

確率的な自己触媒反応拡散系における間欠性について*

中尾 裕也¹, Alexander S. Mikhailov²

¹ 京都大学 大学院理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻

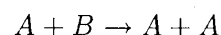
² Abteilung Physikalische Chemie, Fritz-Haber-Institut der Max-Planck Gesellschaft

1 概要

空間分布した化学反応や生物の個体数変動において、反応率や増加率に揺らぎがある状況の簡単なモデルである「確率的な自己触媒反応拡散系」の間欠的な挙動とその有限サイズ効果について議論したい。この系は、空間の各点でランダム乗法過程に従い、周囲と拡散結合する場の確率偏微分方程式で与えられる。この方程式は、ランダムな媒質中の directed polymer の分配関数が従うものと同型で、ラフな界面の成長を記述する KPZ 方程式や、ノイズを受けた Burgers 方程式に帰着できるため、古くから詳しく調べられて来ている。特に、場の各次モーメントの発展方程式は、 δ 関数的な相互作用をする多粒子系の固有値問題に帰着でき、それらの成長率が厳密に求められている。また、経路積分の最適揺らぎの議論によって、場の典型的な発展経路が非線形 Schrödinger 方程式に従うことも知られており、そのソリトン解を用いて系の典型的なイベントの形状と発生率が見積もられている。今回の研究では、大偏差形式の議論を用いて、場の各次のモーメントの成長率からそれらに寄与する各イベントのレート関数を求め、これを用いて系の間欠性への有限サイズ効果を議論する。その結果、有限系においては、各次のモーメントは最初は間欠的な指数成長を示すが、すぐに緩和して非間欠的な stretched exponential 的な成長に移り変わることが予想され、これを数値計算によって確認する。この結果の応用例として、拡散結合系の時空カオスの Lyapunov 指数のノルム依存性について議論する。

2 確率的な自己触媒反応拡散系

化学物質 A が B に対して自己触媒的に働き、 B を A に変化させるような、仮想的な自己触媒化学反応



を考えよう。質量作用 (?) の法則より、それらの濃度を $[A]$, $[B]$ とすると、時刻を t で表して、

$$\frac{d[A]}{dt} = k[A][B] \propto [A]$$

という方程式が成り立つ。一方、生物集団の個体数 N の増加を考えても、餌が十分にあれば、同様に

$$\frac{dN}{dt} \propto N$$

という方程式が成立する。無論、通常は個体数が増加すると環境が悪くなるので指数増大は続かず個体数は飽和する。これは上の式に非線形項 $-N^2$ を加えた logistic 方程式などで記述されることは良く知られているが、そのような状況は考えない。以下、変数を z として

$$\frac{dz(t)}{dt} = \alpha z(t)$$

と書く。 α は成長率 (あるいは反応/増殖率) である。この方程式に従う系を自己触媒反応系と呼ぶことにする。

さて、何らかの要因により、成長率に揺らぎがあるとしよう。簡単のため、揺らぎの分布は Gauss 型で時間相関を持たないとする、 z の従う方程式は

$$\frac{dz(t)}{dt} = [\alpha + \zeta(t)]z(t)$$

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = 2s\delta(t-t')$$

*この原稿は、著者らの公表論文 [21] に基づいているが、論理構成が異なる。いくつかの図は [21] に掲載したものと同一数値データで作り直した。

のような Langevin 方程式になるだろう。この場合、 α は平均の成長率を意味し、白色 Gauss ノイズ $\zeta(t)$ は成長率の揺らぎを表す。揺らぎの強さは s で与えられる。この方程式にはノイズが乗法的に入るため、確率積分の解釈が問題となるが、以下では数値計算を容易にするため、常に伊藤解釈する。線形な方程式なので、Stratonovich 解釈しても単に α が $\alpha - s$ に変化するだけである [9]。以下、この方程式を確率的な自己触媒反応系と呼ぶ。

さて、ここまでは空間は考えていなかったが、系が空間的に広がっており、変数 z が空間的な位置 x に依存し、また拡散する場合を考えよう。この場合、変数 z や成長率の揺らぎ ζ は t だけでなく x にも依存するようになり、それを記述する方程式は、空間 1 次元の場合、

$$\frac{\partial z(x,t)}{\partial t} = [\alpha + \zeta(x,t)] z + D \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}$$

$$\langle \zeta(x,t) \zeta(x',t') \rangle = 2s \delta(t-t') \delta(x-x')$$

のようになるだろう。ここで、成長率の揺らぎは $\zeta(x,t)$ は空間的にも相関を持たないと仮定して、時空白色 Gauss ノイズで表した。 D は拡散定数である。以下、この確率的な自己触媒反応拡散系、あるいは確率的な生成消滅過程を、**Stochastic Autocatalytic Process with Diffusion**, 略して“**SAPD**”と呼ぶことにする [19, 20, 24, 21]。Fig.1 に SAPD の典型的な実現 (ある時刻でのスナップショット) を示す。系は非常に強い空間間欠性を示し、場 $z(x,t)$ は少数の特徴的なバースト構造から成ることが分かる。

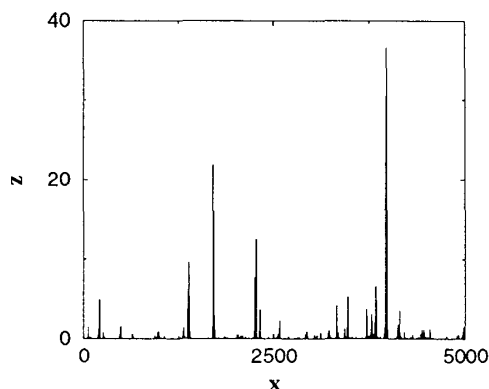


Figure 1: SAPD の典型的な実現。場 $z(x,t)$ のある時刻でのスナップショット。

3 他のモデルとの関係

上で導入した SAPD の方程式は、Hopf-Cole 変換 $z(x,t) = \exp[h(x,t)]$ によって、有名な Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) 方程式

