

非線形系における外部雑音誘起型

相転移の動的側面

東大・理、椎野正寿

平衡系における熱ゆらぎの果す役割は、これまで大いに調べられ、特に動的臨界現象の理論においては、マクロ変数の従う Langevin 方程式が多くの場合につき、相転移に伴う各種の臨界異常をきわめて見事に説明することができて¹⁾いる。これから、ゆらぎの概念が重要視されるようになり、確率過程論が物理現象の理解に欠かすことのできないものとなつて²⁾いる。最近、化学反応系等のような非平衡非線形系において、ある種の分歧パラメータによつて制御される分歧現象の安定・不安定性について調べることに同心力を集めて³⁾いるがなかでも、通常外から制御可能な分歧パラメータにゆらぎが存在する場合には、その外部ゆらぎに伴つて新しい型の転移が起きることが知られ話題をよんで^{2,3)}いる。これは生態学や化学反応における系で、環境ゆらぎが存在する場合に相当するものじみると考えると理解しやすい。

ここで先ず次のようなモデル的化学反応系をとりあげ²⁾みる。



X の濃度 $[X] = x$

$$\dot{x} = \tilde{\lambda}x - x^2 \quad (2)$$

$$\tilde{\lambda} \equiv a - b$$

とみたす。但し a, b は $[A], [B]$ に比例した量であり、適当にスケールしてあるものとする。 $\tilde{\lambda}$ は分歧パラメータとなつていて、 $\tilde{\lambda}$ が負から正の値に変化する時、安定な定常解は $x=0$ から $x=\tilde{\lambda}>0$ に移行する。reservoir a, b がゆく場合には、 $\tilde{\lambda}$ にやさぎがあることになり $\tilde{\lambda}$ を確率変数と考えねばならぬ。最も簡単な場合として $\tilde{\lambda}$ が

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\lambda} \rangle &= \lambda > 0 \\ \langle (\tilde{\lambda} - \lambda)^2 \rangle^{\frac{1}{2}} &= \sigma \\ \tilde{\lambda} - \lambda &; \text{白色雑音} \end{aligned} \quad \left. \right\} \quad (3)$$

の性質をもつてみるとした時には、(2)式を次のよき確率微分方程式と考えてとりあつかわなければならぬことになる。

$$dx = (\lambda x - x^2) dt + \sigma x dB \quad (4)$$

但し、Wong, Zakai の定理⁴⁾をふまえて上式は Stratonovic 型であるとしておく。(4)式は Ito 型に変換されて

$$dx = \left\{ \left(\lambda + \frac{1}{2}\sigma^2 \right)x - x^2 \right\} dt + \sigma x dB \quad (5)$$

と表わされる。従つて確率密度関数 $F(x, t)$ のみで $\frac{\partial F}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 - \left(\lambda + \frac{1}{2}\sigma^2 \right)x \right) F + \frac{1}{2}\sigma^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x^2 F) \quad (6)$

となり、定常分布は (6) 式の左辺を 0 とおいて

$$F_{st}(x) = \frac{\left(\frac{2\lambda}{\sigma^2}\right)^{\frac{2\lambda}{\sigma^2}}}{P\left(\frac{2\lambda}{\sigma^2}\right)} x^{\frac{2\lambda}{\sigma^2}-1} \exp\left(-\frac{2x}{\sigma^2}\right) \quad (7)$$

を得られることがわかる。 $F_{st}(x)$ は $\lambda > \frac{\sigma^2}{2}$, $\lambda < \frac{\sigma^2}{2}$ に
対応して、図 1 のように most probable value が定
性的に異なる分布となる。すなはち、環境や λ の増加に伴い、
 $\lambda = \frac{\sigma^2}{2}$ を境にして新しい型の転移が起きているものと考え
られるのである。この転移を外部雑音誘起型相転移と呼
んでおくことにする。(7)式より

$$\begin{aligned} x_M &= \lambda - \frac{1}{2}\sigma^2 \quad (\lambda > \frac{1}{2}\sigma^2) \\ \langle x \rangle &= \lambda \\ \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle &= \frac{1}{2}\lambda\sigma^2 \end{aligned} \quad (8)$$

