

フラクタル成長界面に対する Kardar-Parisi-Zhang 方程式について

本田 勝也 (信州大学理学部)

1 はじめに

非平衡非線形現象の典型としての「成長する荒れた界面」を対象とする研究は、スケーリング則と普遍性の概念を基礎にして多彩な現象を統一的に理解することを目的にしている. [1, 2, 3, 4, 5, 6]

「成長する荒れた界面」は基盤からの高さ $h(\mathbf{r}, t)$ のゆらぎ, すなわち標準偏差 $w(L, t) \equiv \langle \{h(\mathbf{r}, t) - \langle h(\mathbf{r}, t) \rangle\}^2 \rangle^{1/2}$ によって評価される. ここで, $h(\mathbf{r}, t)$ は一辺 L の d 次元の基盤上での位置 $\mathbf{r}$, 時刻 t における界面の高さを表わしている. $\mathbf{r} \in [0, L]^d$ である. スケーリング則は Family と Vicsek によって提案されたもので, [7] 次のように表わされる:

$$w(L, t) = t^\beta \Psi(L/t^{1/z}). \quad (1)$$

スケーリング関数 $\Psi(x)$ は $x \ll 1$ に対して $\Psi(x) \sim x^\alpha$, $x \gg 1$ に対して $\Psi(x) \sim \text{一定}$ という性質を有する. 粗さ指数 α は動的指数 z と関係式 $\alpha = \beta z$ で結ばれている.

「成長する荒れた界面」の問題に対する連続モデルとして Kardar, Parisi, Zhang (KPZ) の 3 人組は簡潔な非線形ランジュバン型方程式を提案した: [8]

$$\frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) + \frac{\lambda}{2} (\nabla h(\mathbf{r}, t))^2 + \eta(\mathbf{r}, t). \quad (2)$$

右辺の第 1 項は表面張力によって界面が滑らかにされる効果を表わしている. 第 2 項は界面が局所的に界面自身と垂直な方向に成長する性質から生じているが, 対称性の議論から非線形性を表わす最も簡単な表現である. 確率変数 $\{\eta(\mathbf{r}, t)\}$ が通常のように白色ガウス雑音であると仮定すると, その相関は次のように与えられる:

$$\langle \eta(\mathbf{r}, t) \eta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2D \delta^d(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'). \quad (3)$$

一般性を失わず平均を $\langle \eta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0$ とする. 前述した $w(L, t)$ における平均 $\langle \dots \rangle$ は確率変数 $\{\eta(\mathbf{r}, t)\}$ に関して行なわれる.

KPZ 方程式はそれまで計算機シミュレーションが先行していた研究状況の中で理論的な観点からのアプローチを可能にした点で重要な役割を果たした. まず等価であることが知られているノイズが含まれた Burgers 方程式における対称性からスケーリング関係式

$$\alpha + z = 2 \quad (4)$$

が導かれる。[9] KPZ 自身は 1 ループ近似の下で「動的繰り込み群の方法」を適用して $d = 1$ の場合に $\alpha = 1/2$ と $\beta = 1/3$ を導いた。[8] この結果はイーデンモデル [10] や弾道凝集モデル [7, 11], さらに様々な変形モデル [11, 12] による計算機シミュレーションの結果と非常に良く一致した。さらに幸いなことに、換言すれば近似計算にもかかわらず不思議なことに、この結論は厳密な方法で得られた結果とも一致したのである。[13]

このように KPZ 方程式は「成長する荒れた界面」の問題一般に対する巨視的なモデルとして広く受け入れられたのである。加えて興味深いことに、この方程式が単純な構造を有している故に、他の分野でみられる多くの問題と深く関係しているのである。[14, 15, 16]

残された理論的な興味は、KPZ 方程式の解が $d \geq 2$ においてどのような振る舞いをするか、である。「制限された solid-on-solid」モデル [12] を代表とする、KPZ 方程式と同じ普遍性クラスに属すると信じられている様々なモデル [12, 17, 18] に対する計算機シミュレーションによって、 $d > 2$ 次元においても「荒れた界面 ($\alpha \neq 0$)」の解が存在することが示唆されている。(文献 [19] によると「制限された solid-on-solid」モデルの連続化極限をとると KPZ 方程式が導かれる。) 直接的には KPZ 方程式を数値積分することによって $d = 2$ または $d = 3$ でも「荒れた界面」解が存在するとされている。[20, 21] KPZ が用いた「動的繰り込み群の方法」によって Tang たちは $d - \lambda$ 平面上で「滑らかな界面」から「荒れた界面」への“相転移”があり、その 2 相の境界線は $d_c = 2$ の近傍で $\lambda^2 \propto d - d_c$ であると主張した。[22] ごく最近では「非摂動的繰り込み群の方法」によって高次元での粗さ指数の次元依存性が調べられている。[23]

以上に述べた研究状況にもかかわらず、この小論では連続モデルとして正当化された KPZ 方程式は $d \geq 2$ では

$$\alpha = \beta = 0 \quad \text{かつ} \quad z = 2 \quad (5)$$

を示す解しか存在しないことを主張する。[24] もちろん、KPZ モデルには Tang たちが主張する“相転移”も存在しない。閾値の次元 $d = d_c = 2$ では対数異常が現れると考えられるが本小論では議論しない。この事実 (5) を導き、検証し、さらには KPZ 方程式に関する無矛盾な筋書きを描くためにこの小論を次の 5 段階で構成する。なお、「KPZ 問題」の言葉は往々にして広い意味で用いられるが、ここでは KPZ 方程式それ自身に関する問題として狭い意味に限ることにする。

