セッション「無限粒子系の物理と数学」について

東大理物理　　香取眞理（世話人）

1　はじめに

初日午後の後半のセッションについて、以下に Introduction としていくつかのコメントをしたいと思う。

プログラムを見て分るように、本研究会の話題は、狭い意味での物性物理学の分野を越え、生物学、心理学、工学、地球科学にまで及んでいる。このように、研究分野は異なっているが、興味の対象となっている現象あるいはそれに対するモデルにおいて、素過程における非可逆性と、系が非線形な相互作用を持つ多体システムであることが重要であるという点では共通していると考えられる。このような認識のもとに、これらを「非可逆な多体系」と総称して、今回の研究会を開催したのであるが、それでは具体的にはどのようなメカニズムが共通なものとして存在するのであろうか。

本セッションでは、物理学、生物学、及び地球科学の分野で各々最近研究されている数理モデルについての講演がなされた。これらは、それぞれ別々の動機・要請によって考案され、研究されているものであるが、広い意味での無限粒子系のプロセスとして取り扱うことができると思われる。そして各々の研究目的は、以下に述べる様な意味で、この無限粒子系の非可逆な定常分布を明らかにするということであるといえるのではないか。もちろん、結果が得られた後のそれに対する意味づけ、あるいは価値といったものは分野によって様々なものとなるであろう。しかしながら、ともかくまずメカニズムを探るのであれば、むしろそれらを共通に扱うような枠組みを作ってその中で考えていくべきであろう。それには、数学の分野で普通使われている表記方法を用いるのがもっとも簡単であるに違いない。

2　無限粒子系の非可逆な定常分布

ここでは、数学の確率論の分野の無限粒子系の研究において用いられている言葉を使って、我々が興味を持っている非可逆性というものを説明することにする。より詳しい説明は、Liggett [1] を参照して頂きたい。

簡単のために、いわゆる spin system と呼ばれているシステムを考えることにする。すなわち、いま格子 S（例えば、d 次元立方格子 $\mathbf{Z}^d$）上の各 site $x \in S$ の上にスピン変数 $\eta(x)$ がのっていて、$\eta(x)$ は 0 または 1 のいずれかの値をとるとする。すなわち配置空間は、$X = \{0,1\}^S$ で与えられるとする。スピン変数 $\eta(x) = 0$ のときはその site は空孔で

あり、$\eta(x)=1$ のときは粒子があると見なせば、これは各 site 上に高々 1 個の粒子が存在できる粒子系を表現するモデルと考えられよう。

以下、各々の時刻には高々 1 spin flip ($\eta(x)=0\to 1$ or $\eta(x)=1\to 0$) しか起こらないような連続時間 t の Markov process を考える。いま flip rate $c(x,\eta)$ を持つ生成作用素 Ω が次式のように与えられるとしよう。

$$\Omega f(\eta)=\sum_{x\in S} c(x,\eta)[f(\eta^x)-f(\eta)], \tag{2.1}$$

但し

$$\eta^x(y)=\begin{cases}\eta(y) & \text{if } y\neq x,\\ 1-\eta(x) & \text{if } y=x.\end{cases} \tag{2.2}$$

ここで $C(X)$ を X 上の連続関数全体として $f\in C(X)$ とした。このとき、flip rate $c(x,\eta)$ が適当な条件を満たしていれば、一般に半群 $S(t)$ が、

$$S(t)f=\lim_{n\to\infty}(I-\frac{t}{n}\Omega)^{-n}f, \quad \text{for} \quad f\in C(X) \quad \text{and} \quad t\geq 0, \tag{2.3}$$

