

不規則媒質中のランダムウォーク: 遅い拡散とエルゴード緩和特性

鳴門教育大学大学院学校教育研究科 宮口 智成

Tomoshige MIYAGUCHI

Department of Mathematics Education, Naruto University of Education

概要

カットオフのある片側安定分布を待ち時間分布とする, 連続時間ランダムウォークのエルゴード緩和特性を調べた. 特に, 長時間平均量がある普遍分布 (ミッタグ・レフラー分布) に従うという「拡張されたエルゴード性」が成り立つことを示した. この拡張されたエルゴード的振舞いは, (カットオフがあるにもかかわらず) 非常に長時間維持される. さらに, 拡張されたエルゴード的振舞いから, 通常のエルゴード的振舞へのクロスオーバーが生じることが分かった. また, 対応する巨視的方程式である一般化された非整数フォッカー・プランク方程式も紹介する.

1 Introduction

エルゴード定理は観測量の時間平均が (観測時間を長くしていくとき) アンサンブル平均に収束することを保証している. 一方, 「拡張されたエルゴード定理」は, 時間平均量の確率密度関数 (PDF) がミッタグ・レフラー分布 (ML 分布) に収束することを主張する. この性質は, 力学系の研究では無限測度エルゴード性と呼ばれているものであり [1], さらに近年, 確率モデルのいくつかの観測量についても見出されている [10, 11, 12]. 例えば, 連続時間ランダムウォーク [Continuous time random walk (CTRW)]¹ の時間平均二乗変位 [time-averaged square displacement (TASD); Eq. (10)] は, 観測時間を無限大にした極限においても確率変数であり, ML 分布に従う. 言い替えれば, 時間平均量がアンサンブル平均値に緩和しない². こうした, 時間平均量のアンサンブル平均への緩和特性 (エルゴード緩和特性) は, 一分子計測実験や分子動力学計算などで得られた時系列データを解析する上で重要である [2, 17].

ここでは, CTRW 模型のエルゴード緩和特性について, 以下の 3 つの結果を紹介する³. まず 1 つ目は, 「どのような観測量のクラスに対して, 上記のような拡張されたエルゴード性が成立するか」について議論する. これまで, CTRW のいくつかの観測量が ML 分布に従うということが報告されているが, ML 分布に従う条件は不明であった. また, 2 点目として, 「有限サイズ効果 (特に, 待ち時間分布にカットオフ)」について考えたい. CTRW では通常, 待ち時間分布としてべき分布が仮定される. し

¹例えばランダムなエネルギー地形上のランダムウォークを, 粗視化すると CTRW 模型が得られる [8]. したがって, CTRW は不規則な媒質中の拡散モデルとしてもよく用いられる.

²これは (平衡状態へ緩和しないことを意味するため) 物理的には異常な現象である. CTRW の場合は後述のように待ち時間分布にカットオフを導入することで, 緩和するようになるが, 緩和するまでに非常に長い観測時間を要する (遅いエルゴード緩和).

³詳細は, [11, 12] を参照.

たがって、長時間トラップが系の長時間の振舞いを決定することになるが、このような長時間トラップは一般に、有限サイズ効果によって制限される。例えば、トラップが複雑なエネルギー地形に起因している場合、最も安定な状態が最長のトラップ時間を与える（したがって、待ち時間分布にカットオフが生じる）。あるいは、トラップが内部自由度への拡散などのエントロピー的な原因による場合にも、相空間の有限性が待ち時間分布のカットオフを生み出す。そこで、ここでは待ち時間分布として、指数関数的カットオフのある安定分布 [exponentially tempered stable distribution (ETSD)] [7, 14] を用いる。ETSD は無限分解可能性を有しているため、理論解析が比較的容易である。最後に 3 点目として、ETSD を待ち時間分布とする CTRW についての巨視的方程式（一般化された非整数フォッカー・プランク方程式）の導出過程を概観する。

2 Exponentially tempered stable distribution

d -次元格子上的 CTRW を考える。簡単のため、格子定数は 1 とし、遷移は最隣接サイトにのみ等確率で生じることを仮定する。また、 $\mathbf{r}(t') \in \mathbb{Z}^d$ を時刻 t' における粒子の位置とする。さらに、トラップ時間の系列 τ_k ($k = 1, 2, \dots$) は互いに独立な確率変数とし、それぞれが ETSD $P_{\text{TL}}(\tau, \lambda)$ に従っていることを仮定する。ETSD $P_{\text{TL}}(\tau, \lambda)$ は無限分解可能な分布の標準形を用いて次のように定義される [4]:

$$e^{\psi(\zeta, \lambda)} = \int_{-\infty}^{\infty} P_{\text{TL}}(\tau, \lambda) e^{i\zeta\tau} d\tau, \quad (1)$$

$$\psi(\zeta, \lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} (e^{i\zeta\tau} - 1) f(\tau, \lambda) d\tau, \quad (2)$$