1. まず、KPZ 方程式 (2) 式を (3) 式を満たすノイズの下で解いて得られる $w(L, t)$ は、 $d \geq 2$ のとき紫外発散することを指摘する。すなわち、(3) 式を用いた KPZ 方程式はその数学的根拠、正当性を失っているのである。
2. そこで微視的な単位 a を有限に保った KPZ 方程式を考え、 $a \rightarrow 0$ の極限操作を慎重に行ない、連続化された KPZ 方程式の解の振る舞いを調べる。その結果、 $d \geq 2$ の場合ノイズの相関を δ 関数より発散性が弱い相関に置き換えると、 $a \rightarrow 0$ において有限の $w(L, t)$ が得られることが明らかにされる。詳細は (21) 式を参照。その得られた $w(L, t)$ は L にも t にも依存しない定数である。
3. 前述した結果を確固としたものにするために KPZ 方程式の数値積分を $d = 1$ と $d = 3$ の場合に実行する。 $d = 1$ 次元では得られる $w(L, t)$ の値は、期待されるように空間の離散化の単位 a には独立である。他方、 $d = 3$ に対する $w(L, t)$ は離散化の単位 a が減少するにつれて増大していくことが見いだされる。しかし、上で述べたように、もし発散性の弱い相関を

もつノイズを用いると, a に依存しない $w(L, t)$ が得られる. それは, $a \rightarrow 0$ とした連続版における結果と一致するものと看做される. さらに, $w(L, t)$ は時間 t に関してほぼ一定であり, 理論的な予測 $\beta = 0$ と一致する.

4. KPZ 自身が採用した「動的繰り込み群の方法」を検証し, 彼らの計算には明らかな誤りが存在することを指摘する. 2 ループ近似による計算の結果, 「動的繰り込み群の方法」自体の有効性が疑われることが明らかになる.
5. 最後に簡単なまとめをする. われわれは, 連続モデルとして正当化された KPZ 方程式は $d \geq 2$ であれば「滑らかな界面」解しか有しないと結論する.

2 $w(L, t)$ における紫外発散

KPZ 方程式を空間的にフーリエ変換する. d 次元の波数ベクトル $\mathbf{k} = 2\pi\mathbf{n}/L$ は d 次元の整数 $\mathbf{n} = (n_1, n_2, \dots, n_d)$ を用いて定義される:

$$\partial \hat{h}(\mathbf{k}, t) / \partial t = - \sum_{\mathbf{q}(\neq 0)} A_{\mathbf{k}\mathbf{q}}(t) \hat{h}(\mathbf{q}, t) + \hat{\eta}(\mathbf{k}, t). \quad (6)$$

行列 $\mathbf{A}$ は対角成分 $A_{\mathbf{k}}^{(l)} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$ と非対角成分 $A_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(nl)}$ からなる. すなわち,

$$\mathbf{k} = \mathbf{q} \quad \text{に対して,} \quad A_{\mathbf{k}\mathbf{q}}(t) = A_{\mathbf{k}}^{(l)} \equiv \nu k^2, \quad (7)$$

$$\mathbf{k} \neq \mathbf{q} \quad \text{に対して,} \quad A_{\mathbf{k}\mathbf{q}}(t) = A_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(nl)} \equiv (\lambda/2) \mathbf{q} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q}) \hat{h}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, t) \quad (8)$$

である. 平らな初期条件 $h(\mathbf{r}, 0) = \hat{h}(\mathbf{k}, 0) = 0$ を設定すると, (6) 式の形式的な解は

$$\hat{h}(\mathbf{k}, t) = \sum_{\mathbf{q}(\neq 0)} \int_0^t dt' G_{\mathbf{k}\mathbf{q}}(t, t') \hat{\eta}(\mathbf{q}, t') \quad (9)$$

と表わされる. ここで,

$$\mathbf{G}(t, t') = T \exp \left[- \int_{t'}^t dt'' \mathbf{A}(t'') \right] \quad (10)$$

はグリーン関数行列, T は時間順序演算子である. グリーン関数行列には $G_{\mathbf{k}0}(t, t') = \delta_{\mathbf{k}0}$ と $G_{\mathbf{k}\mathbf{q}}(t, t) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$ の性質がある. グリーン関数行列 $\mathbf{G}(t, t')$ を次のように分解する:

$$\mathbf{G}(t, t') = \mathbf{G}_0(t, t') \cdot \mathbf{U}(t, t'). \quad (11)$$

ここで,

$$G_{0\mathbf{k}\mathbf{q}}(t, t') = \exp[-\nu k^2(t - t')] \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}, \quad (12)$$

$$\mathbf{U}(t, t') = T \exp \left[- \int_{t'}^t dt'' \mathbf{G}_0^{-1}(t'', t') \cdot \mathbf{A}^{(nl)}(t'') \cdot \mathbf{G}_0(t'', t') \right] \quad (13)$$

である.

$\hat{h}(\mathbf{k}, t)$ を用いて界面の幅 $w(L, t)$ は

$$w^2(L, t) = \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} \langle \hat{h}(\mathbf{k}, t) \hat{h}(-\mathbf{k}, t) \rangle_c \equiv \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} C(k, t) \quad (14)$$

と表わされる。相関関数 $C(k, t)$ は大きな L に対して大きさ $k = |\mathbf{k}|$ にだけ依存する。 $\langle AB \rangle_c$ は $\langle AB \rangle_c = \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$ で定義される。 $w(L, t)$ のスケーリング則は $C(k, t)$ の長波長における振る舞いから説明されるものである。すなわち、 $k \rightarrow 0$ で

$$C(k, t) \sim k^{-d-\alpha} f(k^z t) \quad (15)$$

が期待される。

まず、確率変数 $\eta(\mathbf{r}, t)$ に対して白色雑音 (3) 式を仮定するならば、 $k \rightarrow \infty$ となるにつれて

$$C(k, t) \rightarrow k^{-2} \quad (16)$$

であることを示す。この事実から $d \geq 2$ では $w(L, t)$ に紫外発散が発生することが分かる。KPZ 方程式は coarse-grained の意味で構成されているのであるから、言い換えると、問題には格子定数のような微視的な閾値が存在しているのだから極限操作 $k \rightarrow \infty$ をすることは人工的で意味をなさないと考えられるかも知れない。この意味からカットオフ波数 $\Lambda (= 2\pi/a)$ を導入して発散を避けることも可能である。しかしながら、 Λ を導入することは、結果として得られる結論がどのような Λ を選択するかによって異なる場合にのみ有効であることを強調したい。実際、低次元 $d < 2$ の場合にはどのような Λ を選ぶことも許されるのである。しかしながら、 $d \geq 2$ では、(16) 式が成り立つ限り $w(L, t)$ は Λ に強く依存する。