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = (\alpha - s) + D \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + D \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + \zeta(x,t)$$

に変形される。この KPZ 方程式は、ラフな界面の発展を記述する普遍的な方程式で (Fig.2), porous media への液体の浸透面、紙を燃やした時の燃焼面、時空カオスを示す蔵本-Sivashinsky 方程式など、種々の界面成長モデルが、大きなスケールの極限で KPZ 方程式の普遍クラスに属する事が知られている [14, 16, 12, 1, 3]。さらに変換

$$u(x,t) = -\partial h(x,t) / \partial x$$

により KPZ 方程式は **noisy Burgers** 方程式

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + 2Du \frac{\partial u}{\partial x} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial \zeta(x,t)}{\partial x}$$

に変形される。この方程式は、流体の運動を記述する Navier-Stokes 方程式の 1 次元版にノイズを与えた形をしており、ランダム外力を受けた「渦なし非圧縮流体」を記述する。この方程式は、フラクタルな場のパターンを示すなど 3 次元の流体乱流 (turbulence) に一見似た振舞を示すが、実際は種々の点で異なるため、“Burgulence” などと呼ばれて区別されている [7]。他にも種々の現象がこの方程式によって記述される。はるか昔に、Forster, Nelson, Stephen による繰り込み群を用いた解析により、スケーリング指数が求められている [6]。

KPZ 方程式については、界面の幅

$$w(L,t) = \sqrt{\langle (h(x,t) - \bar{h}(t))^2 \rangle}$$

に関するスケーリング則が有名である ($\bar{h}(t)$ は界面の平均位置)。Family-Vicsek のスケーリング仮説によると、界面の幅は次のようにスケールされる:

$$w(L,t) \sim L^\chi f_{KPZ} \left(\frac{t}{L^z} \right)$$

ここで L はシステムサイズ、 t は時刻である。スケーリング関数 f_{KPZ} は、

$$f_{KPZ}(x) \sim \begin{cases} x^{\beta=x/z} & (x \ll 1) \\ \text{const.} & (x \gg 1) \end{cases}$$

のような形である。つまり界面の幅は $t \ll L^2$ では $w(L, t) \sim t^\beta$ のように増大し、 $t \gg L^2$ では $w(L, t) \sim L^z$ のように飽和する (Fig.3)。空間 1 次元の場合、厳密にスケーリング指数 χ, z, β が

$$\chi = \frac{1}{2}, \quad z = \frac{3}{2}, \quad \beta = \frac{\chi}{z} = \frac{1}{3}$$

となることが知られており、繰り込み群でも同じ結果が得られている。2次元以上でも対称性より

$$\chi + z = 2$$

は成り立つが、それ以上は良く分かっていないらしい¹。

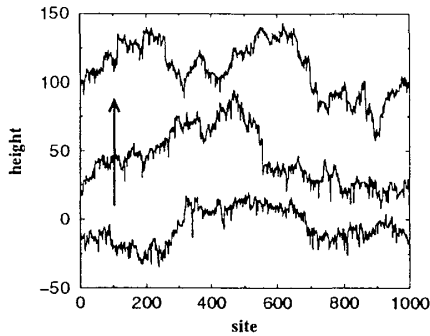


Figure 2: Ballistic Deposition モデルの界面成長。3つの時刻でのスナップショット。モデルについては [1] 参照。図はオリジナル。

KPZ 普遍クラスに属する界面成長の例として、Ballistic Deposition モデルの界面成長の様子と界面幅成長のスケーリング則の例を Fig.2 と Fig. 3 に示す。Ballistic Deposition モデルはコロイド凝集などのモデルであり、Barabasi & Stanley の本 [1] に説明がある。基本的には粒子が降り積もって界面が成長する単純なモデルで、下方だけではなく側方にも付着することが普遍クラスを決める上で重要である。

SAPD はランダム媒質中の directed polymer の問題とも等価である。以下、Halpin-Healy & Zhang のレビュー [12] に従って概略を述べる。 $x \rightarrow h, t \rightarrow x, z \rightarrow Z$ と変数を置き換えると、SAPD 方程式は

$$\frac{\partial Z(x, h)}{\partial x} = \frac{T}{2\nu} \frac{\partial^2 Z}{\partial h^2} - \frac{1}{T} V(x, h) Z$$

¹ 今回の研究会での本田先生の発表によると、KPZ の計算は間違っており、厳密な結果と同じ結果が得られたのは偶然だとのことである。

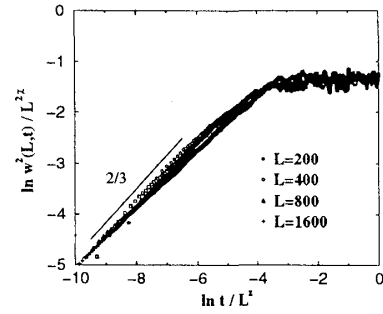


Figure 3: Ballistic Deposition モデルの界面幅のスケーリング。システムサイズ $L = 200, 400, 800, 1600$ の場合の $w^2(L, t)$ の発展をリスケールしてプロット。詳細は [1] 参照。図はオリジナル。

$$\langle V(x, h) V(x', h') \rangle = 2s \delta(x - x') \delta(h - h')$$

となる。この方程式の経路積分表式での解は、

$$Z(x, h) = \int D[h(x)] \exp \left(-\frac{1}{T} H[h(x)] \right)$$

$$H[h(x)] = \int_0^x dx \left[\frac{\nu}{2} \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + V(x, h) \right]$$

