

# Creutz のセルオートマトンを用いた 2 次元 Ising モデルによる 界面系の熱伝導計算

原野和也, 湯川諭

大阪大学大学院 理学研究科 宇宙地球科学専攻

## 概要

2次元 Ising モデルで、界面が存在する時にどのような熱伝導現象が起こるのかを数値計算によって調べた。系の両端に付けられた熱浴法で更新されるスピンの用いて温度制御し、それ以外では Creutz のセルオートマトンと呼ばれるマイクロカノニカルを実現するアルゴリズムを用いている。また、界面は熱浴部分で捻った磁場を掛ける事で構成する。その結果、熱伝導係数が界面のマクロな運動によって大きくなる事が確認された。また、非平衡系では界面の位置分布が直線上になり、高温側に偏る事が分かった。

## The thermal transportation through an interface on the 2D Creutz Cellular Automaton

Kazuya Harano and Satoshi Yukawa

Department of Earth and Space Science Graduate School of Science Osaka University

## Abstract

We investigate the thermal conduction on the 2D Ising model by a simulation. The system has two reservoirs at the both ends with different temperatures to realize thermal transport states. The spins of the two reservoirs are updated by heat bath algorithm and the others are by Creutz cellular automaton which can realize the micro canonical simulation. To make an interface, the antiparallel magnetic fields are applied to the reservoirs. As a result, we find that the macro dynamics of the interface enhances the thermal conductivity, and that the distribution of the interface position has linear-like slope.

## 1 序文

熱伝導の研究は Fourier の時代から行われているが、現在でもよく分かっていない部分が残されている。例えば、海洋-大気系での熱のやり取りや、熱ダイオード [1] といったヘテロな構造に関連したものが挙げられる。これらの物理的機構の基礎的な解明を目指す事が、本研究の大きな目的の一つである。

自発的な界面生成を伴う粒子系の界面熱伝導については先行研究があり [2]、その研究では気液界面構造のマイクロな機構に関する理論的な解明に興味を持

たれている。このような粒子系のシミュレーションによって熱伝導現象を詳細に調べるようになると、システムサイズを大きくする必要があり、それに伴って緩和時間が長くなる等のシミュレーション上の困難な面が多い。そのような問題を回避する為に、今回は粒子系のような連続自由度を持った系では無く、離散的な Ising 系で熱伝導を取り扱う。Ising 系での熱伝導計算には先行研究があり [3]、相転移にともなう熱伝導率の異常が無いこと等が報告されている。本研究では、このモデルに界面を入れることで熱伝導がどのように変化するかといった事などを調べた。

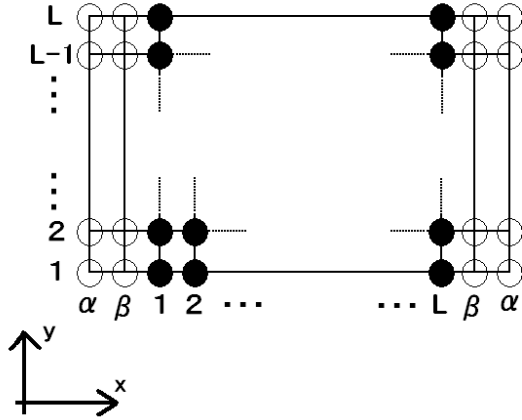


図 1: 黒は磁場付、白は磁場無しの熱浴を表す。境界条件は  $x$  方向は自由、 $y$  方向は周期的になっている。

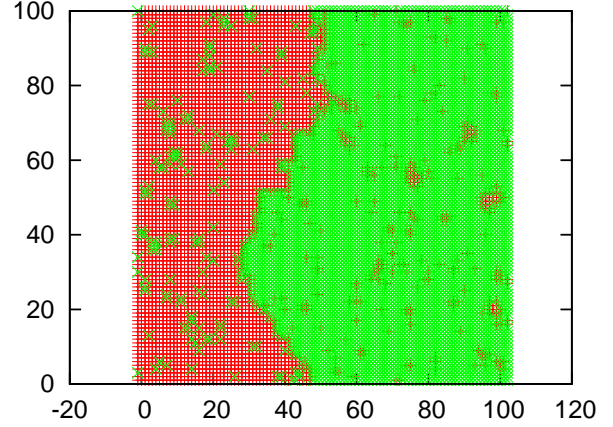


図 2: 平衡系の様子を示したもの。パラメータは温度 2.0、システムサイズ  $100 \times 100$ 、である。また、赤色は up のスピンを表している。