が得られる。

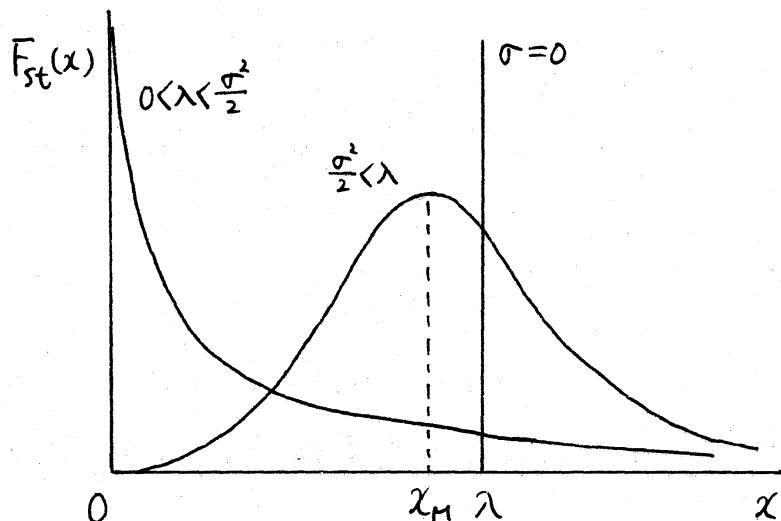


図 1. 定常分布 $F_{st}(x)$ との関係。

上に述べたような型の転移を示す系の動的な性質を調べることは、非常に興味深いものであるが、系が本質的に非線形であるため相関関数やパワー・スペクトル等を求めるることは困難をきわめ、実際にそのような計算が行なわれた例はないようである。ここでは外部雑音の大きさを表すパラメータの展開パラメータにとって $X - \langle X \rangle$ についての時間相関関数を σ^2 のオーダーまで近似で求めてみることにする。この方法はシステム・サイズ“偏命”⁵⁾と本質的に同じものであると言えられる。 $\frac{1}{2}\sigma^2$ を入でみるとして先ず(6)式に対して、変数変換

$$\begin{aligned} X &= X(t) + \sigma \xi \\ F(x, t) &\longrightarrow P(\xi, t) \end{aligned} \tag{9}$$

を行うと $P(\xi, t)$ の従う方程式は

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} &= \frac{\partial P}{\partial \xi} \sigma^{-1} \dot{X}(t) + \sigma^{-1} \frac{\partial}{\partial \xi} \left\{ (X + \sigma \xi)^2 - (\lambda + \frac{\sigma^2}{2})(X + \sigma \xi) \right\} P \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} (X + \sigma \xi)^2 P \end{aligned} \tag{10}$$

となる。 σ^{-1} の項は

$$\dot{X}(t) + X(t)^2 - \lambda X(t) = 0 \tag{11}$$

とするとこれにより消去できる。(11)式は外部雑音のない時の決定論的な式となる。3. $X(t)$ として

$$\dot{X}(t) = 0 \tag{12}$$

といつて得られる定常解

$$X = \lambda \quad (13)$$

を選ぶと (10) 式は

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\lambda \xi - \frac{\sigma^2}{2} \xi - \frac{\sigma}{2} \lambda + \sigma \xi^2 \right) P \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} (\lambda^2 + 2\sigma \lambda \xi + \sigma^2 \xi^2) P \end{aligned} \quad (14)$$

となる。このモーメント

$$\langle \xi^n \rangle = \int \xi^n P(\xi, t) d\xi \quad (15)$$

の従う方程式は (14) 式を用いて部分積分を行うことにより、
次のように求まる。ただし ξ の定義域は $x > 0$ に対応して
(9) 式より決まる領域であるとし、その両端での P の値は
任意の t に対して 0 になつてゐる。

$$\frac{d \langle \xi \rangle}{dt} = -\left(\lambda \langle \xi \rangle - \frac{\sigma^2}{2} \langle \xi \rangle - \frac{\sigma}{2} \lambda + \sigma \langle \xi^2 \rangle \right)$$

$$\frac{d \langle \xi^2 \rangle}{dt} = -(2\lambda \langle \xi^2 \rangle - 2\sigma^2 \langle \xi^2 \rangle - 3\sigma \langle \xi \rangle \lambda + 2\sigma \langle \xi^3 \rangle - \lambda^2)$$

$$\begin{aligned} \frac{d \langle \xi^3 \rangle}{dt} &= -3\lambda \langle \xi^3 \rangle + \frac{9}{2} \sigma^2 \langle \xi^3 \rangle + \frac{15}{2} \sigma \lambda \langle \xi^2 \rangle \\ &\quad + 3\lambda^2 \langle \xi \rangle - 3\sigma \langle \xi^4 \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d \langle \xi^4 \rangle}{dt} &= -4\lambda \langle \xi^4 \rangle + 8\sigma^2 \langle \xi^4 \rangle + 14\sigma \lambda \langle \xi^3 \rangle \\ &\quad + 6\lambda^2 \langle \xi^2 \rangle - 4\sigma \langle \xi^5 \rangle \end{aligned}$$

...