によって作られる。これを持って、Ω によって生成された X値 Markov process を定義することにする。

この Markov process は粒子の配置 η の時間発展を表すものであるが、初期状態がある粒子分布を持っているときには、分布（すなわち X 上の probability measure ）の時間発展を指定することになる。このとき成り立つべき関係は次のように与えられる。すなわち、初期状態 μ の process を考え、その期待値を $E^\mu[\cdot]$ と書き、また時刻 t での配置をη_t と書くことにすると、任意の $f\in C(X)$ に対して、

$$E^\mu f(\eta_t)=\int S(t)fd\mu=\int fd[\mu S(t)]. \tag{2.4}$$

すなわち、初期分布 μ は時刻 t で$\mu S(t)$ と時間変化する。

次に、分布 (measure) μ についていくつかのコメントをする。まず、process が与えられたとき、その定常分布 (invariant measure) は次で与えられる、

$$\mu S(t)=\mu, \qquad {}^\forall t\in[0,\infty). \tag{2.5}$$

ところがこれは、flip rate を用いると次式と同値であることが示せる、

$$\sum_{x\in S}\int c(x,\eta)[f(\eta^x)-f(\eta)]d\mu=0, \qquad {}^\forall f\in D. \tag{2.6}$$

但し D は、Ωの core とする。この定常分布 (inv.meas.) の内で特殊なものとして、可逆定常分布 (reversible inv.meas.) がある。これは次の関係を満たすものとして定義される、

$$\int fS(t)gd\mu=\int gS(t)fd\mu, \qquad {}^\forall f,g\in C(X). \tag{2.7}$$

ここで注意すべきことは、可逆であることはいまの場合には一般に次の関係が成立することと同値であることである、

$$\int c(x,\eta)[f(\eta^x)-f(\eta)]d\mu=0, \qquad {}^\forall x\in S, \quad {}^\forall f\in C(X). \tag{2.8}$$

これを (2.6) と見比べると次のことがいえる、「spin system においては、可逆定常分布とは、詳細つりあいを満たす分布のことである。」そして、この可逆定常分布について、次の一般的な定理が知られている。

定理 2.1. flip rate $c(x,\eta)$ が真に正であり、各 x に対して $c(x,\eta)$ が有限個の $\{\eta(x)\}$ のみに依存しているとする。このとき、spin system がある分布 ν に対して可逆ならば、ν はある potential $\{J_R\}$ を持つ Gibbs 分布である。

ここで言う potential $\{J_R\}$ を持つ Gibbs 分布とは次の形のものであり、平衡統計力学でおなじみのものである。

$$\nu\{\eta\} = \exp\{\sum_R J_R\chi_R(\eta)\}/\sum_\xi \exp\{\sum_R J_R\chi_R(\xi)\}, \tag{2.9}$$

但し、$\chi_R(\eta) = \prod_{x\in R}[2\eta(x)-1]$。定理 2.1 の仮定は多くの場合に成立している。そのため、統計力学においてはこの Gibbs の平衡分布がもっとも良く研究されてきたのであろう。さらに定理 2.1 の仮定のもとでは、この process は potential $\{J_R\}$ を持つ stochastic Ising model として表せるということも言える。spin system と言えば多くの場合に、もっぱら Ising model の類が研究されているのはこのためである。

それでは、可逆ではない定常分布というものは存在するのであろうか。先に述べたように、可逆ではないことから詳細つりあいは満たさない。しかしながら global なつりあい (2.6) は満たしているような定常分布は存在するのであろうか。答は、イエスである。例えば、次の §2 で説明する contact process は、$c(x,\eta)$ の中に含まれる parameter λ がある臨界値を越えると、非自明な非可逆定常分布 (non-reversible inv.meas.) を持つことが、厳密に証明されている。但しこの定常分布は、$S \nearrow \mathbf{Z}^d$ といういわゆる熱力学的極限でのみ存在するのである。

定理 2.1 は可逆な定常分布は、Gibbs 分布となってしまうことを言っている。これに対して、非可逆な定常分布は（簡単な potential を持った）Gibbs 分布では表せない。一般に Gibbs 分布で記述される系を平衡系と呼ぶならば、この非可逆定常分布を持つ系は非平衡系と呼んで良かろう。contact process に代表される系においては、無限系において parameter が臨界値を越えたときに初めてこの状態が出現するのであるから、これをいわゆる非平衡相転移の結果生じる定常分布と見ることもできる。