で与えられる。 H は第 1 項を張力、第 2 項をランダムなポテンシャルと見ると、ランダム媒質中で 2 点 $(0, 0)$ と (x, h) を結ぶ「ひも」(polymer) の Hamiltonian の形をしており、 $Z(x, h)$ はその分配関数の形をしている (Fig.4)。

Kardar [15] によると、この directed polymer の分配関数のモーメント $[Z^k]$ は Schrödinger 方程式にマップして Bethe ansatz を用いることで計算できる (後で SAPD について全く同様の議論をする)：

$$[Z^k] = \exp(-E_k x), \quad E_k = Ak + Bk(k^2 - 1)$$

この結果より、Kardar はランダム媒質中の directed polymer の自由エネルギーとその揺らぎは、polymer の長さ x に対して、

$$[f] \sim x, \quad \Delta f \sim x^{1/3}$$

のように振舞うと述べた²。ここで現れるスケーリング指数 $1/3$ は KPZ の界面のスケーリング指数 β と同じものだと主張されている。

² Kardar の論文では $\ln Z$ の 3 次のキュムラントが x に比例する事から $1/3$ という指数を導いている。これは後で示すように Z のモーメントが $t^{1/3}$ を指数に持つ stretched exponential 型になることと関係はあるが等価ではないと思われる。

このように, SAPD 方程式は KPZ 方程式や noisy Burgers 方程式, ランダム媒質中の directed polymer モデルなどと互いに変形されるが, それらの対応関係, 例えば以下で議論するように, 有限サイズ効果の効き方などについては, 多少微妙なところがある.

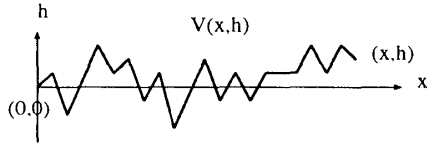


Figure 4: ランダム媒質中のひも.

4 モーメントと間欠性指数

確率的な場を特徴づけるには場の多点相関関数を考えるのが一般的だが, ここでは簡単のため, SAPD 方程式の生成する間欠的な場 $z(x, t)$ を特徴づける量として, 場の k 次のモーメントに注目しよう:

$$M_k(t) = \langle z(x, t)^k \rangle.$$

$M_k(t)$ は典型的には指数関数的に増大するので, その成長率を

$$M_k(t) \sim \exp[\lambda_k t], \quad \lambda_k = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln M_k(t)$$

で定義し, 相対モーメントの成長率 = 間欠性指数を

$$\frac{M_k(t)}{M_1(t)^k} \sim \exp[\Lambda_k t]$$

$$\Lambda_k = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \left[\frac{M_k(t)}{M_1(t)^k} \right] = \lambda_k - k\lambda_1$$

と定義する. z の分布 $p(z, t)$ が (簡単のため 1 変数として), 例えばブラウン運動の分布

$$p(z, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{z^2}{2Dt}\right)$$

のように単一のスケーリング指数 H によって

$$p(z, t) = t^{-H} f(t^{-H} z)$$

を満たし, 自己相似に発展するなら, $M_k(t)$ は

$$M_k(t) = \langle z(t)^k \rangle \sim t^{Hk}$$

のように増大し,

$$\lambda_k = Hk, \quad \Lambda_k = 0$$

となって, 成長率 λ_k は k に線形で, 間欠性指数 Λ_k はゼロとなる (非間欠的). 一方, $p(z, t)$ の発展が自己相似でない時は, λ_k は k の非線形関数となって, Λ_k も k に依存する. この時, 変数 z の分布の発展は (間欠的) であると言われ, 単一のスケーリング指数では, 分布の発展を不十分にしか特徴づけられない³.

5 モーメントの時間発展

Mikhailov & Loskutov のテキスト [19] に従って, SAPD のモーメントの時間発展を考えよう. 空間を考えず, 拡散がない ($D = 0$) 場合は, SAPD の Langevin 方程式は単に

$$\frac{dz(t)}{dt} = [\alpha + \zeta(t)]z, \quad \langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = 2s\delta(t-t')$$

となる. これはいわゆる「幾何学的ブラウン運動」で, z の分布 $p(z, t)$ の従う Fokker-Planck 方程式は

$$\frac{\partial p(z, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} \{\alpha z p\} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \{s z^2 p\}$$

であり, これより

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle z(t)^k \rangle &= \frac{d}{dt} \int dz z^k p(z, t) \\ &= [k\alpha + (k^2 - k)s] \langle z(t)^k \rangle \end{aligned}$$

となるので, モーメント $M_k(t)$ の成長は

$$M_k(t) = \langle z(t)^k \rangle \sim \exp[k\alpha t + (k^2 - k)st]$$

と求められる. 良く知られているように, 成長率は単に $k\alpha$ ではないが, 特に 1 次のモーメント (平均値) に関しては,

$$M_1(t) = \langle z(t) \rangle \sim \exp[\alpha t]$$

である. 成長率と間欠性指数は

$$\lambda_k = k\alpha + (k^2 - k)s, \quad \Lambda_k = (k^2 - k)s$$

³ここでは「間欠性」という言葉を流体乱流の文脈で使われるのと同じ意味で使っていて, 単に分布の裾が Gauss 分布より重いというだけではなく, 分布の自己相似性が破れていることを意味する.