さて、(16) 式を証明しよう。(9) 式と (11) 式を (14) 式に代入すると、

$$C(k, t) = \sum_{\mathbf{q}_1(\neq 0)} \sum_{\mathbf{q}_2(\neq 0)} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 e^{-\nu k^2(t-t_1)} e^{-\nu k^2(t-t_2)} \\ \times \langle [U_{\mathbf{k}\mathbf{q}_1}(t, t_1) \hat{\eta}(\mathbf{q}_1, t_1)] [U_{-\mathbf{k}\mathbf{q}_2}(t, t_2) \hat{\eta}(\mathbf{q}_2, t_2)] \rangle_c \quad (17)$$

が得られる。ここにある2つの指数関数を見ると、非常に大きい k に対して t_1 と t_2 に関する積分において t に近い領域 ($t_1, t_2 \simeq t$) が最も大きい寄与をすることが分かる。そこで $U_{\mathbf{k}\mathbf{q}}(t, t')$ を $t - t'$ の級数で展開すると、

$$U_{\mathbf{k}\mathbf{q}}(t, t') = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} - (\lambda/2) \mathbf{q} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q}) \hat{h}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, t)(t - t') + O((t - t')^2) \quad (18)$$

となる。これを (9) 式に代入すると、非常に大きい k に対して

$$\hat{h}(\mathbf{k}, t) = \int_0^t dt_1 e^{-\nu k^2(t-t_1)} \hat{\eta}(\mathbf{k}, t_1) - (\lambda/2) \sum_{\mathbf{q}(\neq 0)} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \\ \times \mathbf{q} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q})(t - t_1) e^{-\nu k^2(t-t_1)} e^{-\nu(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2(t-t_2)} \hat{\eta}(\mathbf{q}, t_1) \hat{\eta}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, t_2) + \dots \quad (19)$$

が得られる。(3) 式を用いると結局

$$\lim_{k \rightarrow \infty} C(k, t) = D/(\nu k^2) + O(k^{-4}) \quad (20)$$

と結論される。最も高階の微分が非常に短い波長での振る舞いを規定しているはずであるから、この結果は十分合理的である。蛇足ながら、この展開において λ が小さいと言う仮定は全然使用しなかったことを注意しておく。

3 微視的 KPZ 方程式とその連続化極限

前節で見い出された紫外発散の困難を克服するために、微視的 KPZ 方程式に立ち返らねばならない。なぜならば、この発散は非常に短い波長のモードから発生しているからである。微視的 KPZ 方程式からの連続化を注意深く調べる必要がある。基盤を一辺 a のセルに分割しよう。そこで (3) 式の代わりに

$$\langle \eta(\mathbf{r}, t) \eta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2DR_a \Delta_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (21)$$

を考える。ここで、 $\Delta_a(\mathbf{r})$ は原点まわり幅 a の近傍で鋭く局在している $\mathbf{r}$ の関数である。例えば、 $\Delta_a(\mathbf{r}) = \exp[-r^2/(2a^2)]$ である。振幅 R_a は $a \rightarrow 0$ で $R_a \sim a^{-\phi}$ のように増大するものと仮定する。後出での便宜のためここで指数 ϕ を導入しておく。 δ 関数の場合は $\phi = d$ である。このように一般化しても $\lim_{a \rightarrow 0} R_a \Delta_a(\mathbf{r})$ から、なお空間的に無相関なノイズであることが分かる。

a を有限に保ったまま $w_{\text{micro}}(L, t; \nu, \lambda, D; a)$ を議論し、 $a \rightarrow 0$ の極限をとって、巨視的な量である $w(L, t)$ を観測する。すなわち、

$$w(L, t) = \lim_{a \rightarrow 0} w_{\text{micro}}(L, t; \nu, \lambda, D; a) \quad (22)$$

である。その物理的な意味が存在するためには $w(L, t)$ はゼロにも無限大にもならないことを注意しておく。 $w_{\text{micro}}(L, t; \nu, \lambda, D; a)$ を形式的に λ の級数として次のように展開する：

$$w_{\text{micro}}^2(L, t; \nu, \lambda, D; a) = D \sum_{n=0}^{\infty} (\lambda^2 D)^n W_n(L, t; \nu; a). \quad (23)$$

λ の $2n$ 次の項は波数ベクトル $\{\mathbf{k}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots\}$ などの $(2n+1)$ 個の和、 $\{t_1, t_2, \dots\}$ に関する $(4n+2)$ 個の積分、 $\mathbf{q} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q})$ のような波数ベクトルの積が $2n$ 対、 $e^{-\nu k^2(t-t')}$ のような指数関数が $(6n+2)$ 個、そして $(n+1)$ 個の対相関、 $\langle \hat{\eta}_{\zeta_1} \hat{\eta}_{\zeta_2} \rangle \dots \langle \hat{\eta}_{\zeta_{2n+1}} \hat{\eta}_{\zeta_{2n+2}} \rangle$ から成っている。ただし、 $\mathbf{q}_{\zeta_1} + \mathbf{q}_{\zeta_2} + \dots + \mathbf{q}_{\zeta_{2n+2}} = \mathbf{0}$ である。当然ながら $W_n(L, t; \nu; a)$ は有限の a では常に有限である。

$d > 2$ の場合に (22) 式での極限をとるためには、比 $\sigma = \tau/a^2$ を固定して

$$\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/a, \quad \tilde{\mathbf{k}} = \mathbf{k}a, \quad \tilde{t} = t/\tau \quad (24)$$