ここで、関数 $f(\tau, \lambda)$ は以下のように定義される [7, 14]:

$$f(\tau, \lambda) = \begin{cases} 0, & (\tau < 0) \\ -c \frac{\tau^{-1-\alpha} e^{-\lambda\tau}}{\Gamma(-\alpha)}, & (\tau > 0), \end{cases} \quad (3)$$

ここで、 $\Gamma(x)$ はガンマ関数、 $c > 0$ はスケール因子、さらに $\alpha \in (0, 1)$ は定数である。また、 $\lambda \geq 0$ は指数関数的カットオフを特徴付けるパラメータである [Eq. (6)]. $\lambda = 0$ のとき、 $P_{\text{TL}}(\tau, \lambda)$ は片側安定分布である。特に、指数 α のべき的なテイルを持つ: $P_{\text{TL}}(\tau, 0) \sim 1/\tau^{1+\alpha}$ ($\tau \rightarrow \infty$) [4].

一方、関数 $\psi(\zeta, \lambda)$ は次のように表わすことができる:

$$\psi(\zeta, \lambda) = -c [(\lambda - i\zeta)^\alpha - \lambda^\alpha]. \quad (4)$$

したがって、 $n\psi(\zeta, \lambda) = \psi(n^{1/\alpha}\zeta, n^{1/\alpha}\lambda)$ という関係を得る ($n \geq 0$ は整数)。ゆえに、 τ_k ($k = 1, 2, \dots$) が、それぞれが $P_{\text{TL}}(\tau_k, \lambda)$ に従う、互いに独立な確率変数であれば、 n

回畳み込み PDF $P_{\text{TL}}^n(\tau, \lambda)$ (すなわち, 有限和 $T_n = \sum_{k=1}^n \tau_k$ に対する PDF) は

$$P_{\text{TL}}^n(\tau, \lambda) = n^{-1/\alpha} P_{\text{TL}}(n^{-1/\alpha} \tau, n^{1/\alpha} \lambda) \quad (5)$$

で与えられる. これは, 無限分解可能性の帰結のひとつであり, この性質により過渡的な性質の厳密な解析が可能になる. さらに, 式 (4) と, 式 (1) の逆変換より, $P_{\text{TL}}(\tau, \lambda)$ の表現を具体的に得ることができる:

$$P_{\text{TL}}(\tau, \lambda) = -\frac{e^{c\lambda^\alpha - \lambda\tau}}{\pi\tau} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Gamma(k\alpha + 1)}{k!} (-c\tau^{-\alpha})^k \sin(\pi k\alpha). \quad (6)$$

このことから, ETSD $P_{\text{TL}}(\tau, \lambda)$ は片側安定分布 $P_{\text{TL}}(\tau, 0)$ に, 指数減衰する因子 $e^{-\lambda\tau}$ を乗じたものであることが分かる: $P_{\text{TL}}(\tau, \lambda) \propto e^{-\lambda\tau} P_{\text{TL}}(\tau, 0)$.

3 CTRW with alpha stable trapping times

次に, ある観測量 $h(t')$: $\bar{h}_t \equiv \int_0^t dt' h(t')/t$ の時間平均を考える (ここで, t は全観測時間であるとする). さらに $h(t')$ は次のように表すことができることを仮定する:

$$h(t') = \sum_{k=1}^{\infty} H_k \delta(t' - T_k), \quad (7)$$

ここで $T_k > 0$ ($k = 1, 2, \dots$) は k 回目の遷移が生じた時刻を表わす確率変数である. さらに, H_k ($k = 1, 2, \dots$) は以下の 2 式を満たす確率変数であるとする: $\langle H_k \rangle = \langle H \rangle$ ($\langle H \rangle$ は k によらないある定数), および作業時間⁴ k に関するエルゴード性

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n H_k \simeq \langle H \rangle, \quad \text{as } n \rightarrow \infty. \quad (8)$$

