対して非線形であるので、変分問題として取り扱うには難しい。そこで非線形であるエネルギーの拘束条件を、前段階の逐次近似のステップで得られた分布関数の周りで線形化するトリックを用いる。

まず逐次近似において k 回目の計算によって、規格化された分布関数 f_k が求まっていたとする。ここから質量密度 ρ_k および平均ポテンシャル W_k が求められる。

$$\rho_k(\theta) = \int dp f_k(p, \theta) \quad (22)$$

$$W_k(\theta) = \int_{-\pi}^{+\pi} d\phi \rho_k(\phi) V_\varepsilon(\theta - \phi). \quad (23)$$

次のステップでの分布関数 f_{k+1} は、不等式の拘束条件が付加された、以下の変分問題を解く事により導出される。

$$\max \left\{ S[f] \mid M[f] = 1, E[f] = E[f_k] + \int \left. \frac{\delta E}{\delta f} \right|_{f_k} (f - f_k) dp d\theta \leq U \right\}, \quad (24)$$

ここでエネルギーの変分は以下ようになる。

$$\left. \frac{\delta E}{\delta f} \right|_{f_k} = \frac{p^2}{2} + W_k(\theta). \quad (25)$$

この変分問題は、線形化された拘束条件のもとで厳密に凹である汎関数の極大点を求めることに対応するので、唯一解を持つ。

逐次近似でエントロピーを収束させる事を考える。以下、エントロピーの収束性について示していこう。まず、Lagrange の未定乗数法を、不等式の拘束条件が課された変分問題に一般化する事を考える。

$$\left. \frac{\delta S}{\delta f} \right|_{f_{k+1}} = \alpha_{k+1} + \beta_{k+1} \left. \frac{\delta E}{\delta f} \right|_{f_k}. \quad (26)$$

ここで、エネルギーに対する拘束条件は以下のようにする。

$$\beta_{k+1} \left[E[f^k] + \int \left. \frac{\delta E}{\delta f} \right|_{f_k} (f_{k+1} - f_k) dp d\theta - U \right] = 0, \quad (27)$$

温度は正であるため、 $\beta_{k+1} \geq 0$ を課す。 α_{k+1} は質量保存による規格化から与える。もし $\beta_{k+1} = 0$ であればエネルギー拘束条件は外れ、 $\beta_{k+1} > 0$ ならば線形化されたエネルギー拘束条件が課される。

ここで用いた定理は Kuhn-Tucker の定理 [18] というものである。Kuhn-Tucker の定理およびその周辺の数学の詳細は Appendix A で述べる。

さて、エントロピーの収束性を示そう。まず、エネルギー汎関数 $E[f]$ が厳密に凹関数である事を示す。運動エネルギーの部分は (7) より f に対して線形である。よって、 $E[f]$ の二階変分は

$$\delta^2 E = \int d\phi d\theta \delta\rho(\theta) \delta\rho(\phi) V_\varepsilon(\theta - \phi) \quad (28)$$

$$= \sum_k V_{\varepsilon,k} |\delta\rho_k|^2, \quad (29)$$

という様に、ポテンシャルエネルギーの項だけで記述できる。二行目の等号は、質量密度の変分とポテンシャルのフーリエ変換から得られる。

$$\delta\rho_k = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} d\varphi \exp(ik\varphi) \delta\rho(\varphi), \quad (30)$$

$$V_{\varepsilon,k} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} d\varphi \exp(ik\varphi) V_\varepsilon(\varphi). \quad (31)$$

V_ε は ϕ に対して偶関数であるので、 $V_{\varepsilon,k}$ が実数になる。また、 $V_\varepsilon \leq 0$ で、 V_ε が $0 \leq \phi \leq \pi$ で常に増加する関数であるので、任意の k に対して $V_{\varepsilon,k}$ が負である事が簡単に示される。従って (29) よりエネルギー汎関数の二回変分が負で、エネルギー汎関数が厳密に凹である事が示される。

一方、エントロピーも厳密に凹関数である。エントロピーに関して、次の事がいえる。

$$S[f + \delta f] \leq S[f] + \int d\theta dp \left. \frac{\delta S}{\delta f} \right|_f \delta f - \frac{1}{2} \int d\theta dp \frac{(\delta f)^2}{f}. \quad (32)$$

この不等式の導出の際、我々は $x > -1$ において $\ln(1+x) \geq x - x^2/2$ である事を用いた。不等式に対して $f = f_{k+1}$ および $\delta f = f_k - f_{k+1}$ を代入し、かつ条件 (26) と (27) を用いると、以下の関係式を得る。

$$S[f_{k+1}] - S[f_k] \geq \beta_{k+1} (U - E[f_k]) + \frac{1}{2} \int d\theta dp \frac{(f_{k+1} - f_k)^2}{f_k}. \quad (33)$$

ここでは α_{k+1} に比例する項は、質量保存のために消える。

今、エネルギー汎関数 $E[f]$ が凹である事を用いる。 $k > 1$ に対して、

$$E[f_k] \leq E[f_{k-1}] + \int \left. \frac{\delta E}{\delta f} \right|_{f_{k-1}} (f_k - f_{k-1}) dp d\theta, \quad (34)$$

である。 $\beta_{k+1} \geq 0$ と $E[f_k] \leq U$ が成り立つので、変分問題 (24) から直ちに、(33) が以下の式を示している事が分かる。

$$S[f_{k+1}] - S[f_k] \geq \frac{1}{2} \int \frac{(f_{k+1} - f_k)^2}{f_k} d\theta dp \geq 0. \quad (35)$$

従って、エントロピーは二回目以降の全逐次過程で増加する。エントロピーは上限があるので、収束する。(33) と (35) より、 $E[f_k]$ が U に下から近づいて行く事も導出される。さらに f_k が f に収束して行く事を仮定すると、未定乗数 α および $\beta \geq 0$ も収束する事を証明する事が出来る。この事は f が平衡状態について (26) を満たす事を示している。数学的には f の収束性を証明できないが、我々が解析する予定の問題の全ての場合で、分布関数は収束した。Euler 方程式での類似した場合における収束性の更なる議論は、Turkington and Whittaker の論文 [14] の Sec. IV を参照するとよいだろう。

C. 新しい逐次近似の具体的な計算法

前節で述べた新しい逐次近似を、どのようにして用いるかをこれから具体的に示す。

(26) より、我々は以下の式を得る。

$$f_{k+1} = A_{k+1} \exp \left(-\beta_{k+1} \left(\frac{p^2}{2} + W_k(\theta) \right) \right). \quad (36)$$

ここで $A_{k+1} = \exp(-\alpha_{k+1} - 1)$ および β_{k+1} はこの段階では未知量とする。(22) を用いると、

$$\rho_{k+1}(\theta) = \tilde{A}_{k+1} e^{-\beta_{k+1} W_k(\theta)}, \quad (37)$$

となる。ここで $\tilde{A}_{k+1} = A_{k+1} \sqrt{2\pi/\beta_{k+1}}$ である。この式より (23) を用いて $W_{k+1}(\theta)$ が計算でき、さらにエネルギーが計算できる。

$$E_{k+1} \equiv E[f_{k+1}] = \frac{1}{2\beta_{k+1}} + \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{+\pi} \rho_{k+1}(\theta) W_{k+1}(\theta) d\theta. \quad (38)$$

未定乗数 α_{k+1} および β_{k+1} は (10) と (27) から計算されなければならない、これらから $\tilde{A}_{k+1}$ を得る。Lagrange の未定乗数を数値的に求めるため、次の Lagrangian [19] を定義する。

$$L_k[f](\beta, \alpha) = -S[f] + \beta \left[E_k + \int \left. \frac{\delta E}{\delta f} \right|_{f_k} (f - f_k) dp d\theta - U \right] + \alpha (M[f] - 1). \quad (39)$$