の変数変換が有効である。さらに、 $\tilde{\nu} = \nu\sigma$, $\tilde{D} = D\sigma$, $\tilde{\lambda} = \lambda\sigma$ と定義しておく。 $\tilde{\mathbf{k}}$ の絶対値は有界である ($2\pi a/L \leq |\tilde{\mathbf{k}}| \leq 2\pi$)。非保存の対に対して ($\mathbf{k} + \mathbf{q} \neq \mathbf{0}$)

$$\langle \hat{\eta}(\mathbf{k}, t) \hat{\eta}(\mathbf{q}, t') \rangle = O(a^{2d-\phi} \tau^{-1}), \quad (25)$$

保存の対に対して

$$\langle \hat{\eta}(\mathbf{k}, t) \hat{\eta}(-\mathbf{k}, t') \rangle = O(a^{d-\phi} \tau^{-1}) \quad (26)$$

であることが分かる。前者は a^d だけ高次の微小量であるが、有限 a の場合では無視できない。前出の相関関数の組 $\langle \hat{\eta}_{\zeta_1} \hat{\eta}_{\zeta_2} \rangle \dots \langle \hat{\eta}_{\zeta_{2n+1}} \hat{\eta}_{\zeta_{2n+2}} \rangle$ では、 n 個の非保存対、1 個の保存対から構成されている。(23) 式において λ 展開での $2n$ 次の項に変数変換 (24) を実行すると

$$a^{-d(2n+1)} \tau^{4n+2} a^{-2 \cdot 2n} (a^{2d-\phi} \tau^{-1})^n (a^{d-\phi} \tau^{-1}) = \sigma a^{2-\phi} (\sigma^3 a^{2-\phi})^n \quad (27)$$

の因子が現れる。その結果,

$$w_{\text{micro}}^2(L, t; \nu, \lambda, D; a) = \tilde{D} a^{2-\phi} \sum_{n=0}^{\infty} (\tilde{\lambda}^2 \tilde{D} a^{2-\phi})^n W_n(L/a, t/\tau; \tilde{\nu}; 1) \quad (28)$$

となる。\$W_n\$ 内の変数 \$L\$ と \$t\$ もスケールされている。さらに、\$d < 2\$ の場合に (22) 式に (28) 式を代入すると遠赤外発散が発生することにも注意する。何故ならば、(15) 式で示されているように、\$k \to 0\$ で \$C(k, t) \sim k^{-d-\alpha} f(k^2 t)\$ (\$\alpha > 0\$) が期待されるからである。したがって、上述の手続きは \$d < 2\$ の場合には適用できない。この場合では単に \$\phi = d\$ を用いて \$w(L, t) = w_{\text{micro}}(L, t; \nu, \lambda, D; 0)\$ である。他方、\$d > 2\$ の場合 (28) 式に遠赤外発散が生じないことを証明することは非常に難しい問題である。しかしながら、その発散が生じることは \$d > 2\$ では KPZ 方程式には解が存在しないことを意味している。したがってここでは遠赤外発散は発生しないと仮定して議論を先に進めることにする。

結論として、\$d > 2\$ の場合はいつでも、「条件」

$$\phi = 2 \quad (29)$$

が満足されるときに限って、(22) 式の極限操作において \$w(L, t)\$ が有限に存在することが可能となる。もし「条件」(29) が成立しなければ、\$w_{\text{micro}}(L, t; \nu, \lambda, D; a)\$ は比 \$L/a\$ ばかりでなく別に \$a\$ にも依存することになって、われわれの直感と矛盾する。第4節でこの事情は数値計算によって検証される。\$L/a, t/\tau \to \infty\$ であるから、(22) 式で得られる \$w(L, t)\$ は \$L\$ と \$t\$ 共に依存しない。導入されたノイズの相関 \$\lim_{a \to 0} R_a \Delta_a(\mathbf{r})\$ は \$d > 2\$ では \$\delta^d(\mathbf{r})\$ 関数より発散性が弱い。そのため \$\lim_{a \to 0} R_a \int d^d \mathbf{r} \Delta_a(\mathbf{r}) = 0\$ である。

4 数値的検証

残念ながら、前節までに展開してきた議論は厳密なものではない。そこで、この節では結論を補強するために KPZ 方程式を数値的に計算する。直接的な数値積分はおそらく問題に対するもっとも確実な方法であろう。しかし、この方法は次の予測が前提になっていることを忘れてはならない。すなわち、\$a\$ と \$\tau\$ を固定して (例えば \$a = 1\$), \$L\$ と \$t\$ を大きくしたときの \$w_{\text{micro}}(L, t; \nu, \lambda, D; a)\$ の漸近的振る舞いは連続化の極限、すなわち、\$L\$ と \$t\$ を固定して \$a, \tau \to 0\$ の極限操作で得られる結果と一致するという期待が前提にあるのである。換言すれば、\$w_{\text{micro}}(L, t; \nu, \lambda, D; a)\$ は比 \$L/a\$ と \$t/\tau\$ だけに依存していると期待されるのである。しかし、この期待が実現するかどうかは検証されねばならない。実際、KPZ 方程式を線形化した Edwards-Wilkinson 方程式 [25] では \$w_{\text{micro}}(L, t; \nu, \lambda, D; a)\$ が \$d > 2\$ の場合 \$L/a\$ ばかりでなく単独に \$a\$ にも依存する事実をわれわれは知っている。[26]

