非線型的なマクロ変数の緩和とゆらぎ

東大理　久　保　亮　五

統計力学は線型応答理論として一般的な体系を立てることに成功している。これを非線型の現象にまで拡張することも可能であるが，それとちがった直接的な考え方が望ましいこともあきらかである。その最も簡単な例としては，非線型抵抗のゆらぎの問題があげられよう。これはMacDonald[1] Alkemade[2], Van Kampen[3] らによって論ぜられている。これと似たもっと面倒な問題の例は，キュリ点附近の理想的なワイス・スピン系である。こゝではマルコフ過程をなすマクロな変数の挙動という一般的な問題を考える。

ある系の状態を表わす確率変数をqとする。これは例えばコンデンサ平板の上の電荷でも，あるいはイジングスピン系の磁化でもよいが，その系の大きさΩに比例するという意味でマクロであるとしよう。その確率的変化はマルコフ的であり，Chapman Kolmogorov 方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} P(q,t) = -\int W(q,p)\,dp\; P(q,t) + \int W(q-p,p)\,dp\; P(q-p,t) \qquad (1)$$

に従がうとする。こゝにP(q,t)は時刻tに系が状態qに見出される確率，W(q,p) は状態qからジャンプpをもって状態q＋pに移る確率の時間的な割合である。確率P(q,t)は大きいΩに対して

$$P(q,t) = \exp\{\Omega f(x,t) + \cdots\} \qquad (2)$$

という形をもつ，という意味でマクロ的である，と仮定する。ただし

$$x = q/\Omega$$

とした。xの最も確からしい値をyとすれば，yは

$$f(x,t)=\max \qquad \text{for} \quad x=y(t) \tag{3}$$

という条件できまる。そのまわりのxのゆらぎは

$$\chi=\langle (x-y)^2\rangle=-\frac{1}{\Omega}\Big/\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\Big|_{x=y}$$

で与えられる。平衡では関数fは本質的に自由エネルギーにほかならない。一般の非平衡状態では　$y(t)$，$\chi(t)$は

$$\mathring{y}(t)=C_1(y) \tag{4}$$

$$\mathring{\chi}(t)=2\frac{\partial C_1}{\partial y}\chi+C_2(y) \tag{5}$$

という方程式に従がう。こゝに遷移確率Wはextensive であるとして

$$W(q,p)=\Omega w(x,p) \tag{6}$$

とおき，

$$C_1(y)=\int w(y,p)p\ dp \tag{7}$$

$$C_2(y)=\int w(y,p)p^2\ dp \tag{8}$$

と定義した。

方程式(4)，(5)は(1)から次のようにして導かれる。(2)を(1)にいれると(6)を用いて直ちに

$$\frac{\partial}{\partial t}f(x,t)=-\int w(x,p)dp\left(1-e^{-p\frac{\partial f}{\partial x}}\right) \tag{9}$$

が得られる。このとき，qのジャンプpじたいはミクロであるとし$O(p/\Omega)$を省略した。さらに

$$x=y(t)+z, \qquad f(x,t)=g(z,t) \tag{10}$$

とおけば(9)は

$$\frac{\partial}{\partial t}g(z,t)-\mathring{y}\frac{\partial g}{\partial z}=-\int dp\ w(y+p,p)(1-e^{-p\frac{\partial g}{\partial z}}) \tag{11}$$

が得られる。この式で$\partial g/\partial z$が消えるように関数$y(t)$をえらべばその条件が(4)を与える。さらに

$$g(z,t)=b_1(t)\ z^2+b_2(t)z^3+\cdots$$

$$=-\frac{1}{2\chi(t)}(x-y(t))^2+\cdots \tag{12}$$

のように展開すれば係数b_1, b_2…は順次常微分方程式で定められる。特に$\chi(t)$については(5)が得られる。臨界点ではχは∞になるであろうが，その場合には(12)の高次の項が必要になろう。ふつうには$y(t)$と$\chi(t)$の知識で充分である。

方程式(6)，(7)はy，χの与えられた初期条件に対して解かれる。最も簡単な例はブラウン粒子の速度であってその場合には

$$C_1(y)=-\gamma y,\quad C_2=\text{定数}$$

とおけばよく知られた結果が得られる。　非定常ではC_1，C_2は時間tにあらわに依る。定常的な系では これらはtによらず，平衡は

$$\mathring{y}=0,\quad \mathring{\chi}=0 \tag{13}$$

できまるが，それは平衡の統計力学が与えるものと一致しなければならない。

以上の所論は$q(x)$が多次元変数でもよいが，特に1次元変数であるときには，variance χはyの関数とみられ，(4)，(5)から実際

$$\chi(y)=C_1(y)^2\left[\frac{\chi_0}{C_1(y_0)^2}+\int_{y_0}^{y}\frac{C_2(y')dy'}{[C_1(y')]^3}\right] \tag{14}$$