となり、間欠性指数 Λ_k がゼロではなく k の非線形関数なので、 z の分布の時間発展は間欠的である。

次に z が空間に広がっており、拡散する状況 ($D > 0$) を考える。この時、場 $z(x, t)$ の分布 $P[z(x), t]$ の従う汎関数 Fokker-Planck 方程式は

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P[z(x), t] = & \\ - \int dx \frac{\delta}{\delta z(x)} \left\{ \left[\alpha z(x) + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} z(x) \right] P \right\} & \\ + \int dx \frac{\delta^2}{\delta z(x)^2} \{ s z(x)^2 P \} & \end{aligned}$$

であり、これより $z(x, t)$ の k 点相関関数

$$\begin{aligned} M_k(t, x_1, \dots, x_k) &= \langle z(x_1, t) \cdots z(x_k, t) \rangle \\ &= \int D[z(x)] z(x_1) \cdots z(x_k) P[z(x), t] \end{aligned}$$

について、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} M^k(t) &= \frac{d}{dt} \int D[z(x)] z(x_1, t) \cdots z(x_k, t) P[z(x), t] \\ &= [k\alpha - \hat{L}_k] M_k(t) \end{aligned}$$

が成立する。ここで演算子 $\hat{L}_k$ は

$$\hat{L}_k = -D \sum_{i=1}^k \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - s \sum_{i \neq j}^k \delta(x_i - x_j)$$

で与えられ、これは $u(x) = -s\delta(x)$ というポテンシャルで引力相互作用する量子力学的な k 粒子系の Hamiltonian の形をしている。この固有値問題 $\hat{L}_k \Psi = \mu_k \Psi$ は Bethe ansatz:

$$\Psi \sim \exp \left(-\kappa \sum_{i < j} |x_i - x_j| \right)$$

によって解けて、基底状態のエネルギー固有値は次の式で与えられることが知られている [2]:

$$\mu_k = -\frac{1}{12} \frac{s^2}{D} (k^3 - k)$$

よって、 $\hat{L}_k$ の最小固有値を μ_k とすると、モーメント $M_k(t)$ の成長は漸近的に

$$M_k(t) \sim \exp [(k\alpha - \mu_k) t]$$

で与えられるので、

$$M_k(t) \sim \exp \left[k\alpha t + \frac{s^2}{12D} (k^3 - k) t \right]$$

となり、成長率と間欠性指数は

$$\lambda_k = k\alpha + \frac{1}{12} \frac{s^2}{D} (k^3 - k), \quad \Lambda_k = \frac{1}{12} \frac{s^2}{D} (k^3 - k)$$

と求まる。間欠性指数 Λ_k の表式が k^2 ではなく k^3 の項を含んでいることから分かるように、 $z(x, t)$ の分布の発展は拡散がない $D = 0$ の場合よりも、高次モーメントの成長率が $k\alpha$ からより大きくずれるという意味で、さらに間欠的である。

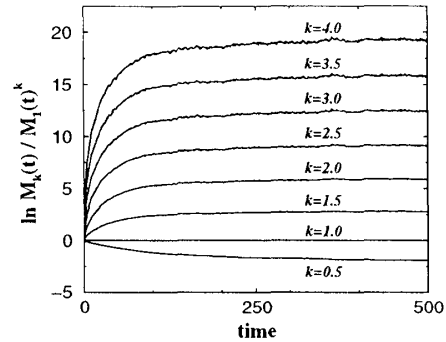


Figure 5: モーメント M_k の時間発展. システムサイズ $N = 20,000$.

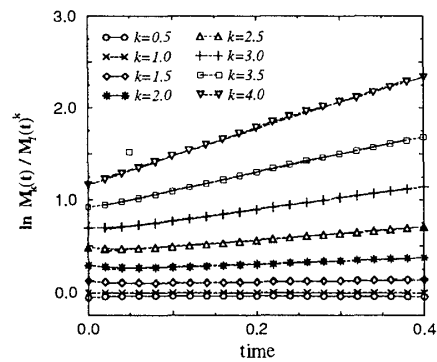


Figure 6: モーメント M_k の時間発展. システムサイズ $N = 10^7$.

6 数値計算 - 有限サイズ効果

以上の間欠性指数に関する結果をまとめると、 $D = 0$ の時、 $\Lambda_k = s(k^2 - k)$ 、 $D > 0$ の時、

$\Lambda_k = s^2(k^3 - k)/12D$ である。これを数値計算で確かめてみよう。変数変換で常に平均成長率 α は 0 にとることができるので、以下 $\alpha = 0$ とする。Fig. 5, 6 に、 $\alpha = 0.0$, $s = 1.0$, $D = 3.0$ の時の $M_k(t)$ の発展を示す。

前章の結果によると、 $\alpha = 0$ でも $k \neq 1$ 次のモーメント $M_k(t)$ は、 $s^2(k^3 - k)/12D$ の項のため、やはり指数的な成長を続けるはずである。しかし、Fig. 5 から明らかなように、SAPD 方程式が非線形項を持たないにもかかわらず、本来は指数的に成長するはずのモーメントが、あっというまに飽和してしまっている。これは、以下で議論するように、非常に強い有限サイズ効果のためである。

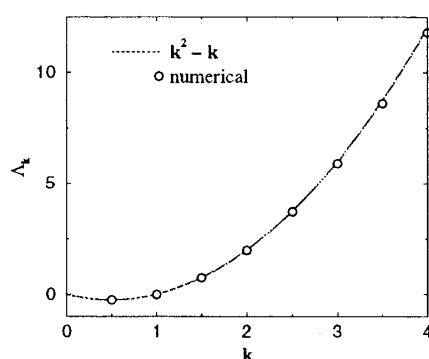


Figure 7: 間欠性指数の数値計算. $D = 0.0$.