この Lagrangian を用いて、次の関数を定義する。

$$L_k^*(\beta, \alpha) = \inf_f \{ L_k[f](\beta, \alpha) \}. \quad (40)$$

一般に、 L_k^* が凸関数で、 α_{k+1} および β_{k+1} が L_k^* を最大にする唯一の解である事が示される [19].
 $L_k[f](\beta, \alpha)$ が極大である事について、条件 (36) を用いて、我々は L_k^* を計算できる. 計算の都合上、 α の代わりに $\tilde{A}$ を用いると、我々は以下の式を得る.

$$L_k^*(\beta, \tilde{A}) = \log \tilde{A} + \frac{1}{2} \log \beta - \beta \left(U + E_k - \frac{1}{2\beta_k} \right) - \tilde{A} \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta e^{-\beta W_k(\theta)}. \quad (41)$$

凸関数 L_k^* が最大である条件は、 L_k^* の $\tilde{A}$ および β に対する微分が 0 である事である.

$$\frac{\partial L_k^*}{\partial \tilde{A}} = \frac{1}{\tilde{A}} - \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta e^{-\beta W_k(\theta)} = 0, \quad (42)$$

$$\frac{\partial L_k^*}{\partial \beta} = \frac{1}{2\beta} + \frac{1}{2\beta_k} - U - E_k + \tilde{A} \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta W_k(\theta) e^{-\beta W_k(\theta)} = 0. \quad (43)$$

分布関数が収束した極限を考えると、(42) は質量保存、(43) はエネルギー保存に対応している. (42) から $\tilde{A}$ が決まるので、(42) を (43) に代入して β を求める.

$$-\frac{1}{2\beta_{k+1}} - \frac{1}{2\beta_k} + U + E_k - \frac{\int_{-\pi}^{+\pi} d\theta W_k(\theta) e^{-\beta_{k+1} W_k(\theta)}}{\int_{-\pi}^{+\pi} d\theta e^{-\beta_{k+1} W_k(\theta)}} = 0. \quad (44)$$

L_k^* は凸関数であるので、(44) は β_{k+1} に関して唯一解を持つ.

新たに開発した逐次近似の方法で、分布関数を求める手順は以下の通りである.

1. k 番目の逐次近似の計算が終わったところで、(44) を β_{k+1} について、Newton 法に用いて解く.
2. 次に (42) を用いて、 $\tilde{A}_{k+1}$ を得る.
3. 最後に (37) を用いて、新たな密度分布 ρ_{k+1} を求める. これで $k+1$ 番目の逐次近似の計算が終了する.

我々の逐次近似法は、(44) に関して解の一意性は示せるが、最終的に収束する分布関数が一意でない場合がある. SGR モデルの場合に具体的に示すが、もしあるエネルギーで安定な状態と準安定状態が両立しうる場合、初期に与えた密度分布 ρ_0 の形によって、いずれへ収束するかが分かれる. このため、逐次近似法で得られた分布関数が一意でない事に注意する必要がある. だが逆に、この逐次近似法を注意深く用いると準安定状態を発見できるという、強力な利点が存在するという点も注目すべき事と考える.

次章で SGR モデルの解析に我々の逐次近似法を用いた具体例を示す. 我々の方法が特別なモデルにしか適用できないのではないかと問題を避けるため、Appendix B において、周期的境界条件をつけた一次元シートモデルの解析結果を示す. このモデルは力学的シミュレーションでは、相転移点付近の温度の揺らぎが非常に大きく、相転移点付近での振る舞いが解析できないが、我々の手法では短時間で詳細な解析が出来ている.

V. SGR モデルの熱力学的性質

我々の開発した逐次近似法を用いて、(18) の解である安定分布の質量密度 $\rho(\theta)$ を導出する事が出来、そこからミクロカノニカル分布での熱力学量を得る事が出来る. この章の最初の節では、我々は $\rho(\theta)$ について数値解を求め、ソフトニングパラメーター ε が小さい場合の、エネルギーに対する分布の依存性を示す. 次の節では、SGR モデルにおいて ε を変化させた場合に、ミクロカノニカル分布およびカノニカル分布の双方で、相転移のダイアグラムについて議論する.

A. 質量密度、エントロピー、温度曲線

臨界エネルギー $U_c(\varepsilon)$ より高いエネルギーでは、安定な物質分布は一様分布である. この場合、エントロピーは (9) から計算する事が出来、

$$S = \frac{1}{2} (3 \log(2\pi) + 1 - \log \beta), \quad (45)$$

となる。また、温度の逆数は (19) から

$$\beta = (2U - 2\overline{E}_p)^{-1}, \quad (46)$$

となる。ここで、

$$\overline{E}_p = \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{+\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta d\phi V_\varepsilon(\theta - \phi) \quad (47)$$

$$= -\frac{1}{\pi\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2+\varepsilon}} \mathcal{K}\left(\frac{2}{\varepsilon+2}\right), \quad (48)$$

であり、 $\mathcal{K}$ は第一種完全楕円関数 $\mathcal{K}(x) \equiv \int_0^{\pi/2} d\theta / \sqrt{1 - x \sin^2 \theta}$ である。

(46) は、温度の下限が 0 であるために、 $U_{hom} = \overline{E}_p$ より低いエネルギーでは一様分布が存在し得ない事を示している。

$U < U_c(\varepsilon)$ では、安定な質量分布は数値的に求められなければならない。このエネルギースケールでは、(17) および (18) を矛盾なく満たす解を導出する際に、従来の逐次近似では正しい解が収束しない事を、我々は確認している。例えば、解が収束せずに振動したり、収束はするものの温度が負になってしまうといった問題が生ずる。その逆に、IV C 節で示した、我々が開発した逐次近似法では、分布関数が直ちに収束する。

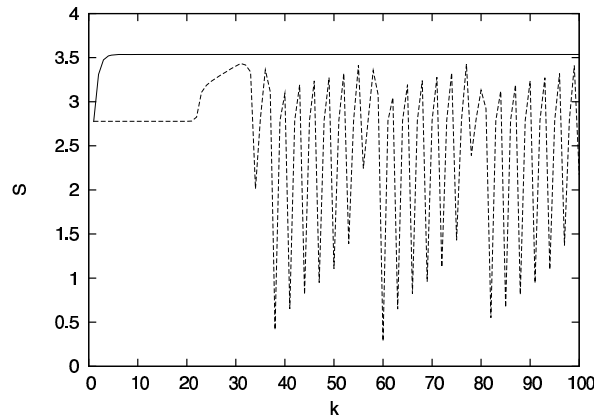


FIG. 3: 二つの逐次近似法による、逐次近似の回数とエントロピーの関係。SGR モデルのパラメーターは $\varepsilon = 10^{-5}$, $U = -1$ とした。実線は我々が開発した方法によるエントロピーの変化を示しており、単調に増加して 10 回前後で収束する事が分かる。破線は従来の逐次近似法によるもので、エントロピーは激しく振動し、100 回の近似でも安定解に収束しない。

図 3 は二つの逐次近似法によるエントロピーの変化を示している。我々の方法ではエントロピーが単調増加して 10 回前後で収束するのにに対し、従来の方法では 100 回の近似でも収束せずに振動を続ける。相転移の臨界エネルギー付近では、我々の逐次近似法でも計算の回数をより多く必要とするが、それでも数百回程度の計算で収束する事を確認している。

図 4 は SGR モデルについて、エネルギー U の関数として温度 $T = \beta^{-1}$ とエントロピーを示している。注目すべきは $U_{top} \leq U \leq U_c$ において負の比熱が存在する事である。また、 $U_{low} \leq U \leq U_{high}$ ではエントロピーは凸の部分をつなぐ破線とほずれている。これはカノニカル分布とマイクロカノニカル分布が与える平衡状態が同一でない事を示している。つまり、エネルギーを一定とするマイクロカノニカル分布では、分布の違いによる曲線の食い違いが生じるエネルギースケールは安定であるが、温度を一定とするカノニカル分布では準安定、あるいは不安定である。質量分布は U_c より高いエネルギーでは一様になるが、これより低いエネルギーではクラスターを形成するようになる。

クラスター形成のような質量分布の局在化を示す秩序パラメーターとして、『磁化』を考える。

$$B = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{i\theta} \rho(\theta). \quad (49)$$