式 (8) を満たすことは, 相関関数 $\langle H_k H_{k+n} \rangle - \langle H_k \rangle \langle H_{k+n} \rangle$ が $n^{-\gamma}$ ($\gamma > 0$ はある定数) より速く減衰することと同じである [3]. 式 (7) と (8) から, 大きな t に対して

$$\bar{h}_t = \frac{1}{t} \sum_{k=1}^{N_t} H_k = \frac{N_t}{t} \frac{1}{N_t} \sum_{k=1}^{N_t} H_k \simeq \frac{N_t}{t} \langle H \rangle, \quad (9)$$

を得る. ここで N_t は時刻 t までの遷移の回数である. この式から, 時間平均 $\bar{h}_t$ が N_t と統計的に同じ振舞いをする事が分かる. また, 実際に多くの観測量が, 式 (7) と

⁴実時間 t に対して, 遷移の回数を離散的な時間と捉える. この離散時間のことを作業時間 (operational time) と呼ぶ. 式 (9) から分かるように, 作業時間についてのエルゴード性が, 実時間における拡張されたエルゴード性の成立を保証している.

(8) のように表わすことができる. 例えば, T ASD ⁵

$$\overline{(\delta \mathbf{r})^2}(\Delta, t) \equiv \frac{1}{t - \Delta} \int_0^{t - \Delta} |\mathbf{r}(t' + \Delta) - \mathbf{r}(t')|^2 dt', \quad (10)$$

の場合には, H_k を $H_k \equiv \Delta + 2 \sum_{l=1}^{k-1} (d\mathbf{r}_k \cdot d\mathbf{r}_l) \theta(\Delta - (T_k - T_l))$ のように定義すれば良い. ここで, d -次元ベクトル $d\mathbf{r}_k$ は時刻 T_k の遷移における変位を表わし, $\theta(t)$ は $\theta(t) = t$ ($t \geq 0$ のとき), $\theta(t) = 0$ (それ以外) と定義する. ここで, $\langle H_k \rangle = \Delta$ と $\langle H_k H_{k+n} \rangle - \langle H_k \rangle \langle H_{k+n} \rangle = 0$ ($n \geq 1$) を示すのは容易い. 式 (9) を用いると,

$$\overline{(\delta \mathbf{r})^2}(\Delta, t) \simeq \frac{N_t}{t} \Delta, \quad (11)$$

を得る. 式 (11) から, N_t と T ASD に関する拡散定数の関係として

$$D_t \simeq \frac{N_t}{t}. \quad (12)$$

を得る. 図 1 に 17 本の軌道から計算した T ASD を示した. この図から, T ASD が線形に増加すること, 拡散定数 D_t が軌道ごとに異なり, 確率変数のように振る舞うことが分かる.

4 Statistics of diffusion coefficient

4.1 Real space analysis

次に, 時間平均量 $\bar{h}_t$ が従う PDF を導出する. $\bar{h}_t$ と N_t は同じ PDF に従うので [式 (9)] $\bar{h}_t$ の代わりに, N_t を調べる. まず, 以下の式が成り立つ:

$$G(n; t) \equiv \text{Prob}(N_t < n) = \text{Prob}(T_n > t) = \text{Prob}\left(\sum_{k=1}^n \tau_k > t\right), \quad (13)$$

ここで, $\text{Prob}(\cdot)$ は確率, τ_k ($k = 1, 2, \dots$) は $(k-1)$ 回目と k 回目の遷移の間のトラップ時間を表わす. さらに, 式 (13),

$$G(n; t) = \int_{n^{-1/\alpha} t}^{\infty} d\tau P_{\text{TL}}(\tau, n^{1/\alpha} \lambda), \quad (14)$$

⁵—分子計測実験などでは, 多くのアンサンブルを用意することが難しい反面, 長時間の時系列を得るのは比較的容易である. そのため, 平均 2 乗変位として標準的なアンサンブル平均の代わりに, 時間平均がよく用いられる. 一方, 理論解析では一般にアンサンブル平均が用いられる. これら 2 つの平均値を比較するには, エルゴード性を仮定する必要があるし, エルゴード性が成立していたとしても, 観測時間 $t \rightarrow \infty$ の極限でしか両者は一致しない. この, $t \rightarrow \infty$ という要請は実験では難しいことがあるため, 時間平均量の直接解析が必要となる.