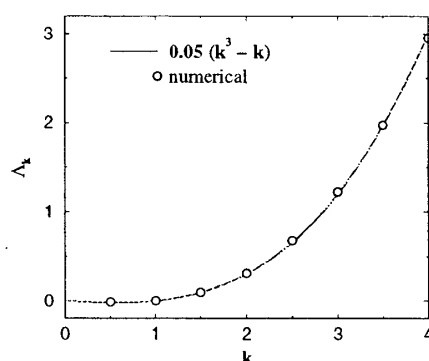


Figure 8: 間欠性指数の数値計算. $D = 3.0$.

指数的成長を確認したければ、Fig. 6 のように非常に大きな系 (Fig. 5 の 200 倍) を準備して、初期条件からスタートした直後のわずかな期間を見る必要がある。Fig. 7, 8 にそのようにして得られた間欠性指数の数値計算結果を $D = 0.0$ と $D = 3.0$ の場合について示す。非常に大きな系で、ごく初期のデータを使えば、

指数は理論と一致することがわかる⁴。これは、有限系における数値計算に限らず、現実の実験系でも (非線形効果が効かないような理想的な実験ができれば) 同様な有限サイズ効果が見られるはずである。では、この強烈な有限サイズ効果の効き始める時間やその後の時間発展はどのように理解できるだろうか。

7 稀なイベントの統計性

Fig. 1 から分かるように、SAPD の生成する場は空間的に非常に間欠的であり、モーメントは個々のバースト的な場の揺らぎ (以下、「イベント」) によって決められている。そこで、以下では大偏差 (あるいはマルチフラクタル/熱力学/Laplace) 形式の議論を用いて、 $M_k(t)$ を個々のイベント $\exp(qt)$ に分解する。

場のある点に注目し、そこに成長率 q で $\exp(qt)$ のように成長する場の揺らぎがあったとしよう。この揺らぎからの $M_k(t)$ への寄与はその k 乗の $\exp(kqt)$ である。よって、成長率 q のイベントの起こる統計的重率を $p(q, t)$ とすると、モーメント $M_k(t)$ は、

$$M_k(t) = \int_0^\infty \exp(kqt) p(q, t) dq$$

と表されるだろう。大偏差形式の議論では、統計的重率 $p(q, t)$ が t の大きい所で

$$p(q, t) = C(q, t) \exp[-tf(q)]$$

のように振舞うと仮定される (イベントは「指数関数的に稀」)。ここで $C(q, t)$ は適当な係数で、 $f(q)$ はレート関数 ("rate function") と呼ばれる⁵。 $f(q)$ は成長率の有限時間 t での揺らぎ q が真の期待値に一致する所で極小値 0 をとるような凸関数である [7, 8, 17]。

$D = 0$ なら時刻 t での q は単にノイズ $\zeta(t)$ の有限時間 t での平均 $q(t) = \int_0^t \zeta(s) ds / t$ なので独立な Gauss 乱数の和となり、上式が成り立つことを実際に示せ、 $f(q)$ も簡単に求める

⁴ 実は定性的にしか一致しない。 $k^3 - k$ の形ではあるが、係数の 0.05 は理論の $s^2/12D$ とは微妙に異なる。これは、本来はフラクタル的な場を示す系を離散化して数値計算しているためだと思われるが、詳しくはよく分かっていないので議論しない。KPZ 方程式の数値計算についても、スケーリング指数は合うが係数は合わないことが知られている [18]。

⁵ もちろん数学ではこのようないい加減な形ではなくきちんとした形で定義される。

ことができる. この場合の $f(q)$ は, Fig.9 に示すように, 真の期待値 $q = -s$ で極小となる 2 次曲線である. Fig.10 に示すように, q の揺らぎの統計的重率 $p(q, t)$ は, 時刻 t が大きくなるほど真の値の回りに集中する. 一方, $D > 0$ の場合は大偏差形が成り立つことを示すのは難しく (もしかしたら示せるのかもしれないが), ここでは単にそのように仮定して, 得られる予想を数値チェックすることで, その妥当性を確かめることにする.

モーメントはレート関数を使うと

$$M_k(t) = \int_0^\infty C(q, t) \exp[(kq - f(q))t] dq$$

と表される. この積分は t が十分大きな所では指数の肩 $kq - f(q)$ を最大化する $q^*(k)$ で支配され, 漸近的に

$$M_k(t) \sim \exp(\lambda_k t), \quad \lambda_k = \max_q [kq - f(q)]$$

で与えられる. λ_k は $f(q)$ の Legendre 変換である⁶.

今の場合, λ_k の方が解析的に求められているので, 逆 Legendre 変換でレート関数を求めると, $D = 0$ の時

$$q^*(k) = (2k - 1)s, \quad f(q) = \frac{(q + s)^2}{4s}$$

$D > 0$ の時

$$q^*(k) = \frac{s^2}{12D} (3k^2 - 1), \quad f(q) = \frac{4D^{1/2}}{3s} \left(q + \frac{s^2}{12D} \right)^{3/2}$$

が得られる. モーメント $M_k(t)$ はこの成長率が $q^*(k)$ のイベントによって支配される⁷.

8 モーメントの成長の緩和時刻

モーメントの分解を用いると, 指数成長の緩和時刻を見積もる事ができる. 時刻 t に有限サイズ L の系に見つかる成長率 q のイベント $\exp(kqt)$ の個数は, 大体

$$N(q, t) = LC_0(q, t) \exp[-tf(q)]$$

⁶この議論は通常のマルチフラクタル解析における特異指数分布と一般化次元の関係と全くパラレルである.

⁷この研究会の主題であった ASEP モデルでのレート関数の計算については [4] 参照.