もし質量分布が一様になれば、 $B = 0$ となる。一方で質量が一点に集中すれば、 $B = 1$ となる。局在化の中間状態では、 $0 < B < 1$ となる。図 5 は U の関数として『磁化』をプロットしたものである。 $U < U_c$ では『磁化』は減少関数となるが、 $U = U_c$ で 0 にジャンプする。すなわち、SGR モデルはマイクロカノニカル分布で一次相転移を起こす事を示している。一次相転移の性質は、 $U = U_c$ の周りでのエントロピーを拡大する事 (図 4 のパネル (b) 内に表示) でも確かめられる。この一次相転移は凹凸型のもの [13] である。カノニカル分布では、マイクロカノニカル分布でのエントロピー曲線の共通接線を引く事により相転移の様子が分かる。カノニカル分布での相転移は一次であり、相転移温度 T_{can} は

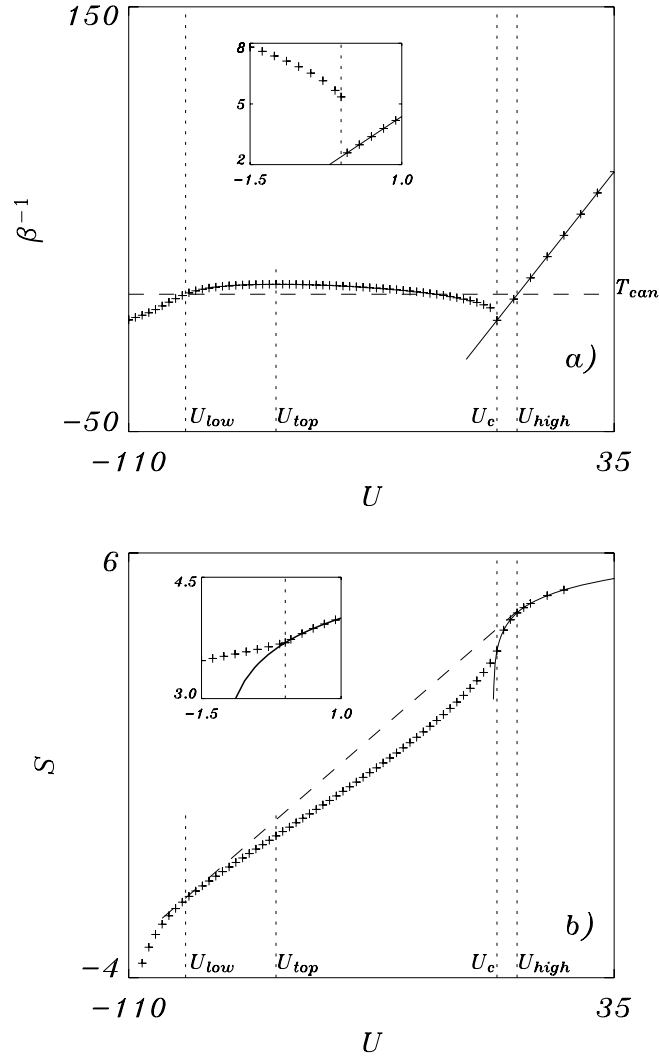


FIG. 4: 温度 (パネル (a)) とエントロピー (パネル (b)) を U の関数として見た図. ここでは $\varepsilon = 10^{-5}$ とした. 四つのエネルギースケールは以下の通り. $U_{low} \simeq -93$, $U_{high} \simeq 6$ はアンサンブル間の食い違いが生じるエネルギー. $U_c \simeq 0$ はマイクロカノニカル分布の相転移点. $U_{top} \simeq -66$ は負の比熱が現れる下限である. $T_{can} \simeq 15$ はカノニカル分布での相転移温度を示している. パネル (b) での破線は, U_{low} と U_{high} でのエントロピー曲線の接線を示しており, この傾きの逆数がカノニカル分布での相転移温度を示す. (a) と (b) の実線は, 一様分布での温度とエントロピーを, 解析的に求めて描いたものである. U_c より低いエネルギーにも実線は伸びており, これは準安定状態を示している. (a) と (b) の内部の小さな図は, 相転移点 U_c 付近の温度とエントロピーの拡大図である. 温度は U_c でジャンプしており, エントロピーは U_c の前後で異なる傾きの曲線に移っている. これらは明らかに, 系が一次相転移を起こしているという特徴を示している.

U_{low} と U_{high} の間でのエントロピーの傾きの逆数から与えられる. $[U_{low}, U_{high}]$ の範囲のエネルギーでは, カノニカル分布の安定状態が存在しない.

典型的な局在化した質量分布を図 6 で示す. この図は, 比熱が負であるエネルギーの場合のものを示している.

一次相転移は準安定状態の存在とも関係付いている. 安定な分布関数を求めた際に, 分布はそのままにエネルギーを連続的に少しずつ変化させる事により, 我々は準安定状態の分布関数を求める事が出来る. $\varepsilon = 10^{-5}$ の場合について, 相転移エネルギー U_c 付近でのエントロピーを, 図 7 で示す. 非一様な準安定状態は $U_c \leq U \leq U_{in}$ に存在する ($U_{in} \simeq 0.16$). 一方で, 一様な準安定状態は $U_{hom} \leq U \leq U_c$ に存在する ($U_{hom} = \bar{E}_p (\varepsilon = 10^{-5}) \simeq -1.19$).

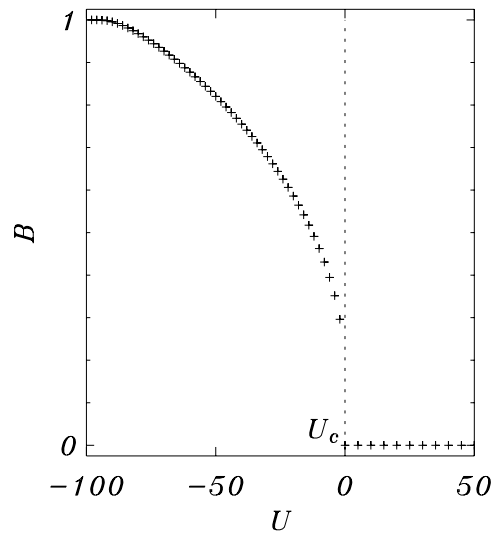


FIG. 5: $\varepsilon = 10^{-5}$ の場合の『磁化』 B とエネルギー U の関係. 秩序パラメーターのジャンプが見られることから, $U_c \simeq 0$ での相転移はミクロカノニカル分布で一次である事を強く示すものとなっている.

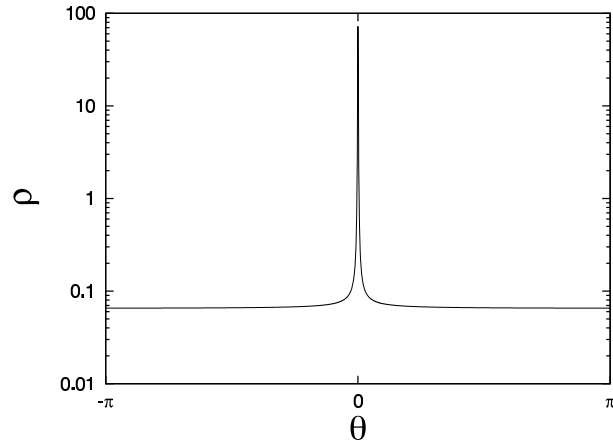


FIG. 6: $\varepsilon = 10^{-5}$, $U = -20.0$ での質量密度分布 $\rho(\theta)$. このエネルギーでは比熱は負である.

B. ソフトニングパラメーター ε への依存性

次にソフトニングパラメーターを大きくした場合の状況を考えてみよう. まずパラメーターを $\varepsilon = 10^{-2}$ とした場合を考える. ミクロカノニカル分布では, 図 8 で示したように $U_{top} \simeq -0.8$ で比熱の符号の変化が起き, $U = U_c \simeq -0.3$ で相転移を起こす. しかし温度はエネルギーの関数として, $U = U_c$ で微分不可能ではあるが連続になるので, 相転移は二次である. また, 秩序パラメーター『磁化』の対称性の破れと相転移の次数が関連している事が, 図 8 (b) からも見取れる. 温度曲線は, この二次相転移が凸凹型である事を示している. ミクロカノニカル分布で二次相転移がこのタイプのものである [13] ためには, 相転移点で比熱のジャンプを見る必要がある.