## 2 モデル

シミュレーションは二次元 Ising モデル (正方格子) で行った (図. 1)。両端には温度勾配と界面を作る為の熱浴が付いている。また、実際の系の様子を (図. 2) に示した。このスナップショットから up スピン (down スピン) の多い領域に down スピン (up スピン) の小さなクラスターがある様子が分かる。これらの小さなクラスターが動くことにより、熱流としての役割りを果たしている。

熱浴は温度と磁場の二つのパラメータを持っているが、磁場の値が有限値のものとはゼロのもので二種類に分けている。界面を作る為に磁場をかけたものが  $\alpha$  で磁場の無いものは  $\beta$  と呼ぶ事にする (図. 1)。 $\alpha$  の磁場の向きは、界面を入れる時は両端で逆向きにし、界面を入れない時には両端で同じ向きに入れる。もう一つの熱浴  $\beta$  は、熱浴の性質が系に大きく反映されないようにする為の緩衝材という役割りを果たしている。

また、 $\alpha$  も  $\beta$  も熱浴法のアルゴリズムで動く温度一定のモンテカルロ法 (MC) で時間発展させる。熱浴以外の部分はエネルギーを一定にした Creutz のセルオートマトン (CCA) と呼ばれる方法で時間発展させる [4]。Creutz の方法はミクロカノニカルなサンプリングを実現する手法である。エネルギー保存をシミュレーションで実現する為にはハミルトニアンには運動量変数  $\tilde{\sigma}$  という変数を付ける。

熱浴以外のハミルトニアンを次で定義する。

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} \sigma_{i,j} (\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j+1}) + \sum_{i,j} 4\tilde{\sigma}_{i,j} \quad (1)$$

$L$  は系の一辺の長さで、 $\sigma_{i,j}$  はイジングスピン変数 ( $\sigma_{i,j} \in \{-1, 1\}$ ) である。また、 $\tilde{\sigma}_{i,j}$  はスピンのフリップに対してエネルギーを保存させる為に付けた運動量変数である。この変数は  $\{0, 1, 2, 3\}$  という離散的な値のいずれかをとっている。

第一項はスピンの最近接相互作用を表す項で、シミュレーション上では  $J = 1$  にとっている。第二項は運動量変数からの寄与を表している。また、運動量変数がかノニカル分布することを利用して  $x = i$  ( $i = 1, 2, \dots, L$ ) における温度  $\beta_i$  を決定する。すなわち、 $x = i$  での運動量変数  $\tilde{\sigma}$  の分布関数  $P(i, \tilde{\sigma})$  をパラメータ  $\beta_i$  でフィッティングする。

$$P(i, \tilde{\sigma}) \propto \exp(-4\beta_i \tilde{\sigma})$$

また、熱浴のハミルトニアンは以下のようなものである。

$$\mathcal{H}_\alpha = - \sum_{i,j} \sigma_{i,j} (\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j+1}) + h_{\text{ext}}$$

$$\mathcal{H}_\beta = - \sum_{i,j} \sigma_{i,j} (\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j+1})$$

$h_{\text{ext}}$  は界面を作る為の外部磁場で実際のシミュレーションでは低温側を  $+0.5$ 、高温側を  $-0.5$  にとっている。

系の  $x$  方向の境界条件は、両端で異なる温度を実現する為に自由境界 (スピン変数を 0 に設定) になっている。また、 $y$  方向は周期境界条件である。

## 2.1 Creutz Cellular Automaton

式 (1) で与えられるハミルトニアンに対して、Creutz のセルオートマトンと呼ばれる方法のようにしてスピンを更新していく。

ハミルトニアンから、座標  $(i, j)$  毎にミクロなエネルギー  $E_{i,j}$  を次のように定義出来る。

$$E_{i,j} = -\sigma_{i,j}(\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j+1}) + 4\tilde{\sigma}_{i,j}$$

$E_{i,j}$  が保存するようにスピンをフリップさせる。具体的には次のようになる。

更新はチェッカーボードで行い、座標  $(i, j)$  について  $i+j$  が偶数の点を偶点、奇数の点を奇点と呼ぶ事にする。1 ステップをさらに二つに分けて偶点と奇点を更新する。ここでは偶点を時刻  $t$  に更新し、奇点を時刻  $t + \frac{1}{2}$  に更新すると考える事にする。