という関係が導かれる。こゝにy_0はyの初期値，χ_0はそのときのvarianceである。

この方法はvan Kampenのものと似ているが，重要な相違は(2)の形の解を仮定することにより，Fokker-Planck方程式の近似の範囲をこえているこ

とである。それは特に臨界的な現象を扱かうときに重要となろう。この方法は一般に birth and death process とよばれているものに適用される。すなわち，population n に対して，p の death rate を A (n , p , t)，p の birth rate を B (n , p , t) とし，Ω をサイズを表わすものとして

$$A(n,p,t)=\Omega a(x,p,t),\quad B(n,p,t)=\Omega b(x,p,t) \tag{15}$$

$x = n/\Omega$ とおけば(7)，(8)は

$$\begin{aligned} C_1(y,t) &= \sum p\,\{b(y,p,t)-a(y,p,t)\} \\ C_2(y,t) &= \sum p^2\{b(y,p,t)+a(y,p,t)\} \end{aligned} \tag{16}$$

となる。これを用い，x の最確値 y(t)，とその variance $\chi(t)$ の時間的変化をしらべることができる。

理想的なワイス・スピン系に対しては(1)は

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t}P(N_+,N_-,t) \\ &=-\{e^{-\mu-\frac{\alpha}{N}(N_+-N_-)}N_+ + e^{\mu+\frac{\alpha}{N}(N_+-N_-)}N_-\}P(N_+,N_-,t) \\ &\quad + e^{\mu+\frac{\alpha}{N}(N_+-N_--2)}(N_-+1)P(N_+-1,N_-+1,t) \\ &\quad + e^{-\mu-\frac{\alpha}{N}(N_+-N_--2)}(N_++1)P(N_++1,N_--1,t) \end{aligned} \tag{17}$$

の形をとる。こゝに $\mu=\mu_B H/kT$，は外部磁場，$\alpha = J/kT$ はスピン間の相互作用，N_+，N_- はそれぞれ＋，－のスピン数を表わす。

$$\frac{N_+-N_-}{N}=x$$

とおけば

$$w(x,p)=\begin{cases}\frac{1}{2}(1-x)e^{\mu+\alpha x} & (p=2)\\ \frac{1}{2}(1+x)e^{-\mu-\alpha x} & (p=-2)\end{cases} \tag{18}$$

となるから　方程式　(4)，(5)は

$$\overset{\circ}{y}=\sinh(\mu+\alpha y)-y\cosh(\mu+\alpha y) \tag{19}$$

$$\overset{\circ}{\chi}=2\{(\alpha-1)\cosh(\mu+\alpha y)-\alpha y\sinh(\mu+\alpha y)\}\chi$$
$$+2\{\cosh(\mu+\alpha y)-y\sinh(\mu+\alpha y)\} \tag{20}$$

となる。T_c 以上のパラ状態は $\alpha<1$，T_c 以下のフェロ状態は $\alpha>1$ に当る。$\overset{\circ}{y}=0$ の解は分子場の答である。μ を時間 t の関数とすれば外部磁場のある場合の問題が扱える。これらの方程式の解の有様はすこぶる興味深い。特に $T<T_c$ で初期条件が $y=0+$ である場合，$y\fallingdotseq 0$ の平衡値への緩和は，途中に χ の異常なピークを示す。[4)]

考えている系が温度Tの熱浴に接しているとすれば，その系の状態の間の遷移に detailed balance を仮定してもよいであろう。このとき，$F_e(q)$を自由エネルギーとして

$$e^{-\beta F_e(q)}W(q\to q+p)=e^{-\beta F_e(q+p)}W(q+p\to q)$$

したがって(6)のwは

$$w(x,p)=w(x,-p)e^{-\beta p\frac{\partial f_e}{\partial x}}$$

あるいは$w_0(x,p)$をpの偶関数として

$$w(x,p)=w_0(x,p)\exp\left\{-\frac{\beta}{2}p\frac{\partial f_e}{\partial x}\right\}$$

という関係が期待される。これはこの系が平衡として熱平衡分布をもつことを

保証すると同時に，C_1，C_2 などの間にある関係が内在することを示す。その関係は一般的な揺動散逸定理の現われであり，非線型的なふるまいを示すマクロ変数の緩和とゆらぎ，またそのレスポンスの間のある関係を与えるものとなる。

1）D. K. C. MacDonald, Phil. Mag. 40（1949）561.
45（1954）63.
2）C. T. J. Alkamade, Physica 24（1958）1029.
3）N. G. van Kampen, Physica 26（1960）585, Can. J. Phys. 39（1961）551, J. Math. Phys. 2（1961）592.
"Fluctuation Phenomena in Solids" ed. R. E. Burgers Academic Press 1965.
4）北原　修士論文（1971，東大理）