3 現象とモデル（contact process を例として）

contact process (以下 CP) は、flip rate が次式で与えられるような、X 値 Markov process である、

$$c(x,\eta) = \eta(x) + (1-\eta(x)) \times \lambda \sum_{y:|y-x|=1} \eta(y). \tag{3.1}$$

すなわち、spin flip $\eta(x) = 1 \to 0$ は constant rate 1 で起こり、spin flip $\eta(x) = 0 \to 1$ はその隣接する site $\{y : |y-x| = 1\}$ 上の粒子数、$\sum_{y:|y-x|=1}\eta(y)$、に比例した（比例定数$= \lambda \geq 0$）rate で起こるという process である。確率論の分野では、1974 年に Harris

によって導入され研究が始められた [2]。その後この process は確率論の分野の研究者によって詳しく研究されており、parameter λ がある臨界値 λ_c より真に大きいときに非可逆定常分布を持つことが、この分布の上限と下限とをそれぞれ抑えることによって、厳密な意味で証明されている [1,3]。しかしながらその分布の正確な形は未だに定められてはいない。また臨界値λ_cの値等についても、1 次元系ですら厳密解は得られていないのである。存在は証明されているにもかかわらず、その形が未だ書き下されていないのは、Gibbs 分布に対する定理 2.1 に代わるべき定理が知られていないと言うことである。

このように述べると、あたかもこの CP の問題は数学における特殊な問題であるかのように思われるかも知れないが、面白いことに、この問題は実際には実に様々な分野で注目され研究されてきているのである。例えば、次のような例が挙げられる。

1) 伝染病の伝播のモデル: $\eta(x) = 1$ を感染者、$\eta(x) = 0$ を健康な者と見なすと、CP は接触感染による伝染病の感染を記述する最も簡単なモデルと考えられる。このような epidemic model においては、感染 $(\eta(x) = 0 \to 1)$ と 治癒 $(\eta(x) = 1 \to 0)$ とは一般には詳細つりあいを満たさない [4]。

2) 化学反応系における非平衡相転移:自触媒反応系あるいは、触媒表面での化学反応系に見られる非平衡相転移現象を記述するために提案された Schlögl の first model[5] を格子上に定義したものは、ある場合においては CP と等価なモデルとなる [6]。

3) directed percolation model:時間の方も離散化して考えると、一般に d 次元 CP は $d+1$ 次元の directed percolation ploblem [7] と密接な関係にあることが分る。

4) Reggeon field theory: 高エネルギー粒子の散乱行列に対する現象論として高エネルギー物理学の分野で考案された Reggeon field theory を格子上に定義しようとする研究があったが [8]、これによって得られたモデルは CP に等しい。

CP の非自明な定常分布は、伝染病伝播のモデルでは感染が進行している状態であり、化学反応系の非平衡相転移のモデルでは反応が持続する相を表すことになる。 Reggeon field theory の研究においては、この分布を持つ状態は "active state" と呼ばれている。このように研究分野によってその呼び名が異なり、意味するところが違うのであるが、結局の所共通の問題と見なすことができるのである。

ここでは、簡単な CP について見てみたが、同じようなことが多くみられるのではないだろうか。(自然) 科学の様々な分野で各々に特有な現象を表すために導入されたモデルが、実は共通のものであり、その結果共通の問題が研究されていると言うことはむしろ頻繁なことかもしれない。

本セッションは、自然科学の各分野で生き生きとした motivation を持って現象をモデル化し、解析している研究者たちの間での議論、さらにこのような人々と無限粒子系の重要な問題を研究している研究者との議論の場を作るきっかけとなることを望んで計画された。

4 対象とする現象の多様化とモデルの複雑化

本セッションで紹介されたモデルは、広い意味では無限粒子系と呼べるものであるが、§2 で述べたような簡単なものではない。このモデルの複雑化は、対象とする現象の多様化に由来するものであり本質的なものである。以下簡単にそれぞれの複雑化の方向を説明する。

