

揺ぎの非線型動力学について

九大理 森 肇

線型散逸系の輸送係数や緩和常数は熱平衡状態の揺ぎによって決まるが、その揺ぎの長波長成分の寄与が異常に大きくなる現象として、臨界点近傍における輸送係数、緩和常数の異常や低次元における輸送係数の異常などがある。これらの異常現象を取り扱うには slowly-varying modes の間の coupling を取入れることが必要である。その方法の一つとして非線型 Langevin 方程式を使う方法があるが、いろいろと不満足な点があるので、それを射影演算子の方法によって定式化し、問題点を検討した。以下その概要をのべる。

slowly-varying modes を表わす直交規格化された力学変数の組を $A \equiv \{ A_k \}$, $\langle A_k A_l^* \rangle = \delta_{k,l}$ とし、それらに対する非線型 Langevin 方程式を

$$d A_k / d t = v_k(A) - \sum_l \gamma_{kl}^0 A_l + R_k(t), \quad (1)$$

とする。この式の性格を規定するものは揺動力 $R_k(t)$ の性質であり、揺動力 $R_k(t)$ は $\{ A_k \}$ と完全に統計的独立であるとする。つまり、 $\{ A_k \}$ の任意の関数 $G(A)$ に対して

$$\langle R_k(t) G(A) \rangle = 0. \quad (2)$$

そのとき v_k は非線型関数であり、簡単な場合には

$$v_k(A) = i \sum_l \omega_{kl} A_l - i \sum_{p,q} \lambda_{kpq} (A_p A_q - \langle A_p A_q \rangle) + \dots \quad (3)$$

と展開できる。 γ_{kl}^0 は Langevin の揺動力 $R_k(t)$ の時間相関によって決まる“bare”な輸送係数であり、観測される“true”な輸送係数は $v_k(A)$ の非線型項を繰りこんだものである。一般に“true”な輸送係数は linear な運動方程式

$$d A_k / d t = i \sum_l \omega_{kl} A_l - \sum_l \int_0^t \varphi_{kl}(s) A_l(t-s) ds + f_k(t), \quad (4)$$

の記憶関数 $\varphi_{kl}(s)$ のフーリエ変換によって与えられる。この式の性格を規定する揺動力 $f_k(t)$ は、 $\{ A_k \}$ の一次関数とだけ統計的独立であり、非線型項を含んでいる。(1)式

森 肇

が強い仮定の下でしか得られないのに比べ (4) 式は近似なしに成立つものであるが、とくに (1) 式が成立つときには、

$$\varphi_{k\ell}(t) = 2\tau_{k\ell}^0 \delta(t) + \psi_{k\ell}(t) \quad (5)$$

とかける。ここに $\psi_{k\ell}(t)$ は $v_k(A)$ の非線型項を繰りこむことによって得られる記憶関数である。この繰りこみを射影演算子の方法を使って行ない、繰りこみの項 $\psi_{k\ell}(t)$ もある新しい揺動力 $q_k(t)$ の時間相関で決まる標準型をもつことを示すのが、この話の主要な内容である。

非線型 Langevin equation (1) に対応した Fokker-Planck 方程式 (に揺ぎを加えた式) を

$$\partial g_a(t) / \partial t = D g_a(t) + F_a(t), \quad (6)$$

とする。ここに $g_a(t)$ は $\{A_k(t)\}$ が値 $a \equiv \{a_k\}$ をとる分布

$$g_a(t) = \prod_k \delta(A_k(t) - a_k) \quad (7)$$

である。確率分布関数 $P(a, t)$ はこの $g_a(t)$ をアンサンブル平均したもので与えられ、 $F_a(t)$ はこの平均値からの揺ぎを与える揺動力である。いま Fokker-Planck 演算子 D に共役な演算子 A を

$$\int [A f(a)] g(a) da = \int f(a) [D g(a)] da \quad (8)$$

によって定義し、

$$a_k(t) \equiv \exp(tA) a_k \quad (9)$$

を導入すれば、力学変数 $A_k(t)$ は揺動力 $F_a(t)$ を使って

$$A_k(t) = [a_k(t)]_{a=A} + \int_0^t ds \int da a_k(t-s) F_a(s), \quad (10)$$

とかける。 $a_k(t)$ は演算子 A によって時間発展をするわけであるが、この運動に対して linear な式 (4) に対応した式を立てれば

$$da_k/dt = \sum_{\ell} (i\omega_{k\ell} - \tau_{k\ell}^0) a_{\ell} - \sum_{\ell} \int_0^t \psi_{k\ell}(s) a_{\ell}(t-s) ds + q_k(t), \quad (11)$$