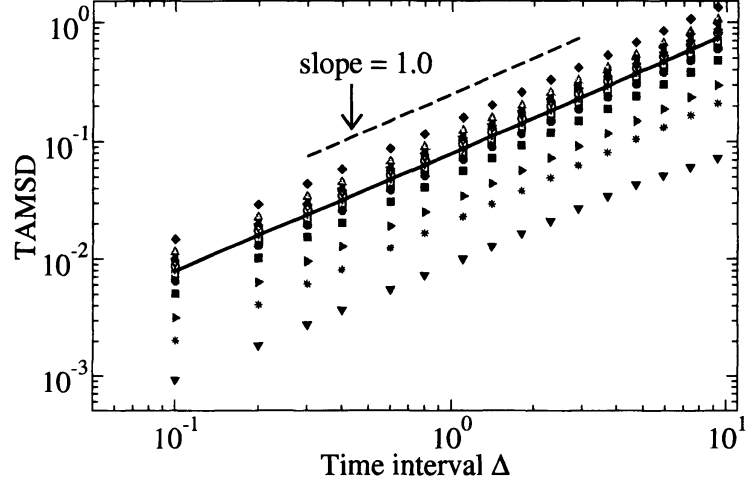


図 1: T ASD $\overline{(\delta x)^2}(\Delta, t)$ vs time interval Δ in log-log form (1 次元系 $d = 1$). 全観測時間 t は $t = 10^5$, その他のパラメータは, $\lambda = 10^{-5}$, $\alpha = 0.75$, および $c = 1$ とおいた. T ASD は 17 の異なる軌道から計算したものを示した (異なるシンボルは異なる軌道に対応する). 実線はこれら 17 本の軌道に関する (アンサンブル) 平均である.

を得る. ここで式 (5) と τ_k ($k = 1, 2, \dots$) が互いに独立であることを用いた. さらに, (t を固定したまま) 変数を n から z に次のように変換する: $n = t^\alpha z$. すると, 式 (6), (13) および (14) を用いて, 次式を得る.

$$\text{Prob} \left(\frac{N_t}{t^\alpha} < z \right) = -\frac{e^{c(t\lambda)^\alpha z}}{\alpha\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Gamma(k\alpha + 1)}{k!k} \times (-cz)^k \sin(\pi k\alpha) a_k(t), \quad (15)$$

ここで, $a_k(t)$ ($k = 1, 2, \dots$) は $a_k(t) \equiv \int_0^1 d\tau e^{-t\lambda\tau^{-1/(\alpha k)}}$ と定義した. 式 (15) を z について微分すると, $z = N_t/t^\alpha$ の PDF を得る:

$$f_\lambda(z; t) = -\frac{e^{c(t\lambda)^\alpha z}}{\alpha\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Gamma(k\alpha + 1)}{k!} (-c)^k \left[\frac{c(t\lambda)^\alpha z}{k} + 1 \right] z^{k-1} \sin(\pi k\alpha) a_k(t). \quad (16)$$

式 (9) より, 式 (16) は時間平均量 $\bar{h}_t t^{1-\alpha} / \langle H \rangle$ の PDF であり, 拡散定数 $D_t t^{1-\alpha}$ [Eq. (12)] はその特別な場合である. 特に $\lambda = 0$ のとき, PDF $f_0(z)$ は ML 分布 [1] であり, 時間依存しない. すなわち, 時間平均量は極限 $t \rightarrow \infty$ においても, 確率変数のように振る舞う. この性質のことを拡張されたエルゴード性と呼ぶ. 一方, $\lambda > 0$ の場合には, PDF は δ 関数に収束する. つまり, 時間平均量は, (通常のエルゴード性と同様に) ある確定値に収束する. 異なる 3 つの t の値に対して, D_t の PDF を図 2 に示した. t の増加とともに, PDF が sharp な形状に変化していくことが分かる. 同じ図中に, 解析的な結果である式 (16) も示した.