$\varepsilon = 10^{-5}$ から $\varepsilon = 10^{-2}$ の間で, ミクロカノニカル分布の三重臨界点が存在する. この三重臨界点では次の二つの性質が現れる.

- 温度曲線は U_c より低いエネルギー側から見て, $U = U_c$ で水平になる.
- 準安定の非一様相が存在するエネルギーの上限が U_{in} から U_c に向かって落ちる. 一方で一様相は U_c より低いエネルギーで連続的に不安定相として存在する.

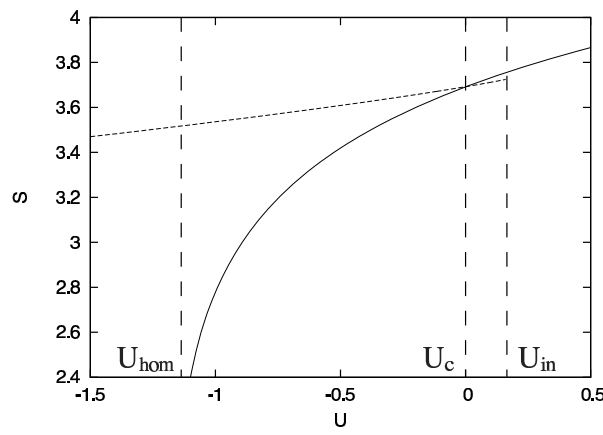


FIG. 7: 高エネルギー領域でのエネルギーとエントロピーとの関係を示す曲線は、一様解（実線）を示す。一方、低エネルギー領域は非一様解（破線）を示す。ここでは $\varepsilon = 10^{-5}$ とした。二つの曲線は $U_c \simeq 0$ で交差する。一様解の系列は低エネルギー側にも伸びており、 $U_{hom} \simeq -1.19$ まで続く。非一様解の系列は高エネルギー側にも伸びており、 $U_{in} \simeq 0.16$ で突然途切れる。

図 10 で、我々はミクロカノニカル分布における臨界エネルギー U_c 、エネルギーの境界 U_{in} および U_{hom} の ε 依存性を示す。ミクロカノニカル分布の三重臨界点は $\varepsilon_T^u \simeq 10^{-4}$ で、この点が準安定な非一様相の存在の境界で、このエネルギーの上限は臨界エネルギーに一致するようになる。これが対称性の破れを伴う三重臨界点の一般的な様相である ([13] の図 6 を参照)。

カノニカル分布での三重臨界点を調べるには、二つの曲線 U_{low} および U_{high} が合流する ε の値を見る必要がある。この値の大まかな見積りは $\varepsilon_T^c \simeq 10^{-1}$ である。カノニカル分布での三重臨界点は、 U_{top} が前述の二つの曲線に合流するところでもあり、負の比熱を持つエネルギースケールが消えるところである。従って、エントロピー曲線での変曲点 U_{top} が消える事により、アンサンブルの違いはカノニカル分布での三重臨界点においてなくなる。相転移の分類を示した論文 [13] の表 1 でも確認できるように、アンサンブルの違いが消えるのは、三重臨界点に関わる時だけである。

結論として、 ε の変化による SGR モデルの相転移ダイアグラムの重要な変更は、ミクロカノニカル分布およびカノニカル分布の三重臨界点の存在によるものである。 $\varepsilon \leq \varepsilon_T^c$ において、アンサンブルの非等価性を示すエネルギースケールが存在する。このような状況は既に今までの論文 [22, 23] で知られている。

VI. 平衡状態への緩和

我々が導出した平衡状態は、果たして正しいものだろうか。そこでハミルトニアンが (1) で与えられる系の N 体シミュレーションを行い、得られた平衡状態の質量分布を数値的にチェックしてみる。シミュレーションの際、 $\varepsilon = 10^{-5}$ とした。質量分布を示す際、比熱が負となる $U = -20$ で解析を行い、時間発展の積分法は六次のシンプレクティック法 [20] を用いた。シミュレーションは国立天文台の GRAPE-5 システム [6] を使用した。SGR モデルの相互作用は基本的には Newton 重力と同じ形をしているので、まずリング状に存在する粒子同士の重力を計算し、その後重力のリングの接線方向の成分のみを取り出す事により、GRAPE システムでも SGR モデルの時間発展を追う事が出来る。

図 12 で我々は数値計算の結果と、逐次近似の方法で得られた平衡状態の密度分布を比較する。ここで示した数値計算の結果は、 $t = 400$ のスナップショットを取り出したものである。シミュレーションは粒子数が有限であり、一つのスナップショットをそのまま取り出したため、テイル部分で揺らぎによりずれが生じているが、質量分布の中心付近はよい一致を示している。

長距離力系では一般に、平衡状態に至る緩和は非常に長い時間がかかる事が知られている [21]。従って、SGR モデルでも同様の状況が生じると考えられる。例えば、我々は粒子が初期に弧状 ($\theta \in [\theta_{min}, \theta_{max}]$) に一様に存在し、運動エネルギーがゼロである “cold start” の状況を考える事が出来る。重力系のシミュレーションでは、ビリアル比 $|2K/V|$ の時間変化をみるが、今回は初期には 0 である。ビリアル比の時間変化は図 13 に示した通りである。パラメーターは図 12 を描く時に用いたものと同じである。この図では、シミュレーションから得られたビリアル比は、逐次近似により導出された平衡状態での値から明らかにずれている。すなわち、系は平衡状態とは異なる『準安定状態』に収束しているとみられる。だが一方で、質量分布 (図 12) を見てみると、こちらは短時間で平衡状態のものに近づくようである。つまり質量分布と速度分布で、緩和状態に至るタイムスケールが異なるようである。同様の状況が現れた過去のモデル [21] から、緩和には N の冪のタイムスケールがかかるだろうと想定される。

エントロピーの極大が存在する時は、緩和に時間がかかる。この状況は一次相転移を引き起こす場合、すなわち $\varepsilon = 10^{-5}$ の場合での臨界エネルギー U_c の付近で起こる。図 14 は初期条件として、粒子を局在化させた時といくぶん広げた時に、温度と『磁化』という二つの統計量を求めて、系が異なる緩和状態に至る事を示している。もし系が、非一様相に