(16)

時間相関関数 $\langle \xi(t) \xi(0) \rangle_{eq}$ は

$$\langle \xi(t) \xi(0) \rangle_{eq} = \langle \xi_0 \langle \xi \rangle_t \rangle_{eq} \quad (17)$$

の関係を利用して求めよと述べてある。但し $\langle \xi \rangle_t$ は、

$t=0$ のとき $\xi = \xi_0$ の下での、時刻 t における条件平均値である。 (16) 式より

$$\langle \xi \rangle_t = e^{-\lambda t} \xi_0 + e^{-\lambda t} \int_0^t e^{\lambda s} \left(\frac{\sigma^2}{2} \langle \xi \rangle_s + \frac{\sigma}{2} \lambda - \sigma \langle \xi^2 \rangle_s \right) ds \quad (18)$$

と積分形であるから $\langle \xi \rangle_t$ の時間相関関数は

$$\begin{aligned} \langle \xi_0 \langle \xi \rangle_t \rangle_{eq} &= e^{-\lambda t} \langle \xi_0^2 \rangle_{eq} \\ &\quad + e^{-\lambda t} \int_0^t e^{\lambda s} \left(\frac{\sigma^2}{2} \langle \langle \xi \rangle_s \xi_0 \rangle_{eq} + \frac{\sigma}{2} \lambda \langle \xi_0 \rangle_{eq} - \sigma \langle \langle \xi^2 \rangle_s \xi_0 \rangle_{eq} \right) ds \end{aligned} \quad (19)$$

と書きあらわす。これは σ^2 までの近似で、以下においてもこれを用いて求めることにする。従つてまず、 (19) 式の形から積分記号の中には

$$\langle \langle \xi \rangle_s \xi_0 \rangle_{eq} = e^{-\lambda s} \langle \xi_0^2 \rangle_{eq} \quad (20)$$

と近似し、 $\langle \xi^2 \rangle_t$ については σ^1 までとすればよしとがわかる。

$$\begin{aligned} \langle \xi^2 \rangle_t &= e^{-2\lambda t} \xi_0^2 + e^{-2\lambda t} \int_0^t e^{2\lambda s} \left(2\sigma^2 \langle \xi \rangle_s + 3\sigma\lambda \langle \xi \rangle_s \right. \\ &\quad \left. - 2\sigma \langle \xi^3 \rangle_s + \lambda^2 \right) ds \\ &= e^{-2\lambda t} \xi_0^2 + e^{-2\lambda t} \int_0^t e^{2\lambda s} \left(\lambda^2 + 3\sigma\lambda e^{-\lambda s} \xi_0 - 2\sigma \langle \xi^3 \rangle_s \right) ds \end{aligned} \quad (21)$$

ここで $\langle \xi^3 \rangle_s$ は σ^0 までよいので

$$\begin{aligned}\langle \xi^3 \rangle_t &= e^{-3\lambda t} \xi_0^3 + e^{-3\lambda t} \int_0^t e^{3\lambda s} 3\lambda^2 \langle \xi \rangle_s ds \\ &= e^{-3\lambda t} \xi_0^3 + \frac{3}{2} \lambda \xi_0 (e^{-\lambda t} - e^{-3\lambda t})\end{aligned}\quad (22)$$

とおいた

$$\begin{aligned}\langle \langle \xi^2 \rangle_s \xi_0 \rangle_{eq} &= e^{-2\lambda s} \langle \xi_0^3 \rangle_{eq} + \frac{\lambda}{2} (1 - e^{-2\lambda s}) \langle \xi_0 \rangle_{eq} \\ &\quad + \frac{1}{\lambda} (2\sigma \langle \xi^4 \rangle - 3\sigma \lambda \langle \xi^2 \rangle) (e^{-3\lambda s} - e^{-2\lambda s})\end{aligned}\quad (23)$$