がえられる。揺動力 $q_k(t)$ は $\langle q_k(t) a_\ell^* \rangle = 0$ を満し、そのあらわな表式は

$$q_k(t) = \exp[t(1-P_a) A] v'_k(a) \quad (12)$$

と与えられる。ここに P_a は $\{ a_k \}$ の張る部分空間への射影演算子であり、 $v'_k(a)$ は $v_k(a)$ の非線型部分を表わす。記憶関数 $\psi_{kl}(t)$ は (5) の $\psi_{kl}(t)$ と同じものであり、揺動力 $q_k(t)$ を使って

$$\psi_{kl}(t) = \langle q_k(t) q_\ell^*(0) \rangle \quad (13)$$

と標準型で与えられる。

このように非線型 Langevin 方程式 (1) の非線型項は新しい記憶関数 $\psi_{kl}(t)$ をもたらしめるものであるが、この変換の性質をもっと直接的に見るには、3つの揺動力 $R_k(t)$, $f_k(t)$, $q_k(t)$ の間の関係を求めればよい。その関係は

$$f_k(t) = R_k(t) + [q_k(t)]_{a=A} + \int_0^t ds \int da q_k(t-s) F_a(s). \quad (14)$$

と与えられる。このように輸送係数 $\varphi_{kl}(t)$ を決める揺動力 $f_k(t)$ は2つの部分からなる。rapidly-varying modes による揺動力 $R_k(t)$ と、slowly-varying modes による揺動力 $[q_k(t)]_{a=A}$ である。第3項はこれら2種類の揺動間の干渉項であり、記憶関数には、(5)式のように、きいてこない。このように2つの部分にきれいに分れるのは、勿論用いた仮定のためである。その仮定は(1)式において既に用いられたものであるが、系内の運動が slowly-varying modes と rapidly-varying modes とに分類され、しかもそれらの time scales が際立って異なるという仮定である。しかしこの仮定は一般には成立し得ない。長波長の揺動を取扱うとき、長波長成分を slowly-varying modes に、短波長成分を rapidly-varying modes にとって、中間波長成分の寄与を無視するわけであるが、これは長波長成分の寄与だけで決まる singularity を議論するときには近似的に許されるかも知れない。しかし Wilson の臨界現象の理論のように、短波長成分の側から順次くりこんで長波長成分に到る変換を見出すことが望ましい。

記憶関数 (13) は

$$\psi_{kl}(t) = \langle v'_\ell^*(a) \exp[t(1-P_a) A] v'_k(a) \rangle \quad (15)$$

森 肇

とかけるわけだが、いま応用の例として、 $v_k'(a)$ として (3) の第 2 項をとり、

$$\exp [i(1-P_a)A] a_p a_q \simeq a_p(t) a_q(t) \quad (16)$$

と近似すれば、さらに 4 体相関を 2 体相関の積で近似することにより

$$\psi_{kl}(t) \simeq 2 \sum_{pq} \sum_{fg} \lambda_{kpq} \lambda_{lfg}^* \xi_{pf}(t) \xi_{qg}(t) \quad (17)$$

がえられる。ここに $\xi_{pf}(t)$ は緩和行列

$$\xi_{km}(t) \equiv \langle A_k(t) A_m^*(0) \rangle = \langle a_k(t) a_m^*(0) \rangle \quad (18)$$

である。(11) 式に $a_m^*(0)$ をかけて平均し、(17) を挿入すれば

$$d \xi_{km}(t) / dt - \sum_l (i \omega_{kl} - r_{kl}^0) \xi_{lm}(t) \quad (19)$$

$$\simeq -2 \sum_l \sum_{pq} \sum_{fg} \lambda_{kpq} \lambda_{lfg}^* \int_0^t \xi_{pf}(s) \xi_{qg}(s) \xi_{lm}(t-s) ds$$

が得られる。これは緩和行列 $\xi_{km}(t)$ をきめる self-consistent な式であり、川崎氏が臨界現象の研究に用いたものに他ならない。その他 Zwanzig が 2 次元の輸送係数の発散の研究に用いた式も、この (15) 式から直ちに導くことができる。

臨界点上およびその近傍では揺ぎが大きく、揺ぎが大きいつきには (1) の線型は散逸項の近似は適当ではない。そのときにも、実は、(4), (5), (6), (11) および (14) の基本式は成立する。ただし D および A の表式は一般化されねばならない。このように、従来の理論の限界を超えて成立するものであるが、その詳細は別の機会に譲りたい。たゞ、繰りこみの項 $\psi_{kl}(t)$ が新しい揺動力の時間相関で与えられること、および、繰りこまれた正しい輸送係数を与える揺動力 $f_k(t)$ とランジュバンの揺動力 $R_k(t)$ との関係が (14) の関係で与えられることを注意しておきたい。なお御関心のある方には preprint をお送りします。