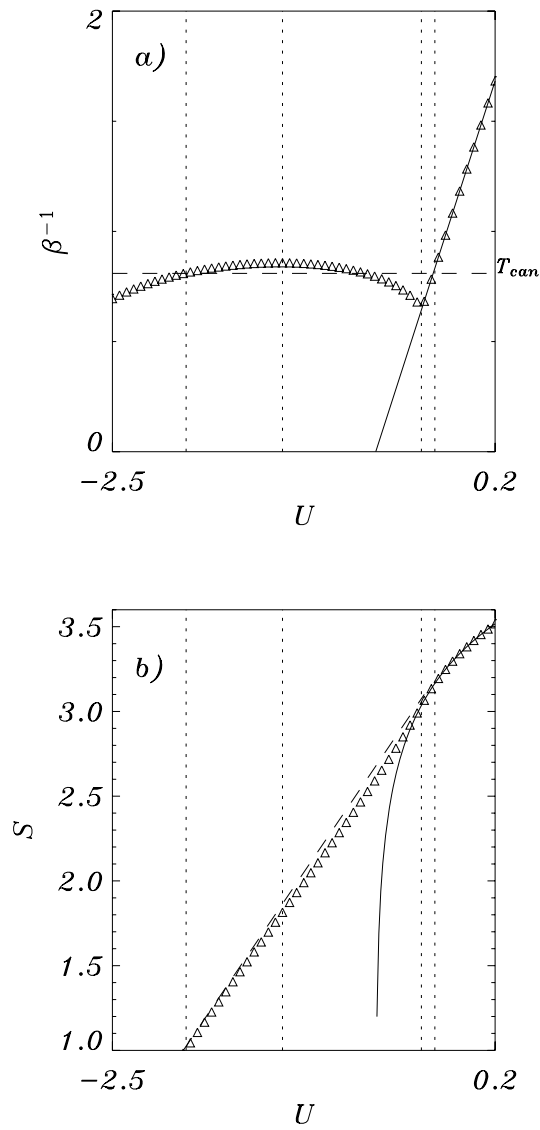


FIG. 8: (a): $\varepsilon = 10^{-2}$ での温度曲線（白い三角）．垂直の破線は左から $U_{low} \simeq -1.98$, $U_{top} \simeq -1.3$, $U_c \simeq -0.32$, $U_{high} \simeq -0.225$ を示す．解析的に得られる一様相の曲線は連続である．図. 4 との大きな違いは、 U_c での温度のジャンプが見られない事である．相転移はミクロカノニカル分布で二次である．一方で、カノニカル分布では $T_{can} \simeq 0.8$ で一次相転移を起こす．(b): $\varepsilon = 10^{-2}$ でのエネルギーとエントロピーの関係（白い三角）．エントロピー曲線は非一様相から一様相（実線）に滑らかに接続する．エントロピー曲線の U_{low} および U_{high} における共通接線となる破線は、アンサンブルによる相転移の違いを示す．

対応する局所的なエントロピーの極大に『近い』ならば、系は幾分速く収束する．逆に粒子が一様に近い状況に分布している時、逆に系は一様相に収束して行く．つまり、臨界エネルギー付近では両相のエントロピーの値がほぼ同じであるため、初期条件により一様分布、非一様分布の平衡分布のいずれかに収束するかが決まる．この二相の間にはエントロピーの障壁が存在し、長距離力系では系が準安定状態に滞在する時間は、粒子数 N に対し $\exp(N)$ 程度で伸びて行く事が見いだされている [24, 25]．

VII. まとめ

本研究では SGR モデルの熱力学的性質を、統計的手法及び数値シミュレーションにより解析した．新しい逐次近似の方法を開発したことにより、平衡状態の密度分布に関する方程式を高速に解く事が可能となった．新たな逐次近似の

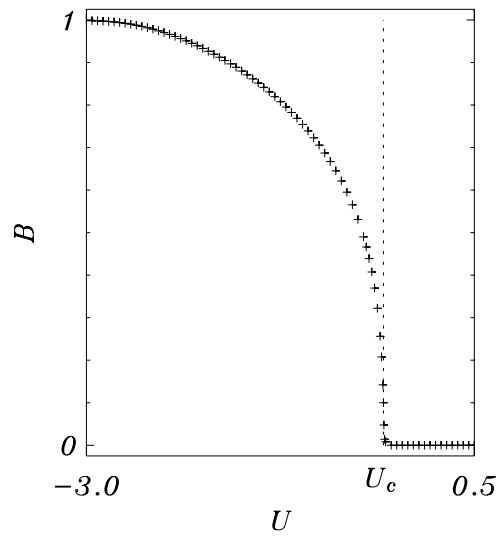


FIG. 9: $\varepsilon = 10^{-2}$ におけるエネルギー U と『磁化』 B の関係。秩序パラメーターは連続的に変化し U_c で 0 になるので、ミクロカノニカル分布での相転移が二次である事を示している。

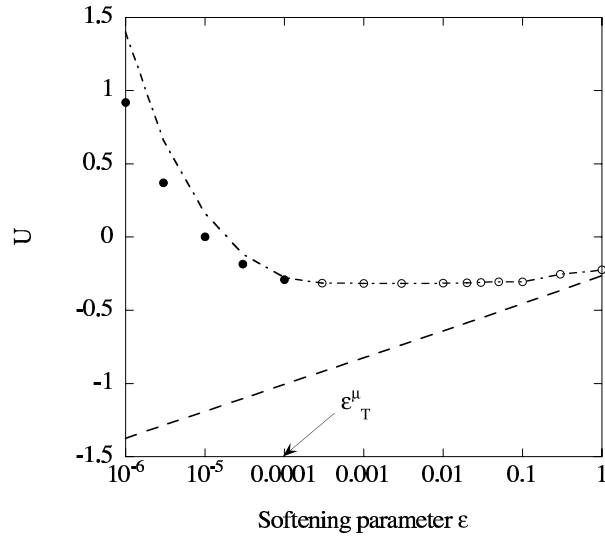


FIG. 10: 一点破線は $U_{in}(\varepsilon)$ を、破線は $U_{hom} = \bar{E}_p(\varepsilon)$ を示す。黒丸はミクロカノニカル分布の一次相転移の臨界エネルギーを、白丸は二次相転移の臨界エネルギーを示す。ミクロカノニカル分布での三重臨界点は $\varepsilon_T^\mu \simeq 10^{-4}$ で、相転移はここで一次から二次に変化し、同時に準安定の非一様相がなくなる。

方法ではエントロピーが増加しながら収束するという特徴を示す。この逐次近似法を用いる事により、ミクロカノニカル分布およびカノニカル分布での相に関するダイアグラムを描く事ができた。ソフトニングパラメーターが十分に小さい場合には、ミクロカノニカル分布では負の比熱を持つエネルギースケールが存在し、カノニカル分布では相転移が一次となる。さらにソフトニングパラメーターを小さくすると、ミクロカノニカル分布では相転移が一次となり、相転移エネルギーで温度のジャンプが見られるようになる。また、ミクロカノニカル分布とカノニカル分布での三重臨界点は一致しない [22]。

シミュレーションにおいて、我々は平衡状態への緩和には非常に長い時間がかかる事を示した。この事は長距離力系で偏在する、準安定状態の存在を示している [12]。準安定状態に対して、HMF モデルにおいては、Vlasov 方程式を用いたアプローチで解析がなされている [21]。さらに一次相転移の起きる領域では、変化しにくい準安定状態が存在し、系が熱平衡状態とは異なる状態に緩和しうる事が示されている。

SGR モデルの以前の論文では、速度分布に関する解析がなされている [10]。類似の解析は空間三次元の Newton 重力

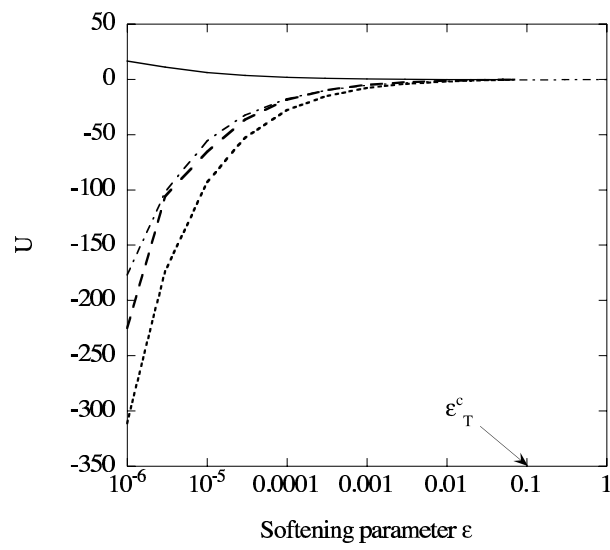


FIG. 11: U_{low} (破線), U_{high} (実線), および U_{top} (一点破線) の ε 依存性. カノニカル分布の三重臨界点は $\varepsilon_T^c \simeq 10^{-1}$ で, ここで三つの曲線が合流する. また, このソフトニングパラメーターは, ミクロカノニカル分布で負の比熱がなくなり, カノニカル分布で相転移が二次に変化するところである. この図で我々は太い破線で曲線を描いているが, これは以前の論文 [10] で見積もられた $U_{top}^{th} \simeq -1/(4\sqrt{2\varepsilon})$ である.