基盤を一辺 \$a\$ のセル \$(2N)^d\$ 個に分割する。格子点の位置ベクトルを \$d\$ 次元の整数 \$\mathbf{i} = (i_1, i_2, \dots, i_d)\$ を用いて \$\mathbf{r}_i = a\mathbf{i}\$ と記述する。ここで、\$i_l = 0, \pm 1, \dots, \pm N\$ (\$l = 1, 2, \dots, d\$) である。時間も時間間隔 \$\tau\$ で \$t_j = j\tau\$ (\$j = 0, 1, \dots\$) のように離散化する。(2) 式に対する差分方程式は陽的公式で

$$\begin{aligned} H(\mathbf{r}_i, t_{j+1}) = & H(\mathbf{r}_i, t_j) + (\nu\tau/a^2) \sum_{l=1}^d \{H(\mathbf{r}_i + a\mathbf{e}_l, t_j) - 2H(\mathbf{r}_i, t_j) + H(\mathbf{r}_i - a\mathbf{e}_l, t_j)\} \\ & + (\lambda\tau/8a^2) \sum_{l=1}^d \{H(\mathbf{r}_i + a\mathbf{e}_l, t_j) - H(\mathbf{r}_i - a\mathbf{e}_l, t_j)\}^2 + \tau B(\mathbf{r}_i, t_j) \end{aligned} \quad (30)$$

と表わされる。 $\mathbf{e}_l$ は第 l 番目の軸に平行な単位ベクトルである。確率変数 $B(\mathbf{r}_i, t_j)$ はガウス分布に従い、時空の格子点に独立に分配されるものとする。したがって、それらの相関は

$$\langle B(\mathbf{r}_i, t_j) B(\mathbf{r}_{i'}, t_{j'}) \rangle = 2Da^{-\phi} \tau^{-1} \delta_{i_1, i'_1} \delta_{i_2, i'_2} \cdots \delta_{i_d, i'_d} \delta_{j, j'} \quad (31)$$

と表わされる。(21) 式に対応していることに注意。実際は $B(\mathbf{r}_i, t_j) = \sqrt{(24D)a^{-\phi/2} \tau^{-1/2}} \xi$ と関係する一様乱数 $\xi \in [-1/2, 1/2]$ を使用した。分散の計算には支障を生じないことは保証されている。

われわれは $w(L, t)$ の微視的単位 a 依存性を調べた。計算機では全て離散化された数しか取り扱うことができないので $w(L, t)$ は正確には (22) 式における $w_{\text{micro}}(L, t; \nu, \lambda, D; a)$ である。非常に小さい a に対して計算された w_{micro} がもはや a に依存しなくなったら、連続化の極限值 $w(L, t)$ が得られたと看做することができる。その場合に前述した予測が実現したのである。われわれの計算は $d=1$ と $d=3$ の場合に限った。なぜなら、 $d=2$ の場合は対数異常が発生することが予想されるが、この対数異常を数値的に検出することは困難と思われるからである。

数値計算におけるパラメータとして $\nu = 0.5$, $D = 0.005$, 結合定数 $g = \lambda^2 D / \nu^3 = 15$ を採用した。まず最初は (31) 式において $\phi = d$ の場合を計算する。その $d=1$ の結果が図 1 に示されているが、予想通りに a 依存性は見い出されない。勾配は約 $1/3$ で理論の予想値 $\beta = 1/3$ と一致している。

他方、図 2 に示されている $d=3$ に対する $w(L, t)$ は a の減少につれて増大していく。これは無限大への発散を示唆している。したがって、この場合は前述した予測は実現しないのである。

もし (31) 式において (29) 式を用いると、 $w(L, t)$ の離散化単位 a の依存性は消滅する。その様子は図 3 に鮮明に示されている。加えて $\beta = 0$ を示唆するように $w(L, t)$ は時間 t に関してほぼ一定である。

5 「動的繰り込み群の方法」による研究

しかしながら、" $d > 2$ でさえ KPZ 方程式は「荒れた界面」の解を有する" とする報告は多数存在する。[12, 17, 18, 20, 21, 22, 23] 何故このような不一致が起こるのであろうか。事態を複雑にしている原因の一つに「繰り込み群の方法」による研究成果がある。この辺りの事情について言及しよう。

「動的繰り込み群の方法」のシナリオは次の通りである。[4] 第 1 のステップでは、グリーン関数、バーテックス関数、スペクトル関数の $e^{-\ell \Lambda} < |\mathbf{k}| < \Lambda$ の波数成分を積分（平均）する。 ℓ はスケールリング・パラメータである。非線形性のためこれらの関数は正確には得られないので、1 ループ近似などの近似計算の結果で代用する。第 2 ステップでは $\mathbf{k}$ 空間の大きさを元に戻すため $b = e^\ell$ を用いて $\mathbf{r} \rightarrow b\mathbf{r}, t \rightarrow b^2 t, h \rightarrow b^\alpha h$ と変換する。この変換は Family-Vicsek のスケールリング則 (1) 式に対応していることに注意しよう。こうした変換を通じても KPZ 方程式自体が不変であると言う要請をすると、KPZ 方程式に現れる係数 $(\nu, \gamma, \lambda, D)$ の変換関係が得られる。 $\ell \rightarrow 0$ の極限で変換関係はパラメータ空間内の力学系として表現される。スケールリング不変性を示す力学系の固定点からスケールリング指数が求められる。

最近、筆者は KPZ 自身が原論文で行なった「繰り込み群の方法」の計算に誤りがあることを見出した。[27] その事情を説明する。

グリーン関数 $G(\mathbf{k}, \omega)$ は $\langle \hat{h}(\mathbf{k}, \omega) \rangle = G(\mathbf{k}, \omega) \hat{\eta}(\mathbf{k}, \omega)$ によって定義される。ここで、 $\hat{h}(\mathbf{k}, \omega)$ は $h(\mathbf{r}, t)$ の時空のフーリエ成分である。1ループ近似でグリーン関数は、自己エネルギー

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = \int_{>} \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \int \frac{d\Omega}{2\pi} [\mathbf{q} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q})] [-\mathbf{q} \cdot \mathbf{k}] G_0(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - \Omega) |G_0(\mathbf{q}, \Omega)|^2, \quad (32)$$

を用いて,

$$G^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = G_0^{-1}(\mathbf{k}, \omega) [1 - 2\lambda^2 D G_0(\mathbf{k}, \omega) \Sigma(\mathbf{k}, \omega)], \quad (33)$$