時刻  $t$  での状況を考える。時刻  $t + \frac{1}{2}$  と時刻  $t$  での座標  $(i, j)$  におけるエネルギー差  $\Delta E_{i,j} = E_{i,j}^{t+\frac{1}{2}} - E_{i,j}^t$  を考えると、エネルギー保存を実現する為には  $\Delta E_{i,j} = 0$  でなくてはならない。従って、スピンのフリップ出来る条件は次の様になる。

$$\begin{aligned} \Delta E_{i,j} &= 0 \\ \Leftrightarrow 4(\tilde{\sigma}_{i,j}^{t+\frac{1}{2}} - \tilde{\sigma}_{i,j}^t) &= -2\sigma_{i,j}^t \sum_{nn} \sigma_{nn} \\ (\sigma_{i,j}^{t+\frac{1}{2}} = -\sigma_{i,j}^t \text{ に注意}) \\ \Leftrightarrow \tilde{\sigma}_{i,j}^{t+\frac{1}{2}} &= \tilde{\sigma}_{i,j}^t - \frac{1}{2}\sigma_{i,j}^t \sum_{nn} \sigma_{nn} \\ \Rightarrow 0 \leq \tilde{\sigma}_{i,j}^t - \frac{1}{2}\sigma_{i,j}^t \sum_{nn} \sigma_{nn} &\leq 3 \quad (2) \end{aligned}$$

ここで、 $\sum_{nn}$  は座標  $(i, j)$  における最近接の和を表している。 $\sigma_{nn}$  は座標  $(i, j)$  の最近接のスピン変数を表している。今は、偶点の更新を行っているので  $\sigma_{nn}$  は全て奇点であり、時刻  $t$  ではフリップしない。時刻  $t$  で不等式 (2) が満たされるとスピンをフリップさせて、 $\tilde{\sigma}_{i,j}$  を不等式 (2) の中辺の値に更新する。すなわち、

$$\tilde{\sigma}_{i,j}^{t+1} = \tilde{\sigma}_{i,j}^t - \frac{1}{2}\sigma_{i,j}^t \sum_{nn} \sigma_{nn}$$

奇点の更新も上のように偶点と同じ不等式 (2) に従って行われる。

$\tilde{\sigma}$  の変数に関する制限である  $\{0,1,2,3\}$  という数字の集合に必然性は無い。スピンの状態の遷移図を書くと分かるように、一つのスピンをフリップした時に移り変わるのは  $(-4 \leftrightarrow +4), (-2 \leftrightarrow +2), (0 \leftrightarrow 0)$  の 3 組だけであるから、必要になるのは離散的な 3 つの数字である。大きい数字をどこで打ち切るかという問題があるが、あまり大きい数字を用いてもそこまで励起されるスピンはほとんど存在しないのでメリットが少ない。そこで最低限必要な数字の一つ上を加えたぐらいで止めておくと、結局  $\{0,1,2,3\}$  というセットになる。

## 2.2 熱流と熱伝導係数の定義

熱流は高温側と低温側の二つの熱浴における、エネルギーの出入りを計算することで得られる。系の内部ではエネルギーが保存されるフリップしか起きない事を考えれば、熱流を次のように定義出来る。

$$J = \frac{\Delta E_{ht} - \Delta E_{lt}}{L}$$

ここで、 $\Delta E_{ht}, \Delta E_{lt}$  はそれぞれ高温側、低温側における 1 ステップでの熱浴のエネルギー変化を表している。このように定義された熱流と「熱流が温度勾配に比例する」という Fourier 則を用いると以下のようにして熱伝導係数  $\kappa$  が定義される。

$$\begin{aligned} J &= -\kappa \nabla T \\ \kappa &= -\frac{J}{\nabla T} \\ &= -\frac{JL}{\Delta T} \end{aligned}$$

$\Delta T$  は系にかけた温度差で、最後の等式では実現される温度勾配が直線である事を用いた。

## 3 結果と考察

上で定義した熱伝導係数  $\kappa$  をシミュレーションした結果が (図.3) である。これらのグラフは 5 回のサンプル平均と  $10^7 MCS$  の時間平均によって得られたものである。このグラフでは界面の存在によって熱伝導率が上昇している事が確認出来る。また、 $L = 100$  程度で熱伝導係数のサイズ依存性はほとんど見られなくなった。

(図.3) の (b) を見ると、 $T \sim 2.2$  の転移点付近で最も熱伝導が良くなっている事が分かる。(図.4) は、界面位置  $x$  の時系列を示したものであるが、 $5 \times 10^6 MCS$  程度の時間数で界面が系を一往復し