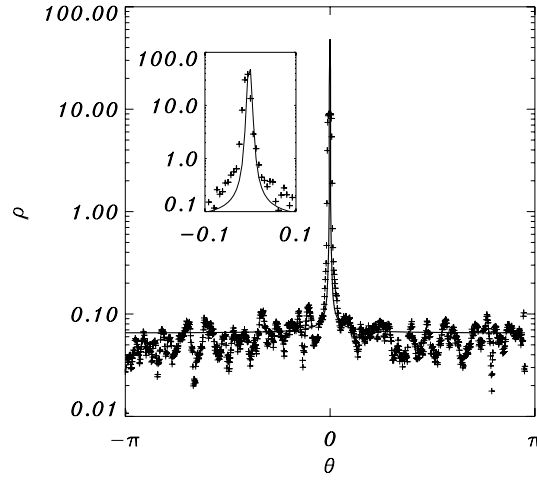


FIG. 12: 逐次近似 (実線) と $\varepsilon = 10^{-5}$, $N = 4000$ のシミュレーション (+マーク) による, 質量分布の比較. 図中の拡大図は密度のピークを示している.

系で最近なされた [26]. 両者ともいくつかのエネルギー領域では非ガウスのな速度分布を示している. SGR モデルに関する今後の研究として, 非ガウスの速度分布の発生等のメカニズムを考察する事も興味深い. 非ガウスの速度分布の発生の解析では, いくつかの有用な解析手法が, HMF モデルの一粒子の拡散を理解するために開発されている [27, 28].

謝辞

筆者の一人である立川はリヨン高等師範学校 (ENS Lyon) に 2004 年 9 月に滞在し, 共著者との活発な議論により研究を遂行する事ができました. 本研究をまとめるにあたり, 早稲田大学の前田恵一教授, お茶の水女子大学の森川雅博教授, 曾田康秀博士, 井口修博士, ぐんま天文台の中道晶香博士との有用な議論と助言が参考になりました. 本研究は国立天文台の GRAPE システムプロジェクト (g04b06) に採択され, 数値シミュレーションは国立天文台の GRAPE-5 システムで行いました. また, 本研究の一部は文部科学省科学研究費補助金 (若手研究 (B) 16740152) の補助のもとになされております.

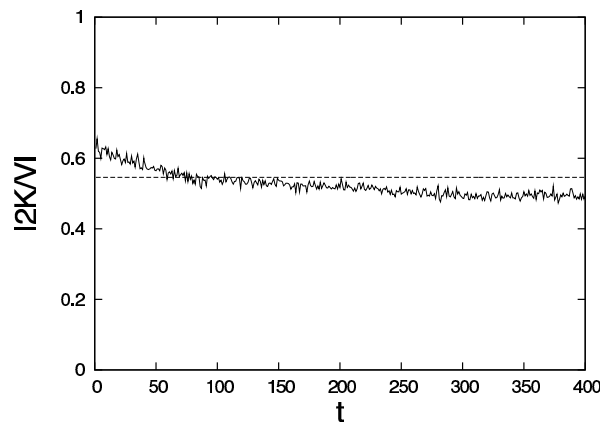


FIG. 13: $\varepsilon = 10^{-5}$, $N = 4000$ の SGR モデルでの、ビリアル比 $|2K/V|$ の時間変化。初期条件として、粒子は $[0, 2\pi/75]$ の範囲に、運動エネルギー 0 で分布させた。すなわち、初期のビリアル比は 0 である。時間発展によってビリアル比は振動しながら漸的に 0.49 に近づいているが、これは破線で示した平衡状態での値 0.55 と明らかにずれている。

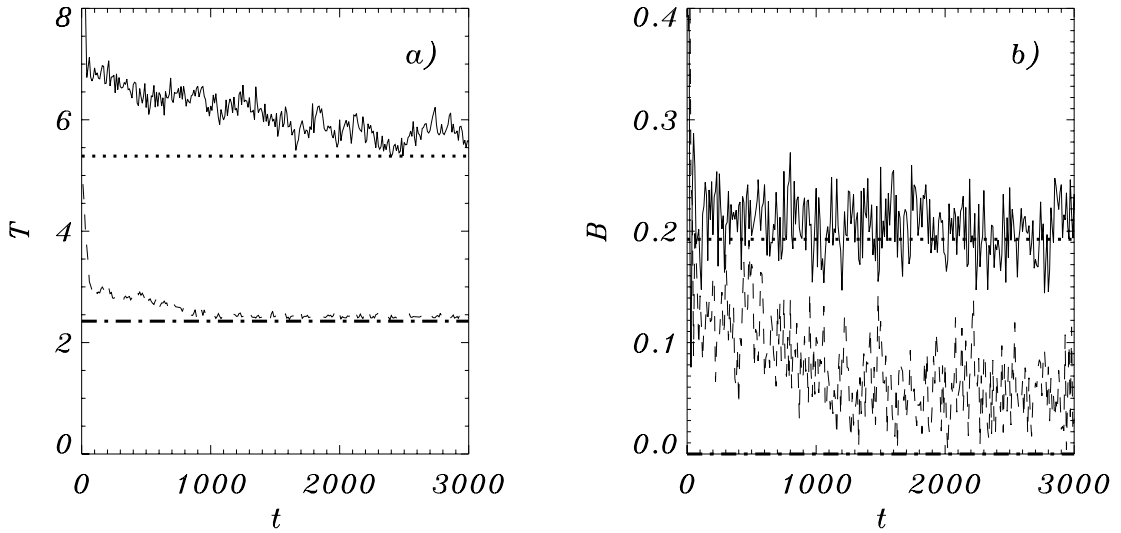


FIG. 14: $U \simeq 0$, $\varepsilon = 10^{-5}$, $N = 10^3$ での、SGR モデルの異なるエントロピー極大状況への緩和。(a) は非一様相（水平の点線）あるいは一様相（水平の一点破線）に対する温度の緩和を示す。粒子が初期に狭い領域 $\theta \in [0, \pi/50]$ （実線）に存在するか、広い領域 $\theta \in [0, \pi/5]$ （破線）に存在するかによって異なる。両者とも、初期の速度分布は“water bag”である。(b) は『磁化』を示している。

これらの方々、団体に感謝したいと存じます。

-
- [1] J. Binney, S. Tremaine, *Galactic Dynamics*, Princeton University Press, Princeton (1987).
 - [2] V. A. Antonov, *Vestnik Leningrad Univ.* **7**, 135 (1962).
 - [3] D. Lynden-Bell, R. Wood, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **138**, 495 (1968).
 - [4] T. Padmanabhan, *Astrophys. J. Supp.* **71**, 651 (1989).
 - [5] D. Heggie, P. Hut, *The Gravitational Million-Body Problem*, Cambridge University Press (2003).
 - [6] A. Kawai, T. Fukushima, J. Makino, M. Taiji, *Pub. Astron. Soc. Japan* **52**, 659 (2000).
 - [7] F. Hohl, M. R. Feix, *Astrophys. J.* **147**, 1164 (1967).
 - [8] T. Tsuchiya, T. Konishi, N. Gouda, *Phys. Rev. E* **50**, 2607 (1994).
 - [9] H. Koyama, T. Konishi, *Phys. Lett. A* **279**, 226 (2001).
 - [10] Y. Sota, O. Iguchi, M. Morikawa, T. Tatekawa, K. Maeda, *Phys. Rev. E* **64**, 056133 (2001).