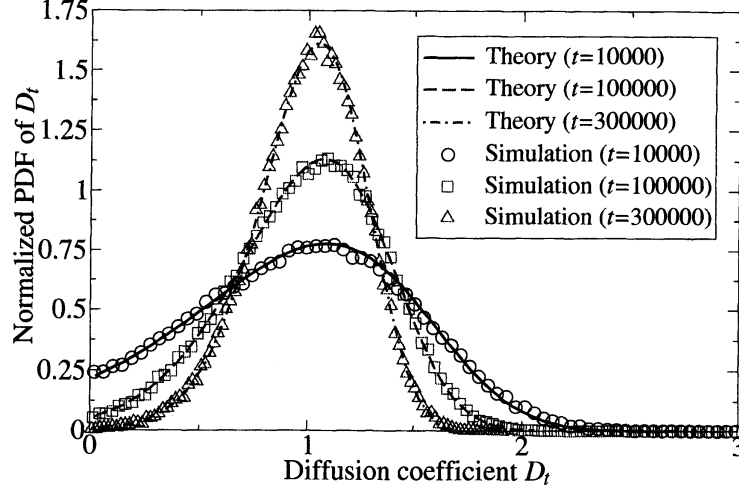


図 2: 拡散定数 D_t の PDF ($d = 1$). PDF は期待値が 1 になるように規格化してある. D_t は TASD $\overline{(\delta x)^2}(\Delta, t)$ の区間 $0 < \Delta < 10$ における最小二乗法によって計算した. また, 3 つの観測時間についての結果を示した: $t = 10^4$ (circles), 10^5 (squares), and 3×10^5 (triangles). その他のパラメータは, $\lambda = 10^{-5}$, $\alpha = 0.75$, および $c = 1$ とした. 実線・破線・点鎖線は理論の結果 [式 (16)] を表わしている. この図を得る上で, フィッティングパラメータを用いていないことに注意.

4.2 Laplace space analysis

次に, 通常のエルゴード性からのズレを測るために, 時間平均量の相対標準偏差 [relative standard deviation (RSD)] $R(t) = \sqrt{\langle (\bar{h}_t)^2 \rangle_c / \langle \bar{h}_t \rangle}$ を調べる. ここで, $\langle \cdot \rangle$ はアンサンブル平均を表わし, $\langle \cdot \rangle_c$ はそれに対応するキュムラントを表わしている. もし, $R(t) \approx 0$ であれば, 系は (時間平均量が一定値を取るという意味で) エルゴード的と見なすことができる. 一方, $R(t) > 0$ ならば, 系は非エルゴード的である. したがって, $R(t)$ の減衰の仕方で, エルゴード的な緩和特性を調べることができる.

$R(t)$ の解析的な表現を得るために, まず式 (14) を t についてラプラス変換する:

$$\tilde{G}(n; s) = \frac{1 - e^{-nc[(\lambda+s)^\alpha - \lambda^\alpha]}}{s}, \quad (17)$$

ここで, 関数 $\tilde{G}(n; s)$ は $\tilde{G}(n; s) \equiv \int_0^\infty dt e^{-ts} G(n; t)$ と定義し, さらに式 (4) を用いた. 次に, 関数 $g(n; s)$ を $g(n; s) := \tilde{G}(n+1; s) - \tilde{G}(n; s)$ と定義する. 最後に, n に関して, (離散) ラプラス変換, $\sum_{n=0}^\infty e^{-n\nu} g(n; s) \equiv \tilde{g}(\nu; s)$, を取ると

$$\tilde{g}(\nu; s) \simeq \frac{1}{s} \sum_{k=0}^\infty \left(-\frac{\nu}{c}\right)^k [(\lambda+s)^\alpha - \lambda^\alpha]^{-k}, \quad (18)$$

を得る. ここで, $s, \lambda \ll 1$ とする近似を用いた.