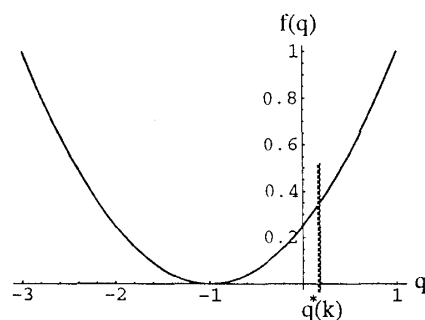


Figure 9: $D = 0$ の時のレート関数 $f(q)$. 縦線はモーメント $M_k(t)$ を支配するイベント q_k^* の位置.

で与えられるだろう (C_0 は未知の規格化定数). サイズ L の有限系においては, この $N(q, t)$ が 1 より十分大きければ成長率 q のイベントはほぼ必ず見つかり, 一方, $N(q, t)$ が 1 より十分小さければ, 事実上ほぼ見つからないであろう⁸. よって, イベント q が見つからなくなる時刻 $t(q)$ は, 条件 $N(q, t) = 1$ より, 大体

$$t(q) = \frac{\ln L'}{f(q)} \quad (L' := LC_0)$$

と見積もられる. さて, モーメント $M_k(t)$ はイベント q_k^* で支配されるので, 上の議論より, $q^*(k)$ のイベントが見つからなくなる時刻

$$t_{sat}(k) = \frac{\ln L'}{f(q_k^*)}$$

以降は, 指数的には成長しなくなるものと予想される⁹.

$f(q)$ のあらわな形を代入すると, $M_k(t)$ の緩和時刻は, $D = 0$ の時には

$$t_{sat}(k) = \frac{1}{k^2 s} \ln L'$$

となり, $D > 0$ の時には

$$t_{sat}(k) = \frac{6D}{k^3 s^2} \ln L'$$

となる. よって, モーメントの緩和時刻はシステムサイズ L' の対数でスケールされ (そのため大きな系でも非常に早く飽和する), また高次モーメントほど早く緩和する.

⁸1 という数は適当で, 典型的な値という意味である.

⁹ランダム乗法過程においてサンプルの有限性の効果が顕著に現れること自体は昔から良く知られている [23].

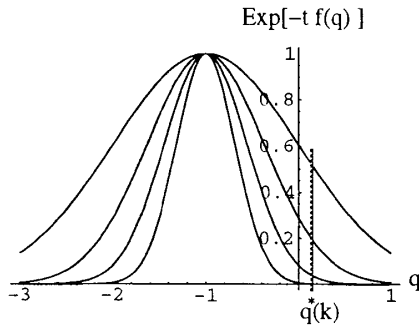


Figure 10: $p(q, t)$ の挙動. t が大きくなるほど真の期待値に集中する. 縦線はモーメント $M_k(t)$ を支配するイベント q_k^* の位置.

9 緩和後のモーメントの成長

では, 緩和後のモーメントの成長はどうなるだろうか. $t > t_{sat}(k)$ では, もはや $M_k(t)$ は最適なイベント q_k^* では決まらなくなる. しかし, ラフには時刻 t にサイズ L の系で可能な最大の $q = q^\dagger(t)$ を持つイベントで大体決まるだろうと予想できる. そのようなイベントは緩和時刻の式を逆に解いて

$$q^\dagger(t) = f^{-1} \left(\frac{\ln L'}{t} \right)$$

で与えられる. 具体的には, $D = 0$ の時

$$q^\dagger(t) = (4s \ln L')^{1/2} t^{-1/2} - s$$

$D > 0$ の時は

$$q^\dagger(t) = -\frac{s^2}{12D} + \left(\frac{3s \ln L'}{4D^{1/2}} \right)^{2/3} t^{-2/3}$$

となる. この $q^\dagger(t)$ がサイズ L の系で時刻 t に見つかる最大の成長率 q を持つイベントである. よって, 緩和後のモーメント $M_k(t)$ は, ラフには

$$M_k(t) \sim \exp \left[\left\{ k q^\dagger(t) - f(q^\dagger(t)) \right\} t \right]$$

と見積もられ, $D = 0$ の時,

$$M_k(t) \sim \exp \left[-kst + k (4s \ln L')^{1/2} t^{1/2} - \ln L' \right]$$

$D > 0$ の時,

$$M_k(t) \sim \exp \left[-\frac{ks^2 t}{12D} + k \left(\frac{3s \ln L'}{4D^{1/2}} \right)^{2/3} t^{1/3} - \ln L' \right]$$

となる. すなわち, 緩和後のモーメントは, t に線形な項と t^α に比例する項を持つ stretched exponential な成長を示すことが予想される. いずれの場合も相対モーメントは

$$\frac{M_k(t)}{M_1(t)^k} \sim \exp \left[(k-1) \ln L' \right].$$

となる. すなわち, 有限系では間欠性指数 Λ_k は 0 となって, モーメントの間欠的な成長は抑えられ, 相対モーメントは系のサイズ L の対数でスケールされることが予想される.

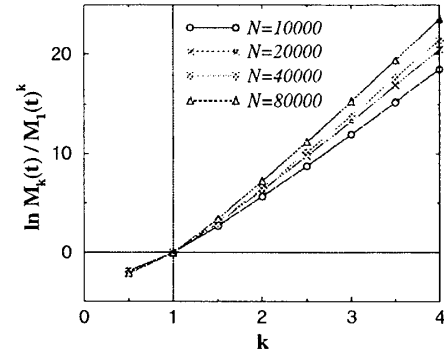


Figure 11: 緩和した相対モーメントの対数. k への依存性. この図では $L = N$.

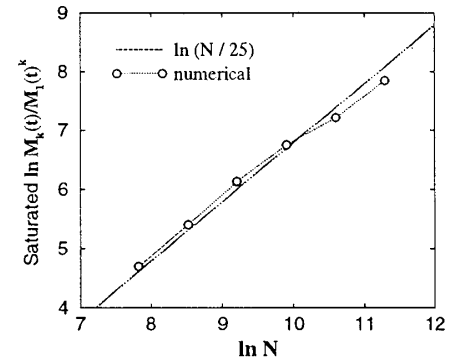


Figure 12: 緩和した相対モーメントの対数. $\ln N$ への依存性. この図では $L = N$.