と表わされる。ここで、 $G_0(\mathbf{k}, \omega) = (-i\omega + \nu k^2)^{-1}$ である。積分 $\int_{>} d^d \mathbf{q}$ は $e^{-\ell} \Lambda < |\mathbf{q}| < \Lambda$ における積分で、 $\Lambda = 2\pi/a_1$ は波数のカットオフ、 ℓ はスケーリング・パラメータである。

パラメータ ν の変換を計算するには $\omega = 0$ と置いた $G_0(\mathbf{k}, 0) = 1/(\nu k^2)$ を (33) 式に代入し、 k で展開し k^2 の係数を比較すればよい。 $\Sigma(\mathbf{k}, 0)$ における Ω の積分には、公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} \frac{1}{(a+ix)(b+ix)(b-ix)} = \frac{1}{2b(a+b)}. \quad (34)$$

が利用できる。また、角度積分

$$I_n(d) = \frac{\int_0^\pi d\theta \sin^{d-2} \theta \cos^n \theta}{\int_0^\pi d\theta \sin^{d-2} \theta}. \quad (35)$$

には

$$I_{2n+2}(d) = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n+1)}{d(d+2)(d+4) \cdots (d+2n)}, \quad I_{2n+1}(d) = 0, \quad (36)$$

が役立つ。残念ながらその結果からは k^2 の項は現れないので、 ν は変換されない。KPZ 自身の計算では変数変換 $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q} + \mathbf{k}/2$ がおこなわれている。しかし、この変数変換は有限の Λ に対して k^2 のオーダーの誤差を生じる。これが見かけ上 ν の変換になっていたのである。 λ や D の計算においてはこの変数変換は何らの誤差を生じない。

この節の冒頭で述べた2つのステップを結合させて、

$$\frac{d\nu}{d\ell} = (z-2)\nu, \quad (37)$$

$$\frac{d\lambda}{d\ell} = (z+\alpha-2)\lambda, \quad (38)$$

$$\frac{dD}{d\ell} = (z-d-2\alpha+g_{\text{eff}})D. \quad (39)$$

の方程式群が得られる。ただし、 d 次元単位球の表面積 S_d と $K_d = S_d/(2\pi)^d$ を用いて

$$g_{\text{eff}} = \frac{K_d}{4} \Lambda^{d-2} \frac{\lambda^2 D}{\nu^3}, \quad (40)$$

である。

(37) - (39) 式をまとめて、

$$\frac{dg_{\text{eff}}}{d\ell} = (2-d+g_{\text{eff}})g_{\text{eff}}. \quad (41)$$

を得る. この力学系の安定な固定点からスケーリング指数が得られるはずであるが, (41) 式からは $d > 2$ に対して $g = 0$ の安定な固定点を与えられるに過ぎない.

動的くりこみ群の方法が有効な方法であるかどうかを議論するために, 2 ループ近似まで計算を進める必要がある. 面倒な考察によってグリーン関数については図 4 のような結果が得られる. 残念ながら角度積分ができないので $d = 1$ の場合に限ることにする. その結果, k^2 に寄与する項は

$$G(k, 0) = G_0(k, 0) + \frac{1}{64\pi^2} \frac{\lambda^4 D^2}{\nu^7 k^2} \int dq_1 \int dq_2 \left\{ -\frac{(q_1 + q_2)^2}{(q_1^2 + q_2^2 + q_1 q_2)^3} - \frac{2q_2^3}{q_1(q_1^2 + q_2^2 + q_1 q_2)^3} \right\}. \quad (42)$$

となる. 2 ループ近似では内部モードが q_1 と q_2 と二つあることに注意する. 力学系を導くためには ℓ の 1 次までで十分であるから q_1 と q_2 のどちらかを $[e^{-\ell}\Lambda, \Lambda]$ で積分し, 他方を $[0, \Lambda]$ で積分すればよい. しかし, その場合積分は発散してしまう. さらに悪いことにはスペクトル関数に $q_1 + q_2 = 0$ を分母とする項が存在するために積分がやはり発散してしまう.

これらの議論から動的くりこみ群の方法は KPZ 方程式に対しては有効でないと結論せざるを得ない. やはり, 1 ループ近似で正確な解が得られたのは偶然に過ぎなかったのである.

6 まとめと議論

KPZ 方程式は奇妙な性質を有している. そのため様々な思い込みと誤解によって専門家の中に誤謬が蔓延している.

われわれはまず (3) 式を伴う KPZ 方程式 (2) 式から得られる界面のゆらぎ $w(L, t)$ が $d \geq 2$ では発散することを明らかにした. (22) 式で定義された $w_{\text{micro}}(L, t; \nu, \lambda, D; a)$ は微視的単位 a の減少につれて際限なく増大する. これまで誰もこの事実を指摘してこなかったのである. この結論は主に二つの道筋を辿って導かれた. ひとつは $w_{\text{micro}}(L, t; \nu, \lambda, D; a)$ の形式的な λ 展開であり, 他方は $w_{\text{micro}}(L, t; \nu, \lambda, D; a)$ が如何に微視化単位 a に依存するかに注意を払った数値積分である. また, 二つの方法によって (21) 式に現れるノイズの相関において (29) 式を採用すれば導かれる $w_{\text{micro}}(L, t; \nu, \lambda, D; a)$ は十分小さな a に対して a に依存しないという意味で合理的であることを主張した. (22) 式における $w(L, t)$ は L, t 共に独立であり, 指数 α, β は 0 である.

さらに, KPZ 自身が行なった「繰り込み群の方法」における計算の誤りを指摘し, 2 ループ近似計算を行い, 遂には「繰り込み群の方法」が KPZ 方程式に対しては成立しないことを明らかにした.

最後に関連する問題に対する数学的研究に言及したい. 文献 [28] には, KPZ 方程式と等価であるノイズが伴う熱方程式が議論されていて, $d > 2$ では汎関数の解が唯一存在するという定理が証明されている. 残念ながらこの解は L^2 族に属していて成長界面の問題には適さない. しかし, $d > 2$ 次元で解が特異な性質を示すことはこの小論で強調したように $w(L, t)$ が紫外発散することと符合する.