1) 多値 (multi-color) 化:各 site 上の変数 $\eta(x)$ が、0,1 の 2 値だけではなく 3 値 $\{0,1,2\}$ あるいは $\mathbf{Z}_+ = \{0,1,2,3,...\}$ といったような多値をとり得るように拡張することは、例えば、伝染病のモデルにおいて免疫の効果を取り入れるためには不可避であろう。この方向については、佐藤一憲氏 と大月俊也氏が解説して下さった。

2) しきい値ダイナミックスなど transition rate の非線形化: 1) の拡張をすると、粒子の配置が site 上にあるかないかと言った単純なものではなくなるため transition rate の粒子配置に対する依存性をかなり拡張することができる。例えば、周囲の粒子の個数があるしきい値以下ならば transition はまったく起こらないが、しきい値以上だと状態変化が起こるといったいわゆるしきい値ダイナミックスを持つ系をも含めて考えることができよう。このような系は、地震の規模の分布を記述するモデル（あるいはニューラル・ネットワーク）において重要となる。これについては、松崎光弘氏と大月俊也氏がお話下さった。

3) 注入のある系:凝縮系 (aggregation) の研究においては、系に対する外からの注入の効果が重要な課題となる。$\eta(x)$ のとり得る値の上限を無くして、粒子の注入を取り入れた無限粒子系において実現する安定分布について、高安秀樹氏が講演を行った。

5 percolation の手法を用いた新しい解析方法

最近、数学の確率論の分野では、各種の percolation problem に対して考案された手法を用いて無限粒子系を研究することがなされている。種村秀紀氏にはこの方向について解説していただいた。

6 将来の方向?

無限粒子系の研究は現在新しい局面を迎えていると言える。§4 で述べたように今日、物理やそれ以外の様々な分野において大変興味深いモデルが数多く提出されている。これらはそれぞれ従来研究されてきた process を拡張したものであり、その多くの場合にはいままで有効であった解析手法がそのままでは適用できなくなっている。

最近、このように様々なモデルが提案されてきているのは、一つには計算機の著しい発展によって、大規模なシミュレーションが容易になったためであろう。しかしながら、各分野でそれぞれシミュレーションを行って、各々の分野において興味が持たれているような振る舞いが見られたことで満足しているのでは不十分ではないであろうか。もう一歩踏み込んで無限粒子系としてもっと一般的に理解することができないかどうかを、分

野間の交流を盛んにして考えていくことが必要であろう。解析方法も、これだけ多様なモデルが提出されてきている以上各々の process 毎に考えていくのではなく、一般的に取り扱って行くようなものが望まれる。

はたして、拡張された無限粒子系の種々の process の非可逆な問題を取り扱う総論を構成することは可能なのであろうか。そして、このような理論は、脳あるいは生命活動と言った本質的に非可逆な現象を解析するために、役立つものとなるであろうか。

参考文献

[1] T.M.Liggett, *Interacting Particle Systems* (Springer-Verlag, New York,1985).

[2] T.E.Harris, *Ann. Prob.* **2**: 969-988 (1974).

[3] R.Holley and T.M.Liggett, *Ann. Prob.* **6**: 198-206 (1978).

[4] T.Ohtsuki and T.Keyes, *Phys. Rev.* **A33**: 1223-1232 (1986).

[5] F.Schlögl, *Z.Physik* **253**: 147-161 (1972).

[6] P.Grassberger and A.de la Torre, *Ann. Phys.* **122**: 373-396 (1979).

[7] R.Durrett, *Ann. Prob.* **12**: 999-1040 (1984).

[8] R.C.Brower, M.A.Furman, and M.Moshe, *Phys.Lett.* **76B**: 213-219 (1978).

[9] M.Katori and N.Konno, *J.Stat.Phys.* **63**: 115-130 (1991).