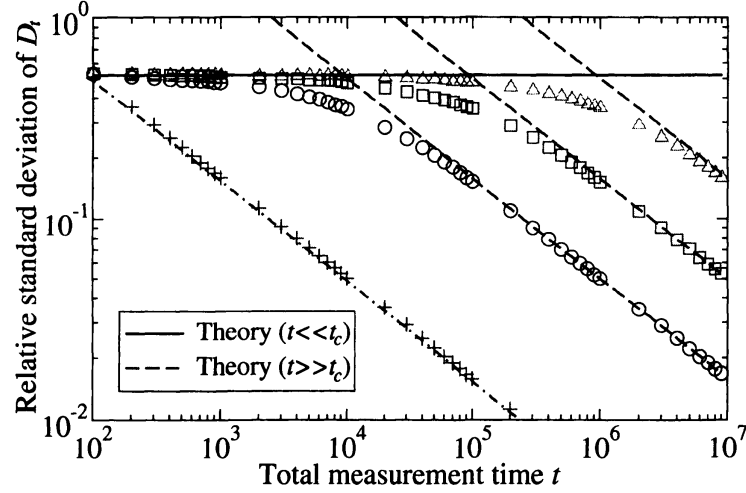


図 3: $\text{RSD } \sqrt{\langle D_t^2 \rangle_c} / \langle D_t \rangle$ vs 全観測時間 t ($d = 1$). D_t は TASD $\overline{(\delta x)^2}(\Delta, t)$ に対し $0 < \Delta < 1$ の範囲で最小二乗法を用いることで求めた. λ に関して, 3 つの異なる値を用いた: $\lambda = 10^{-4}$ (circles), 10^{-5} (squares), and 10^{-6} (triangles). また, α と c は $\alpha = 0.75$ および $c = 1$ とおいた. 実線と破線は, 理論の予測 [式 (20)] を表わしている; 実線は, 短いタイムスケール $t \ll t_c$ についての結果であり, 破線は長いタイムスケール $t \gg t_c$ に対する結果である. これらの 2 線の交点が, クロスオーバー時間 t_c [式 (21)] に対応する. プラス (+) の記号は待ち時間分布が指数分布 $P(\tau) = \exp(\tau/\langle\tau\rangle)/\langle\tau\rangle$ である場合の結果である. この指数分布は $\lambda = 10^{-6}$ の ETSD (triangles) と同じ平均待ち時間 ($\langle\tau\rangle = c\lambda^{\alpha-1}\alpha$) を持つようにしてある. 点鎖線は, 指数分布の場合の理論の予測である: $R(t) = (c\alpha\lambda^{\alpha-1}/t)^{1/2}$.

式 (18) より, N_t の任意の次数のモーメントを導くことができる. 例えば, 1 次モーメント $\langle N_t \rangle$ は以下ようになる:

$$\langle N_t \rangle \simeq \begin{cases} \frac{t^\alpha}{c\Gamma(\alpha+1)}, & t \ll 1/\lambda \\ \frac{t}{c\lambda^{\alpha-1}\alpha} + \frac{1-\alpha}{2c\lambda^\alpha\alpha}, & t \gg 1/\lambda. \end{cases} \quad (19)$$

CTRW に対するアンサンブル平均二乗変位 [The ensemble-averaged square displacement (EASD)] は $\langle N_t \rangle$ に比例することが知られている [3]: $\langle (\delta \mathbf{r})^2 \rangle(t) \sim \langle N_t \rangle$. したがって, 本研究におけるモデルの EASD は一時的な劣拡散を生じる: すなわち, 短いタイムスケールでは劣拡散, 長いタイムスケールでは通常拡散が生じる [16]. 同様に, 2 次モーメントも計算でき, その結果 N_t に対する RSD が以下のように計算できる:

$$\frac{\sqrt{\langle N_t^2 \rangle_c}}{\langle N_t \rangle} \simeq \begin{cases} \sqrt{\frac{2\Gamma^2(\alpha+1)}{\Gamma(2\alpha+1)} - 1}, & t \ll 1/\lambda \\ (1-\alpha)^{1/2}\lambda^{-1/2}t^{-1/2}, & t \gg 1/\lambda. \end{cases} \quad (20)$$

$\bar{h}_t$ や D_t に対する RSD も同様の振舞いをすることに注意 [これらの違いはスケール因子だけであるため: 式 (9) および (12) を参照]. また, 拡張されたエルゴード性と通常のエルゴード性の間のクロスオーバー時間 t_c は, 次式で与えられる:

$$t_c = \frac{(1 - \alpha)}{2\Gamma^2(\alpha + 1)/\Gamma(2\alpha + 1) - 1} \lambda^{-1}. \quad (21)$$

図3から分かるように, RSD はクロスオーバー時間 t_c までは, ほぼ一定値を取る. そして, クロスオーバー時間を越えると急激に減衰することが分かる⁶. 図3には, 待ち時間分布が指数分布で与えられる場合の RSD も表示した (pluses "+"). この指数分布は, $\lambda = 10^{-6}$ の ETSD (triangles) と同じ平均待ち時間を持つ. つまり, 指数分布の場合と比較して, ETSD の場合のエルゴード緩和は非常に遅くなるのである.

5 Generalized fractional Fokker-Planck equation

ETSD に対する Generalized fractional Fokker-Planck equation (GFFPE) は従属過程を用いて導出されている [5]. ここでは, CTRW からの流体極限を用いた導出を概観する⁷(ここでの導出は FFPE の導出とほとんど同じである [13, 3, 9]).