今後の課題は, $d \geq 2$ でも連続モデルとして正当化される KPZ 方程式に代わる新しい数学モデル (確率的偏微分方程式) を構成することである.

なお, この小論の詳細は文献 [29] を参照されたい. ご請求があれば別刷をお送りする.

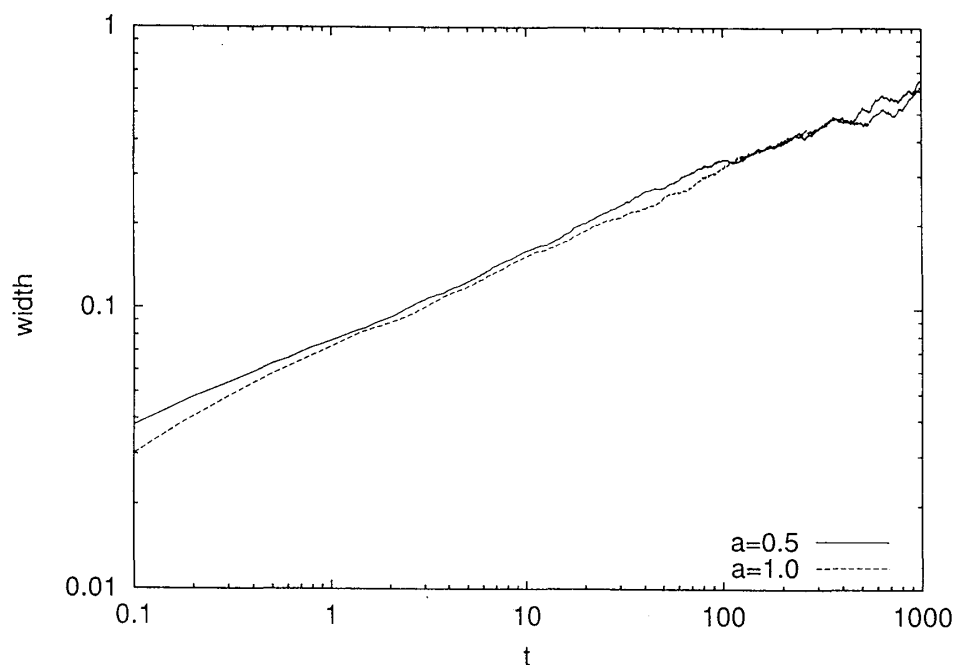
Acknowledgement

この小論は松山貴氏との共著論文 [24] と山本正彦氏の信州大学修士論文を基にしている。ここに、記して感謝する。

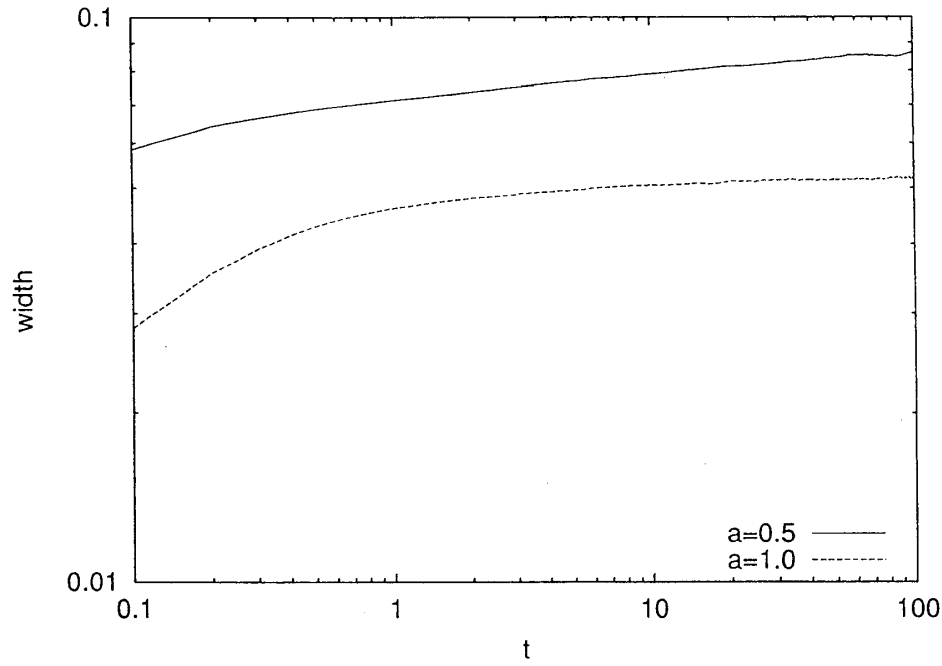
参考文献

- [1] *Dynamics of Fractal Surfaces*, eds. F. Family and T. Vicsek, (World Scientific, Singapore, 1991).
- [2] T. Vicsek: *Fractal Growth Phenomena*, 2nd ed. (World Scientific, Singapore, 1992).
- [3] 本田勝也: 日本物理学会誌 **49** (1994) 819.
- [4] A. -L. Barabási and H. E. Stanley: *Fractal Concept in Surface Growth*, (Cambridge University Press, New York, 1995).
- [5] T. Halpin-Healy and Y. -C. Zhang: Phys. Rep. **254** (1995) 215.
- [6] 本田勝也: 科学 **66** (1996) 184.
- [7] F. Family and T. Vicsek: J. Phys. **A18** (1985) L75.
- [8] M. Kardar, G. Parisi and Y. -C. Zhang: Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 889.
- [9] E. Medina, T. Hwa, M. Kardar and Y. -C. Zhang: Phys. Rev. **A39** (1989) 3053.
- [10] J. G. Zabolitzky and D. Stauffer: Phys. Rev. **A34** (1986) 1523.
- [11] P. Meakin, P. Ramanlal, L. M. Sander and R. C. Ball: Phys. Rev. **A34** (1986) 5091.
- [12] J. M. Kim and J. M. Kosterlitz: Phys. Rev. Lett. **62** (1989) 2289.
- [13] V. S. L'vov, V. V. Lebedev, M. Paton and I. Procaccia: Nonlinearity **6** (1993) 25.
- [14] J. M. Burgers: *The Nonlinear Diffusion Equation* (Riedel, Boston, 1974).
- [15] Y. Kuramoto: *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence* (Springer-Verlag, Berlin, 1984); G. I. Sivashinsky: Acta Astronautica **4** (1977) 1177.
- [16] K. Nakayama and M. Wadati: J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1995) 1501.
- [17] R. Jullien and R. Botet: J. Phys. **A18** (1985) 2279.
- [18] T. Ala-Nissila, T. Hjelt, J. M. Kosterlitz and O. Venöläinen: J. Stat. Phys. **72** (1993) 207.
- [19] K. Park and B. Kahng: Phys. Rev. **E51** (1995) 796.
- [20] J. Amar and F. Family: Phys. Rev. **A41** (1990) 3399.