が得られる。 $\langle \xi_0^m \rangle_{eq}$ は一般に (16) 式より

$$\frac{d \langle \xi^m \rangle}{dt} = 0 \quad (24)$$

とおいたより

$$\begin{aligned}\langle \xi_0 \rangle_{eq} &= a_0 + a_1 \sigma + a_2 \sigma^2 + \dots \\ \langle \xi_0^2 \rangle_{eq} &= b_0 + b_1 \sigma + b_2 \sigma^2 + \dots \\ \langle \xi_0^3 \rangle_{eq} &= c_0 + c_1 \sigma + c_2 \sigma^2 + \dots \\ \langle \xi_0^4 \rangle_{eq} &= d_0 + d_1 \sigma + d_2 \sigma^2 + \dots\end{aligned}\quad (25)$$

の形で順次求めるべくとる。

$$a_0 = a_1 = a_2 = 0, \quad b_1 = b_2 = 0$$

$$b_0 = \frac{\lambda}{2}, \quad c_1 = 2\lambda, \quad d_0 = \frac{3}{4} \lambda^2, \quad \dots \quad (26)$$

等と得られるので、 ξ についての相関函数は (19), (20), (23), (26) 式より σ^2 までの近似で

$$\langle \xi(t) \xi(0) \rangle_{eq} = \frac{\lambda}{2} e^{-\lambda t} + e^{-\lambda t} \frac{\lambda}{4} \sigma^2 t + \frac{\sigma^2}{2} (e^{-2\lambda t} - e^{-\lambda t}) \quad (27)$$

となる。

t が十分小の short time approximation では (27) 式は

$$\langle \xi(t) \xi(0) \rangle_{eq} = \frac{\lambda}{2} e^{-(\lambda + \frac{\sigma^2}{2})t} \quad (28)$$

と近似されるが、特に注目すべきことはあるまい。しかし long time approximation を行うと興味ある結果が導かれる。今

$$\langle \xi(t) \xi(0) \rangle_{eq} = \frac{\lambda}{2} e^{-\lambda t} G(t) \quad (29)$$

とおいて $\sigma^2 t$ を一定に保ち $t \rightarrow \infty, \sigma^2 \rightarrow 0$ とすると

$$G(t) \rightarrow 1 + \frac{1}{2} \sigma^2 t \quad (30)$$

となるので相関函数の long time tail は十分小さな σ^2 に対して

$$\langle \xi(t) \xi(0) \rangle_{eq} \sim \frac{\lambda}{2} e^{(-\lambda + \frac{\sigma^2}{2})t} \quad (31)$$

と近似できるであろう。こゝより緩和時間は、 σ^2 の増大に伴

$$\frac{1}{\lambda - \frac{\sigma^2}{2}} \quad (\sigma^2 \ll 1) \quad (32)$$

の型の変化をすることがわかる。(8)式で表わされる most probable value の変化に伴うこの緩和時間の異常は、最近の A. Schenzle et al.⁶⁾ による固有値を求める方法で得られた結果と一致して興味深い。彼等は (4) 式における非線形部分を一般化した

$$dx = (\lambda x - x^n) dt + \sigma x_0 dB \quad (33)$$

に対応し Fokker - Planck 演算子の固有値を求めて、

るが、それによると離散固有値の最小のもの γ_1 は

$$\gamma_1 = (n-1)\lambda - \frac{1}{2}(n-1)^2\sigma^2 \quad (34)$$

と与えられていく。 $n=2$ とすると $\frac{1}{\gamma_1}$ は (32) 式に一致していふのがわかる。さしに、(34) 式で表わされる一般の結果はこれまで述べてきた展開の方法で同様に求めることができるのである。詳細は省略するが、この場合には (27) 式の代りに

$$R(t) \equiv \langle (\xi(t) - \langle \xi \rangle)(\xi(0) - \langle \xi \rangle) \rangle$$