まず, $P(x, t)$ を粒子の時刻 t における PDF とし, $P_0(x)$ を初期密度とする: $P_0(x) \equiv P(x, 0)$. (この節では, t を普通の時間変数として扱う). さらに, 個々の粒子は CTRW のダイナミクスに従い, 実軸 x もしくは 1 次元格子 $x = x_0, x_{\pm 1}, x_{\pm 2}, \dots$ を拡散するとする. 一方, $\psi(x, t)dxdt$ は, ちょうどある時間 t の間トラップされた後, 距離 x だけ遷移する確率を表わす. $\psi(x, t)$ を用いると, 粒子が時間 t 以上トラップされる確率 $\phi(t)$ 次のように表わせる:

$$\phi(t) = 1 - \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_0^t \psi(x', t') dt' = 1 - \int_0^t w(t') dt'. \quad (22)$$

さらに, $Q(x, t)dt dx$ を $[t, t + dt)$ の間に, 区間 $[x, x + dx)$ に到達する確率を表すとす. これらより, 次の式を得る:

$$P(x, t) = \int_0^t dt' \phi(t - t') Q(x, t') + \phi(t) P_0(x), \quad (23)$$

$$Q(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_0^t dt' \psi(x', t') Q(x - x', t - t') + \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi(x', t) P_0(x - x'). \quad (24)$$

⁶すなわち, 観測時間 t が短い場合 ($t < t_c$), 時間平均量は時系列毎の揺らぎが大きい. 一方, $t > t_c$ であれば, 時間平均量はどの時系列に対してもほぼ一定値を取る. いわば, 再現性が破れている領域から, 再現性のある領域へクロスオーバーしていると考えられることができる.

⁷この節では, 1 次元の CTRW のみ考える.

上式について、空間変数と時間変数それぞれについて、フーリエ変換とラプラス変換を施すと、次式が得られる:

$$\tilde{Q}(k, u) = \frac{\tilde{\psi}(k, u) \tilde{P}_0(k)}{1 - \tilde{\psi}(k, u)}, \quad (25)$$

$$\tilde{P}(k, u) = \frac{1 - \tilde{w}(u)}{u} \frac{\tilde{P}_0(k)}{1 - \tilde{\psi}(k, u)}, \quad (26)$$

ここで、関係式 $\tilde{\phi}(u) = (1 - \tilde{w}(u))/u$ を用いた [式 (22) のラプラス変換].

次に、PDF $\psi(x, t)$ が次のように分解可能であることを仮定する: $\psi(x, t) = l(x)w(t)$. ここで、 $l(x)$ が遷移長の PDF を表わすが、これがさらに流体極限 $k \rightarrow 0$ において

$$\tilde{l}(k) \simeq 1 - \frac{\langle \delta x^2 \rangle}{2} k^2 \quad (27)$$

を満たすと仮定する. ここで、 $\langle \delta x^2 \rangle$ は 1 回の遷移における平均 2 乗変位である: $\langle \delta x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 l(x)$. シミュレーションで用いた、最隣接格子にのみ遷移を許す 1 次元 CTRW の場合 $\langle \delta x^2 \rangle = 1$ となる. さらに、待ち時間分布 $w(t)$ として、ETSD $P_{\text{TL}}(t)$ を用いる:

$$\tilde{w}(u) \simeq 1 - c[(\lambda + u)^\alpha - \lambda^\alpha], \quad (28)$$

ここで、 $\lambda, u \ll 1$ を仮定した. これらの仮定の元に、式 (26) は次のように書き換えられる:

$$u\tilde{P}(k, u) - \tilde{P}_0(k) \simeq -\frac{\langle \delta x^2 \rangle}{2c} \frac{uk^2}{[(\lambda + u)^\alpha - \lambda^\alpha]} \tilde{P}(k, u). \quad (29)$$

空間と時間それぞれに対する、フーリエ・ラプラス逆変換を行うと、

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = K \hat{\Phi}_t \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}, \quad (30)$$

を得る. ここで、 K は $K = \langle \delta x \rangle^2 / 2c$ で与えられる定数、 $\hat{\Phi}_t$ は次式で定義される演算子である:

$$\hat{\Phi}_t f(t) \equiv \frac{d}{dt} \int_0^t M(t - t') f(t') dt', \quad (31)$$

関数 $M(t)$ は、そのラプラス変換 $\tilde{M}(u)$ を通して次のように定義される:

$$\tilde{M}(u) = \int_0^\infty dt e^{-ut} M(t) dt = \frac{1}{(\lambda + u)^\alpha - \lambda^\alpha}. \quad (32)$$

$\lambda \rightarrow 0$ のとき、式 (30) は通常の FFPE [15, 9] に収束する. したがって、式 (30)–(32) は一般化された FFPE と呼ばれる [6]. 線形方程式であるから、境界値問題なども容易に (解析的に) 解くことができる [6, 12].