10 数値チェック

まず, 上で求めた緩和した相対モーメントの見積りを数値的にチェックしよう. Fig.11,12 に示すように, 緩和した相対モーメントは k と $\ln L$ に大体比例しており, 理論と (スケーリングの意味で) 一致している. 次に, 緩和したモー

ントの stretched exponential な成長を数値的に確かめよう. 上の結果から, $D = 0$ の時

$$h_k(t) = [\ln M_k(t) + kst + \ln L']^2 / k^2$$

$D > 0$ の時

$$g_k(t) = \left[\ln M_k(t) + k \frac{s^2}{12D} t + \ln L' \right]^3 / k^3$$

という関数が, それぞれ t に線形なはずである. Fig.13, 14 に示すように, どちらもある程度の範囲で直線となり, 理論と一致している. よって, 有限サイズ効果に関する我々のラフな見積もりは, まあ妥当だったようである.

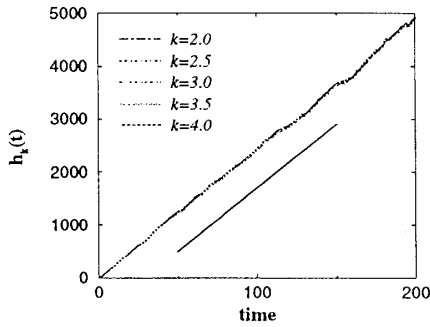


Figure 13: $\ln M_k(t) \sim t + t^{1/2}$ の確認 ($h_k(t) \propto t$). $D = 0.0$.

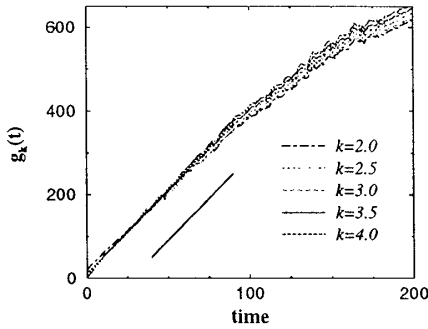


Figure 14: $\ln M_k(t) \sim t + t^{1/3}$ の確認 ($g_k(t) \propto t$). $D = 3.0$.

11 最適揺らぎの議論

Mikhailov[19, 20]によると, 確率過程の経路積分表式を用いることで, 「イベント」 $\exp(kqt)$ の発生確率を表すレート関数 $f(q)$ について, 上記のものとは少し異なる議論ができるので,

紹介する. 1 変数の確率微分方程式を考えよう (この章に限り Stratonovich 解釈する):

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x) + g(x)\zeta(t), \quad \langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = 2s\delta(t-t')$$

この確率微分方程式の解 $x(t)$ の経路の確率 $P[x(t)]$ は,

$$P[x(t)] = \int D[p(t)] \exp \{-S[p(t)]\}$$

$$S[p(t)] = \int_0^T dt \{p(t)\dot{x}(t) - H(t)\}$$

$$H(t) = sg(x(t))^2 p(t)^2 + p(t)f(x(t))$$

で与えられる. $p(t)$ は運動量に相当する補助変数である. 最も確率の高い経路 (最適揺らぎ) は, $S[p(t)]$ の最小値を与える経路なので

$$\frac{\delta S}{\delta x(t)} = -\dot{p} - \frac{\partial H}{\partial x} = 0, \quad \frac{\delta S}{\delta p(t)} = \dot{x} - \frac{\partial H}{\partial p} = 0$$

より

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x) + 2sg(x)^2 p(x)$$

$$\frac{dp(t)}{dt} = -\frac{df(x)}{dx} p(t) - 2sg(x) \frac{dg(x)}{dx} p(t)^2$$

で与えられる. ただし初期・終了条件は $x(0) = x_{start}$, $x(T) = x_{end}$ だとする. ノイズ s が小さければ, この最適経路 (最適揺らぎ) の起こる確率は, 大体

$$P \sim \exp[-S_0]$$

である. ここで S_0 は x_{start} と x_{end} を結ぶ最適経路での値である.

同様に, 場の確率偏微分方程式

$$\frac{\partial z(x, t)}{\partial t} = \zeta(x, t)z + D \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}$$

$$\langle \zeta(x, t)\zeta(x', t') \rangle = 2s\delta(t-t')\delta(x-x').$$

についても, $z(x, t)$ の経路の確率 $P[z(x, t)]$ は

$$P[z(x, t)] = \int D[\rho(x, t)] \exp [-S]$$

$$S = \int dt \left\{ \rho(x, t) \frac{\partial z}{\partial t} - H \right\}$$

$$H = \int dx \left(D\rho \frac{\partial^2 z}{\partial x^2} + s\rho^2 z^2 \right)$$

で与えられ、最も確率の高い場の発展の経路 (最適揺らぎ) は、

$$\begin{aligned}\frac{\partial z(x,t)}{\partial t} &= \frac{\partial H}{\partial \rho(x,t)} = 2s\rho z^2 + D\frac{\partial^2 z}{\partial x^2} \\ \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} &= -\frac{\partial H}{\partial z(x,t)} = -2sz\rho^2 - D\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}\end{aligned}$$

を満たす。また、その生起確率は同様に

$$P \sim \exp[-S_0]$$

で与えられる。これらの方程式は、非線形 Schrödinger 方程式

$$i\dot{\psi} = -2\psi^2\psi^* - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