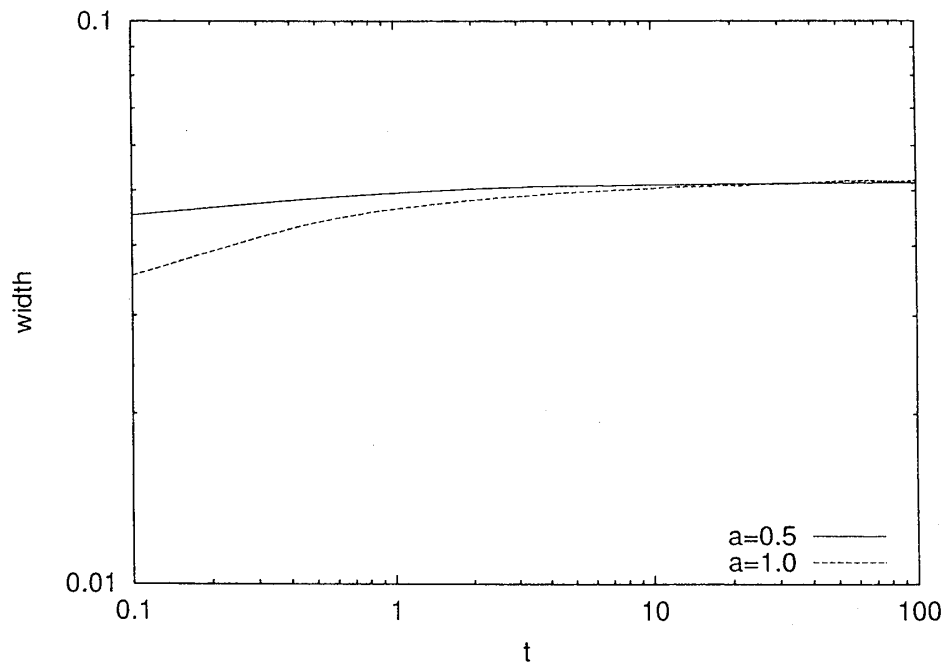
- [21] K. Moser, J. Kertész and D. E. Wolf: Physica A**178** (1991) 215; K. Moser and D. E. Wolf: J. Phys. A**27** (1994) 4049.
- [22] L-H. Tang, T. Nattermann and B. M. Forrest: Phys. Rev. Lett. **65** (1990) 2422.
- [23] C. Castellano, M. Marsili and L. Pietronero: Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 3527; C. Castellano, A. Gabrielli, M. Marsili, M. A. Muñoz and L. Pietronero: Phys. Rev. E**58** (1998) R5209.
- [24] K. Honda and T. Matsuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999) 3236.
- [25] S. F. Edwards and D. R. Wilkinson: Proc. Roy. Soc. London A**381** (1982) 17.
- [26] K. Honda: Phys. Rev. E**55** (1997) R1235.
- [27] K. Honda: J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 8; *ibid.* **68** (1999) 699.
- [28] H. Holden, T. Lindstrøm, B. Øksendal, J. Ubøe and T. -S. Zhang, Commun. Partial Diff. Eqs. **19** (1994) 119.
- [29] K. Honda, T. Matsuyama and M. Yamamoto, Recent Res. Devel. Stat.Phys. 2 (2002) 53.



1. $d = 1$ の場合に $w_{\text{micro}}(L, t; \nu, \lambda, D; a)$ と t を $a = 1.0$ と $a = 0.5$ に対して両対数プロットしたもの。掲載値は 10 回実行した結果を平均したものである。挿入された実線の勾配は $1/3$ である。系の大きさは $L = 1000$ 。



2. $d = 3$ の場合に $w_{\text{micro}}(L, t; \nu, \lambda, D; a)$ と t を $a = 1.0$ と $a = 0.5$ に対して両対数プロットしたもの。掲載値は 10 回実行した結果を平均したものである。挿入された実線の勾配は 0.04 である。系の大きさは $50 \times 50 \times 50$ 。



3. $d = 3$ の場合に $w_{\text{micro}}(L, t; \nu, \lambda, D; a)$ と t を $a = 1.0$ と $a = 0.5$ に対して両対数プロットしたもの。(31) 式における (29) 式を用いた。掲載値は 10 回実行した結果を平均したものである。系の大きさは $50 \times 50 \times 50$ 。

$$\begin{aligned}
 & \Rightarrow = \rightarrow + 4 \text{ A} \\
 & + 8 \text{ B} + 16 \text{ C} \\
 & + 16 \text{ D} + 16 \text{ E} \\
 & + 16 \text{ F} + 16 \text{ G} \\
 & + 16 \text{ H} + 16 \text{ I} \\
 & + 16 \text{ J}
 \end{aligned}$$

4. 2ループ近似によるグリーン関数のダイアグラム展開. ダイアグラム A,D,H からの k^2 への寄与は無い.