6 Summary and discussion

ここでは, ETSD を待ち時間分布とする CTRW を調べ, 主に以下の 4 つの結果を得た: (i) 短い観測時間の場合について, 拡張されたエルゴード性を示した. すなわち, 時間平均量が ML 分布に従う確率変数となることが分かった. また, 任意の観測時間 t について, 時間平均量の PDF も導出した [式 (16)]. (ii) 拡張されたエルゴード的振舞いが, 非常に長時間持続することが分かった. すなわち, 通常のエルゴード的振舞い (時間平均がある一定値に収束すること) が現れるまで, 極めて長時間の観測が必要である (遅いエルゴード緩和). (iii) さらに, このふたつのレジーム (拡張エルゴード性と通常のエルゴード性) の間に, クロスオーバーが生じることを示した (図 3). また, (iv) ETSD を待ち時間分布とする CTRW から, GFFPE を導出した.

最後に, ここでの内容は, 全て初期アンサンブルを非平衡状態に取った場合の結果であることを注意しておく (CTRW の研究では多くの場合, この非平衡アンサンブルが用いられる). それに対し, 待ち時間分布を ETSD のような平均が存在する分布に選んだ場合, 初期アンサンブルとして平衡アンサンブルを選ぶことも可能である. 実際, ETSD の場合, 平衡アンサンブルを用いた CTRW のエルゴード緩和特性は (非平衡アンサンブルの場合と) 定性的に異なる [12]. しかし, 平衡アンサンブルの場合が, どのような巨視的方程式 (GFFPE に相当するもの) で記述されるかについては, 今の所よく分かっていない.

参考文献

- [1] J. Aaronson. *An Introduction to Infinite Ergodic Theory*. American Mathematical Society, Providence, 1997.
- [2] T. Akimoto, E. Yamamoto, K. Yasuoka, Y. Hirano, and M. Yasui. Non-gaussian fluctuations resulting from power-law trapping in a lipid bilayer. *Phys. Rev. Lett.*, 107:178103, Oct 2011.
- [3] J. Bouchaud and A. Georges. Anomalous diffusion in disordered media: Statistical mechanisms, models and physical applications. *Phys. Rep.*, 195(4-5):127–293, Nov. 1990.
- [4] W. Feller. *An Introduction to Probability Theory and its Applications*, Vol. II. Wiley, New York, 2nd ed. edition, 1971.
- [5] J. Gajda and M. Magdziarz. Fractional fokker-planck equation with tempered α -stable waiting times: Langevin picture and computer simulation. *Phys. Rev. E*, 82(1):011117, Jul 2010.

- [6] J. Gajda and M. Magdziarz. Kramers' escape problem for fractional klein-kramers equation with tempered α -stable waiting times. *Phys. Rev. E*, 84:021137, Aug 2011.
- [7] I. Koponen. Analytic approach to the problem of convergence of truncated lévy flights towards the gaussian stochastic process. *Phys. Rev. E*, 52(1):1197–1199, Jul 1995.
- [8] J. Machta. Random walks on site disordered lattices. *J. Phys. A*, 18(9):L531, 1985.
- [9] R. Metzler and J. Klafter. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. *Phys. Rep.*, 339(1):1–77, Dec. 2000.
- [10] T. Miyaguchi and T. Akimoto. Intrinsic randomness of transport coefficient in subdiffusion with static disorder. *Phys. Rev. E*, 83(3):031926, Mar 2011.
- [11] T. Miyaguchi and T. Akimoto. Ultraslow convergence to ergodicity in transient subdiffusion. *Phys. Rev. E*, 83(6):062101, Jun 2011.
- [12] T. Miyaguchi and T. Akimoto. Ergodic properties of continuous-time random walks: finite-size effects and ensemble dependences. *arXiv:1210.5618*, 2012.
- [13] E. W. Montroll and G. H. Weiss. Random walks on lattices. II. *J. Math. Phys.*, 6(2):167, 1965.
- [14] H. Nakao. Multi-scaling properties of truncated lévy flights. *Phys. Lett. A*, 266(4-6):282 – 289, 2000.
- [15] T. Neusius, I. M. Sokolov, and J. C. Smith. Subdiffusion in time-averaged, confined random walks. *Phys. Rev. E*, 80(1):011109, Jul 2009.
- [16] M. J. Saxton. A biological interpretation of transient anomalous subdiffusion. i. qualitative model. *Biophys. J.*, 92(4):1178–1191, Feb. 2007.
- [17] T. Uneyama, T. Akimoto, and T. Miyaguchi. Crossover time in relative fluctuations characterizes the longest relaxation time of entangled polymers. *J. Chem. Phys.*, 137(11):114903, 2012.