- [11] M. Antoni, S. Ruffo, Phys. Rev. E **52**, 2361 (1995).
- [12] T. Dauxois, S. Ruffo, E. Arimondo, M. Wilkens (Eds.), “*Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long-Range Interactions*”, *Lecture Notes in Physics* **602**, Springer (2002).
- [13] F. Bouchet, J. Barré, cond-mat/0303307; to be published in Journal of Statistical Physics (2005).
- [14] B. Turkington, N. Whitaker, SIAM J. Sci. Comp. **17**, 1414 (1996).
- [15] T. Tatekawa, F. Bouchet, T. Dauxois, and S. Ruffo, cond-mat/0501583; to be published in Phys. Rev. E (2005).
- [16] J. Messer, H. Spohn, J. Stat Phys. **29**, 561 (1982).
- [17] I. Ispolatov, E. G. D. Cohen, Phys. Rev. Lett. **87**, 210601 (2001).
- [18] 竹内啓, 岩波講座 応用数学 [対象 9] 社会科学における数理的方法, Sec 1.3, (岩波書店, 1995)
- [19] R. T. Rockafellar, *Convex Analysis*, Princeton University Press, Princeton, NJ (1970).
- [20] H. Yoshida, Phys. Lett. A **150** 262 (1990).
- [21] Y. Y. Yamaguchi, J. Barré, F. Bouchet, T. Dauxois, S. Ruffo, Physica A **337**, 36-66 (2004).
- [22] J. Barré, D. Mukamel, S. Ruffo, Phys. Rev. Lett. **87**, 030601 (2001).
- [23] M. Antoni, S. Ruffo, A. Torcini, Phys. Rev. E **66**, 025103 (2002).
- [24] M. Antoni, S. Ruffo, A. Torcini, Europhysics Letters **66**, 645-651 (2004).
- [25] P. H. Chavanis, M. Rieutord, Astron. Astrophys. **412**, 1 (2003). P. H. Chavanis, astro-ph/0404251.
- [26] O. Iguchi, Y. Sota, T. Tatekawa, A. Nakamichi, M. Morikawa, Phys. Rev. E **71**, 016102 (2005).
- [27] F. Bouchet, Phys. Rev. E **70**, 036113 (2004).
- [28] F. Bouchet, T. Dauxois, cond-mat/0407703.
- [29] 一般には他に保存量として全角運動量も含まれるが, 全角運動量も 0 としておく.

APPENDIX A: 不等式の拘束条件に対する LAGRANGE の未定乗数法

逐次近似の方法を開発する際, 我々はエネルギー拘束条件を分布関数について線形化し, 不等式の拘束条件を与えて Lagrange の未定乗数法を適用した. この未定乗数法の適用の際に, エントロピーの特徴を用いた. すなわち, エントロピーが分布関数に対して厳密に凹 (concave) となる汎関数であるという事である. 感覚的には凹と凸 (convex) が逆ではないかと思われるが, ここでは参考としたテキスト [18] に沿って凹と凸を扱って行く事にする.

III 章では, 我々は等式で拘束条件が与えられる場合の Lagrange の未定乗数法を用い, Boltzmann-Gibbs エントロピーが最大になる時の分布関数を導出した. 一方, 我々が新たな逐次近似法を開発する際は, 不等式で拘束条件が与えられる場合の Lagrange の未定乗数法を用いた. 拘束条件が不等式で与えられる場合の, 未定乗数法について考える.

$\mathbf{x}$ を実変数ベクトルとする. 拘束条件が

$$g_j(\mathbf{x}) \leq c_j \quad (j = 1, \dots, m), \quad (\text{A1})$$

で与えられる場合を考え, この条件のもとで関数 $f(\mathbf{x})$ の最大値を求める. この場合の Lagrange 形式を

$$\hat{F}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = F(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^m \lambda_j (c_j - g_j(\mathbf{x})), \quad (\text{A2})$$

と表す事にする. この場合, 次の定理が成り立つ.

定理 1: 次の条件を満たす $\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*$ が存在するならば, $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ は条件 (A1) のもとでの条件付き最大化問題の解を与える.

$$\hat{F}(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = \max_{\mathbf{x}} \hat{F}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}^*), \quad (\text{A3})$$

$$g_j(\mathbf{x}^*) \leq c_j \quad (j = 1, \dots, m), \quad (\text{A4})$$

$$\lambda_j^* \geq 0 \quad (j = 1, \dots, m), \quad (\text{A5})$$

$$\lambda_j^* (c_j - g_j(\mathbf{x}^*)) = 0 \quad (j = 1, \dots, m). \quad (\text{A6})$$

条件付き最大化問題に関しては, 拘束条件の性質により以下の定理が成り立つ.

定理 2: 条件付き最大化問題の解 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ において, 行列

$$\left\{ \frac{\partial g_j}{\partial x_i}, i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, m \right\}$$

の階数が m ならば,

$$\lambda_j^* (c_j - g_j^*(\mathbf{x}^*)) = 0 \quad (j = 1, \dots, m), \quad (\text{A7})$$

を満たす $\boldsymbol{\lambda}^*$ が存在する.

ところで、拘束条件が不等式の場合には、条件式の数が変数の数より多くなる事があり得る。その場合には、条件を書き換える事により定理を成り立たせる事が出来る。

定理 3: 条件 $g_j(x_1, \dots, x_n) \leq c_j$ ($j = 1, \dots, m$) の下で $f(x_1, \dots, x_n)$ の最大値を与える解を $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ とする。このとき

$$g_j(x_1^*, \dots, x_n^*) = c_j$$

となる j の集合を I とし、その大きさを r とする。 $r \times n$ の Jacobi 行列

$$\left\{ \frac{\partial g_j}{\partial x_i}, j \in I \right\}$$

の階数が r に等しければ、 $\lambda^* = (\lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*)$ が存在して、全ての j について $\lambda \geq 0$ かつ $j \notin I$ ならば $\lambda_j^* = 0$ となり、かつ

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} - \sum_j \lambda_j^* \frac{\partial g_j}{\partial x_i} = 0,$$

となる。

次に、関数の凹凸について述べる。関数が凹 であるとは、全ての $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, 0 < \alpha < 1$ に対して、

$$F(\alpha \mathbf{x}_1 + (1 - \alpha) \mathbf{x}_2) \geq \alpha F(\mathbf{x}_1) + (1 - \alpha) F(\mathbf{x}_2) \quad (\text{A8})$$

となることである。(A8) の不等号の向きが逆の場合には、関数が凸 であるという。また、不等号が常に成り立つ場合には、厳密に凹(strictly concave) であるという。 n 次元ベクトルの集合 C が凸であるとは、任意の $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in C, 0 < \alpha < 1$ に対して、常に $\alpha \mathbf{x}_1 + (1 - \alpha) \mathbf{x}_2 \in C$ となる事である。

凸集合に対しては、以下のような定理が成り立つ。

定理 4:

C を閉凸集合、 $\mathbf{x}_0$ を C に属さない点とすると、 C に属する全ての $\mathbf{x}$ に対して、 $\mathbf{c} \cdot \mathbf{x} > \mathbf{c} \cdot \mathbf{x}_0$ となるベクトル $\mathbf{c}$ が存在する。

定理 5:

C を閉凸集合、 $\mathbf{x}_0$ を C の境界点とすると、 C に属する全ての $\mathbf{x}$ に対して、 $\mathbf{c} \cdot \mathbf{x} > \mathbf{c} \cdot \mathbf{x}_0$ となるベクトル $\mathbf{c}$ が存在する。

定理 6:

C を凸集合、 $\mathbf{x}_0$ を C に属さない点とすると、 C に属する全ての $\mathbf{x}$ に対して、 $\mathbf{c} \cdot \mathbf{x} > \mathbf{c} \cdot \mathbf{x}_0$ となるベクトル $\mathbf{c}$ が存在する。

また、凹関数については次の事がいえる。 F を凹関数とする。 $\mathbf{x}$ と f の定義域の内点 $\mathbf{a}$ を選び、0 でない実数 t を取る。これらに対して

$$g_t(\mathbf{x}, \mathbf{a}) = \frac{1}{t} (F(\mathbf{x} + t\mathbf{a}) - F(\mathbf{x})), \quad (\text{A9})$$

と置くと、 F が凹ならば $g_t(\mathbf{x}, \mathbf{a})$ は t に対して単調非増加になる。これは図を描けば容易に理解できる。

従って、 t を正の方向から 0 に近づけた極限

$$\lim_{t \rightarrow +0} g_t(\mathbf{x}, \mathbf{a})$$

が存在する。これを f の $\mathbf{x}$ における $\mathbf{a}$ 方向への微係数と呼ぶ事にし、それを

$$\nabla F(\mathbf{x}, \mathbf{a})$$

で表す事にする。この微係数に対し、次の定理が成り立つ。

定理 7:

凹関数 f が与えられた範囲 C の内点 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ で最大値をとるための必要十分条件は、全ての $\mathbf{a}$ に対して

$$\nabla F(\mathbf{x}^*, \mathbf{a}) \leq 0,$$

となる事である。

もし F が連続で一階微分可能であるならば、

$$\nabla F(\mathbf{x}, \mathbf{a}) = \mathbf{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}},$$

となるので、 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ が最大値を与える必要十分条件は、 $\mathbf{x}^*$ が内点ならば、

$$\left. \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*} = \mathbf{0},$$

となる。次に、条件 $g_j(\mathbf{x}) \leq c_j$ において g_j が凸だとすると、条件を満たす範囲は凸集合になる。 $\boldsymbol{\lambda}^* = (\lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*) \geq 0$ とすると、Lagrange 乗数を用いた関数

$$\tilde{F}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}^*) = f(\mathbf{x}) + \sum_j \lambda_j^* (c_j - g_j(\mathbf{x})),$$

は凹関数となるから、定理 3 と定理 7 を用いて次の定理が導かれる。

定理 8：

F が凹、 g_j が凸関数のとき、 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ が条件 $g_j(\mathbf{x}) \leq c_j$ ($j = 1, \dots, m$) のもとで $F(\mathbf{x})$ を最大とする解となる必要十分条件は、 F, g_j が連続微分可能で、かつ $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ における g_j の Jacobi 行列の階数が r に等しいとき、

$$\begin{aligned} \hat{F}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) &= \max_{\mathbf{x}} F(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}^*), \\ g_j(\mathbf{x}^*) &\leq c_j, \quad \lambda_j^* \geq 0, \\ \lambda_j^* (c_j - g_j(\mathbf{x}^*)) &= 0, \quad (j = 1, \dots, m), \end{aligned}$$

となる $\boldsymbol{\lambda}^*$ が存在する事である。

実は定理 8 の証明では f, g_j の微分可能性は不要である。そこで定理を改めて整理しよう。

定理 9 (Kuhn-Tucker の定理)：

F が凹関数、 g_j が凸関数、 C が凸集合のとき、条件 $g_j(\mathbf{x}) \leq c_j$ ($j = 1, \dots, m$) のもとで、 $\mathbf{x} \in C$ の範囲で F を最大にする解を $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ とする。もし $g_j(x_0) < c_j$ ($j = 1, \dots, m$) となるような $x_0 \in C$ となるような x_0 が存在するならば、

$$\hat{F}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \max_{\mathbf{x}} F(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}^*), \quad (\text{A10})$$

$$g_j(\mathbf{x}^*) \leq c_j, \quad \lambda_j^* \geq 0, \quad (\text{A11})$$

$$\lambda_j^* (c_j - g_j(\mathbf{x}^*)) = 0, \quad (j = 1, \dots, m), \quad (\text{A12})$$

を満たす $\boldsymbol{\lambda}^*$ が存在する。

本問題では

$$F \rightarrow -S, \quad (\text{A13})$$

$$\mathbf{x} \rightarrow f, \quad (\text{A14})$$

$$c_j \rightarrow U, \quad (\text{A15})$$

$$g_j \rightarrow E[f^k] + \int \left. \frac{\delta E}{\delta f} \right|_{f_k} (f_{k+1} - f_k) \text{d}p \text{d}\theta, \quad (\text{A16})$$

$$\lambda_j \rightarrow \beta, \quad (\text{A17})$$

として、定理を用いた。(A10)、(A11) が (24) に、(A12) が (27) に対応している。

APPENDIX B: 逐次近似法の適用例

我々が開発した逐次近似法の威力は、V 章で示した通りである。この近似法は一般的なポテンシャルに対しても利用可能である。ここでは具体例として、比熱が正になる場合のモデルを考える。

HMF モデル [11] は長距離力のモデルとして、様々な解析がなされてきた。ポテンシャルは

$$V_{HMF} = \frac{1}{2N} \sum_{i,j} (1 - \cos(\theta_i - \theta_j)), \quad (\text{B1})$$

で与えられる。この HMF モデルは、実は周期的境界条件を与えた一次元シートモデルのポテンシャルを Fourier 級数展開し、最低次の項のみを取り出したモデルでもある。 $x \in [-\pi, \pi]$ の範囲で展開すると、一次元シートモデルのポテンシャルは次のようになる。

$$|x| = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{(2k-1)^2} \cos((2k+1)x). \quad (\text{B2})$$

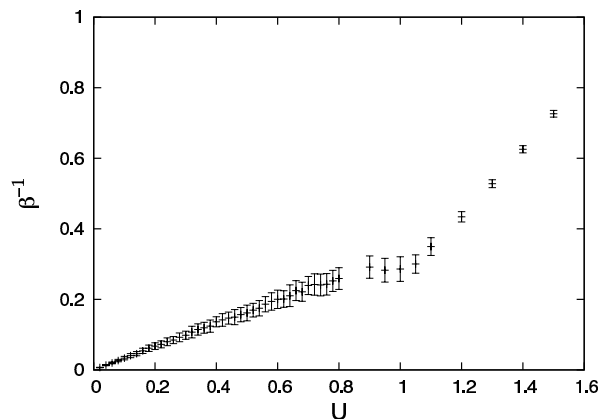


FIG. 15: シミュレーションによる，周期的境界条件付きの一次元シートモデルの温度曲線． $U \simeq 1$ 付近に相転移点があるようだが，温度の揺らぎが非常に大きく，相転移点の判別は出来ない．また，負の比熱の存在，相転移が一次か二次かということも判別ができない．

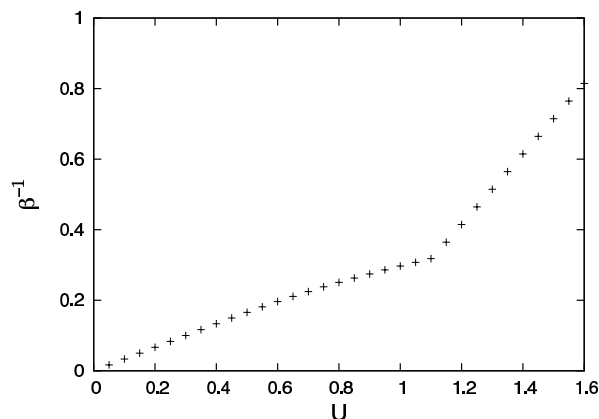


FIG. 16: 逐次近似による，周期的境界条件付きの一次元シートモデルの温度曲線． $U \simeq 1.1$ 付近に相転移点がある．温度曲線の解析から，このモデルでは正の比熱しかなく，相転移が二次である事がわかる．

一次元シートモデルの解析は広くなされており，様々な興味深い結果を示している（例えば [7-9]）．だが，これから示すモデルは周期的境界条件のために，性質が多少変わる．

ここでは温度曲線を描く事を考える．一次元シート系は運動が解析的に記述できるが，ここでは境界条件の困難のために，数値的に運動方程式を解く．ハミルトニアンは運動量変数と座標変数が分離可能であるため，陽的な symplectic integrator が使用可能である [20]．そこで，symplectic integrator を使用してミクロカノニカル分布でのシミュレーションを行い，温度曲線を描く事を考える．ここでシートの枚数は $N = 100$ とした．

周期的境界条件を与えたため，相転移点付近のエネルギーでは揺らぎが非常に大きく，運動エネルギーのばらつきが大きい．図 15 はシミュレーションの結果から得られた温度曲線である．計算時間は Pentium4 3GHz の計算機で 10 日間ほどである．これだけの時間をかけて長時間のシミュレーションを行っても，運動エネルギーの揺らぎは大きく，相転移点と思われる付近では揺らぎが全体の 10% 程度になってしまう．このため，相転移点を定める事や，相転移が一次か二次かを判別する事，比熱の変化を見極める事が出来ない．

一方，我々が開発した逐次近似の方法で温度曲線を描く．図 16 は逐次近似の方法で求めたもので，シミュレーションを行った計算機と同等の計算機で，30 分以下で描く事が出来た．温度の誤差は 10^{-5} 以下である．この解析から，周期的境界条件付きの一次元シートモデルでは相転移点が $U \simeq 1.1$ 付近に存在し，二次相転移を起こす事がわかった．