$$\begin{aligned} &= e^{-\lambda t} \left[b_0 + b_2 \sigma^2 + \frac{\sigma^2}{2} b_0 t - \frac{\sigma^2}{2} \frac{\lambda^{\frac{1}{n-1}}}{\tilde{\lambda}} - \frac{n(n-1)}{2} \lambda^{\frac{n-2}{n-1}} \sigma^2 \left\{ \frac{c_1(e^{-\tilde{\lambda}t} - 1)}{-\tilde{\lambda}} \right. \right. \\ &\quad + \frac{\lambda^{\frac{2}{n-1}}}{2\tilde{\lambda}} a_1 \left(\frac{e^{-\tilde{\lambda}t} - 2}{\tilde{\lambda}} \right) + \frac{\lambda^{\frac{1}{n-1}}}{\tilde{\lambda}} b_0 \left(3 - \frac{3}{2} n(n-1) \frac{\lambda}{\tilde{\lambda}} \right) \left(t + \frac{e^{-\tilde{\lambda}t} - 1}{\tilde{\lambda}} \right) \\ &\quad \left. \left. + n(n-1) \frac{\lambda^{\frac{n-2}{n-1}}}{\tilde{\lambda}} \left(d_0 - \frac{3}{2} \frac{\lambda^{\frac{2}{n-1}}}{\tilde{\lambda}} b_0 \right) \left(\frac{e^{-2\tilde{\lambda}t} - 1}{-2\tilde{\lambda}} + \frac{e^{-\tilde{\lambda}t} - 1}{\tilde{\lambda}} \right) \right\} \right. \\ &\quad \left. - \frac{n(n-1)(n-2)}{16} \lambda^{\frac{n+1}{n-1}} \sigma^2 \frac{1}{\tilde{\lambda}^3} (2\tilde{\lambda}t) \right] \end{aligned} \quad (35)$$

が得られる。⁷⁾ ここで a_i, b_i, c_i は (25) 式より求まる定数であり $\tilde{\lambda} = (n-1)\lambda$ である。(35) 式において $\sigma^2 t = \text{一定}$, $t \rightarrow \infty$, $\sigma \rightarrow 0$ とすると

$$\begin{aligned} R(t) &\rightarrow \frac{\lambda^{\frac{2}{n-1}}}{2(n-1)\lambda} e^{-(n-1)\lambda t} \left(1 + \frac{(n-1)^2}{2} \sigma^2 t \right) \\ &\sim \frac{\lambda^{\frac{2}{n-1}}}{2(n-1)\lambda} e^{-\left\{ (n-1)\lambda - \frac{(n-1)^2}{2} \sigma^2 \right\} t} \end{aligned} \quad (36)$$

が得られる (34) 式に相当していることがわかる。このことより一般の n (自然数) の場合でも緩和時間に slowing down の傾向があることがわかった。

Fokker-Planck 方程式における固有値展開により、
 $R(t)$ が

$$R(t) = \sum_p e^{-\gamma_p(\sigma^2)t} f_p(\sigma^2) \quad (37)$$

$$\gamma_1 \leq \gamma_2 \leq \dots$$

となる。

$$\gamma_1 = (n-1)\lambda + g_1(\sigma^2) \quad (38)$$

とおなじ

$$R(t) = e^{-(n-1)\lambda t} [e^{-g_1(\sigma^2)t} f_1(\sigma^2) + \sum_{p \neq 1} e^{-s_p t - g_p(\sigma^2)t} f_p(\sigma^2)]$$

$$s_p > 0 \quad (39)$$

となる。この場合には、 $\sigma^2 t = \text{一定}$ 、 $t \rightarrow 0$ 、 $t \rightarrow \infty$ の極限操作により、最低固有値の寄与の部分が選ばれ、

$$R(t) \sim e^{-\{(n-1)\lambda + g_1(0)\sigma^2\}t} f_1(0) \quad (40)$$

となる。このようにした $R(t)$ における σ^2 までの近似は

$$R(t) \doteq f_1(0) e^{-(n-1)\lambda t} (1 - g_1'(0)\sigma^2 t) \quad (41)$$

と書き換えたところである。

このような意味で、本研究の、 λ による相関係数を求める方法は、最低固有値に対する良い近似を与えることにな

3) お、 そればかりでなく時間相関関数の実際の形を近似には
あるが、 あらわな形で知ることはできることの利点とも、 てこ
とこであります。

参考文献

- 1) K. Kawasaki : Ann. Phys. (N.Y.) 61 (1970) 1.
- 2) W. Horsthemke and M. Malek-Mansour :
Z. Physik B24 (1976) 307
- 3) L. Arnold, W. Horsthemke and R. Lefever :
Z. Physik B29 (1978) 367
- 4) E. Wong and M. Zakai : Ann. Math. Stat.
36 (1965) 1560
- 5) N. G. van Kampen : Can. J. Phys. 39 (1961)
551
- 6) A. Schenzle and H. Brand : Phys. Lett. 69A
(1979) 313
- 7) M. Shino : to be submitted.