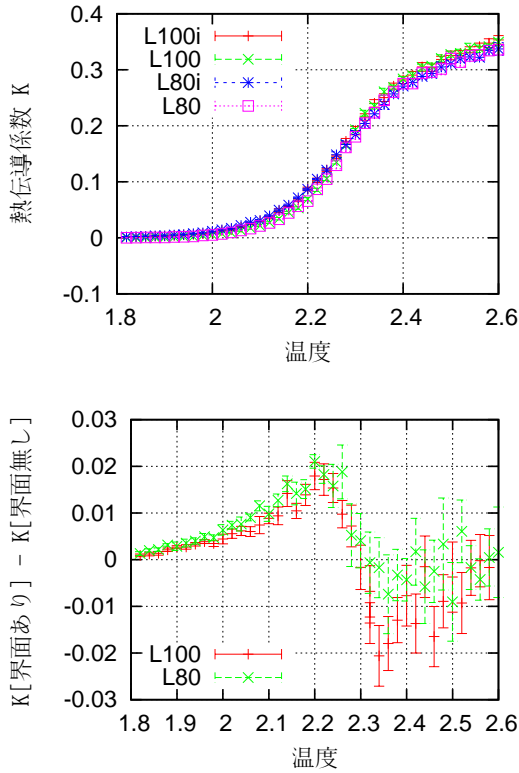


図3: (a)(上図) システムサイズは  $100 \times 100$  及び  $80 \times 80$ . 'i' は「界面あり」を意味している。転移点は  $T_c \sim 2.27$  である。(b)(下図)(a)において「界面あり」の  $\kappa$  から「界面無し」の  $\kappa$  を差し引いたグラフ。  $T \sim 2.2$  で最も大きく違っている。

ている様子が分かる。これは  $\kappa$  の時間平均  $10^7$  よりも短く、熱伝導率の上昇は界面のマクロな運動によって引き起こされていると言える。すなわち、大きなエネルギーを持つ界面の動きが小さなクラスターが運ぶ熱に上乗せされたようになっている (図.2)。

また、これに関連して界面の位置の頻度分布を測定した。界面の位置  $Pos$  は、次のようにして各列での磁化の絶対値最小を求める事により決定した。

$$Pos = \min_{1 \leq i \leq L} \left| \sum_{j=1}^L \sigma_{i,j} \right|$$

また、頻度分布は  $10^6$  MCS 後の状態をスナップショットで観測したものを  $10^4$  個集めて合計したものである。その結果が (図.5) である。平衡系では界面の位置を選ぶような非対称は無い筈なので、どの箇所でもほぼ一様に分布している。しかし、非平衡系では分布の形が高温側に向かって直線状に増加していく様子が観測された。高温側に位置が偏る理由として、

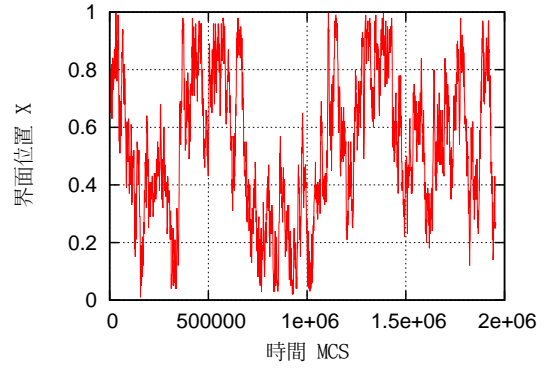


図4: 界面位置の時系列を表したグラフ。縦軸は  $L$  で規格化されている。平均温度が 2.0、温度差は 0.1 ( $x = 1$  が高温側、 $x = 0$  が低温側) である。

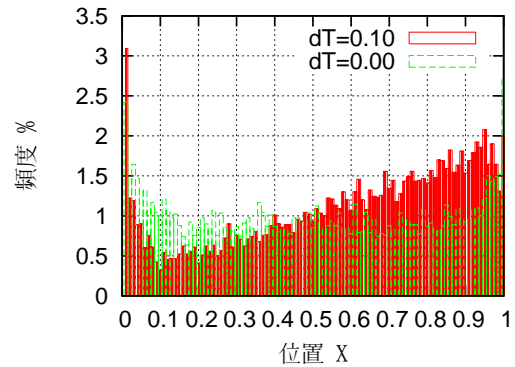


図5: 非平衡系での界面位置分布を示している。パラメータや縦軸は 4 と同じ。

エントロピーの増加による自由エネルギーの減少が考えられる。しかし、直線上になる理由はよく分かっていない。

界面による熱伝導率の上昇や界面位置の分布等はラフニング転移と深く関わっていると考えられる為、3次元に拡張した計算を実行中である。

## 参考文献

- [1] B.Li, L.Wang, G.Casati, Phys. Rev. Lett **93**, 194301 (2004).
- [2] F.Ogushi, S.Yukawa, N.Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 827 (2006).
- [3] K.Saito, S.Takesue, S.Miyashita, Phys. Rev. E **59**, 2783 (1999).
- [4] M.Creutz, Ann. Phys. (N.Y.) **167**,62 (1985).