において

$$t \rightarrow -it, \quad \psi \rightarrow z, \quad \psi^* \rightarrow s\rho$$

として得られるものになっている。よって、非線形 Schrödinger 方程式の静止したソリトン解 [5] を利用すると、成長率 q の場の最適揺らぎとして、

$$z_q(x,t) = \frac{q^{1/2} \exp(qt)}{\cosh \left[(q/D)^{1/2} (x - x_0) \right]}$$

が得られる (Fig.15) [19, 20]. これから生起確率を計算すると、

$$p(q,T) = C(q,T) \exp \left(-\frac{4q^{3/2} D^{1/2} T}{3s} \right)$$

となるので、レート関数 $f(q)$ は

$$f(q) = \frac{4D^{1/2}}{3s} q^{3/2}$$

となる。面白い事に、このレート関数 $f(q)$ は、先ほど逆 Legendre 変換で求めた $f(q)$ と q が大きい所で一致している。すなわち、我々がマルチフラクタル形式によって導入し、漠然と「イベント」と呼んでいたものは、実は q が大きい所での場の最適揺らぎと一致している。

12 拡散結合時空カオスの Lyapunov ベクトル

以上の結果は、拡散結合時空カオスの Lyapunov 指数に関連性を持つので、それを簡単に述べる。

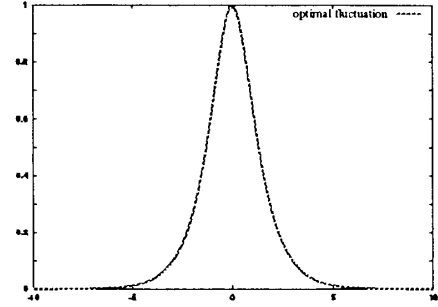


Figure 15: 最適揺らぎの形状

12.1 Lyapunov 指数・ベクトル

ベクトル変数 X の従う力学系

$$\frac{dX(t)}{dt} = F(X(t))$$

に与えた摂動 (Lyapunov ベクトル) $y(t)$ の従う方程式は

$$\frac{dy(t)}{dt} = DF(X(t)) \cdot y(t) + O(y^2)$$

であり、系の (最大) Lyapunov 指数はこの摂動の指数的な成長率で定義される:

$$|y(t)| \sim |y(0)| \exp(\lambda t), \quad \lambda = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{|y(t)|}{|y(0)|}$$

ここで $|\dots|$ はベクトルの適当なノルムで、

$$|X|_k = \left(\sum_i |X_i|^k \right)^{1/k}$$

である (通常 $k=2$). λ はある値に収束するが ($\lambda > 0$ なら系はカオス), $y(t)$ は変化し続ける。十分時間が経つと、 $y(t)$ は系に与えた摂動のうち、最もよく延びる方向の成分しか持たなくなる。さて、Lyapunov 指数はノルムを定義する k によらず同じ値を取るのだろうか。有限系では当然そう期待されるが、無限系である時空カオスではどうなるのだろうか。

12.2 拡散結合写像格子 (CML)

時空カオスの例として、金子によって導入された拡散結合写像格子 (Coupled Map Lattices, CML) [13, 3] を考えよう:

$$x_i^{t+1} = f \left[x_i^t + \frac{\epsilon}{2} \left\{ x_{i-1}^t - 2x_i^t + x_{i+1}^t \right\} \right]$$

ここで $f(x)$ は適当なカオス写像, x_i^t は格子点 i にある写像の時刻 t での変数, ϵ は拡散定数である. これは $X^{t+1} = F(X^t)$ という形の離散力学系である. この系の Lyapunov ベクトル z の従う式は,

$$z_i^{t+1} = f'[\dots] \left(z_{i-1}^t + \frac{\epsilon}{2} \{ z_{i-1}^t - 2z_i^t + z_{i+1}^t \} \right)$$

で与えられる. 写像の微分 $f'[\dots]$ はカオティックに変動するので, 白色 Gauss ノイズで近似して平均と揺らぎに分解し, さらにいくつかラフな仮定をして時間空間を連続化して z の発展方程式を書き換えると SAPD 方程式が得られる [22]. Fig. 16 に実際に数値計算した拡散結合写像格子の Lyapunov ベクトルの例を示す. Fig. 1 と非常に良く似ていることが分かる.

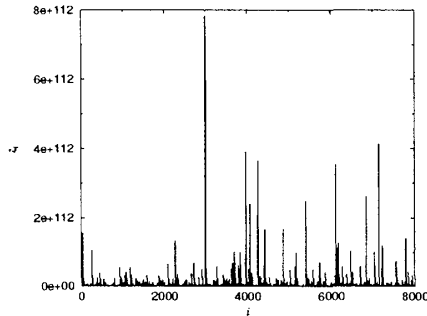


Figure 16: 拡散結合写像格子の Lyapunov ベクトル

実はこの類似性は, 対数をとった KPZ 方程式のレベルでは, より正確に確かめられている. 上で得た SAPD 方程式の対数を取ると, CML の Lyapunov ベクトルの発展方程式は, KPZ 方程式に変形される. 無論, それだけでは単なる近似的な式変形だが, スケーリング指数などの数値計算によって, 拡散結合 CML の Lyapunov ベクトルの対数をとった場が実際に KPZ の普遍クラスに入ることが, Pikovsky らによって示されている [22]. この性質は, 複素 Ginzburg-Landau 方程式や蔵本-Sivashinsky 方程式など, 他のいくつかの拡散結合時空カオス系においても同様に成立する事も確かめられている.

なお, 上記の Lyapunov ベクトルに関するものとはほぼ同等の議論が, ふたつの拡散結合時空カオスの結合系を考えた時の系の間の「ずれベクトル」 $z_i^t = x_i^t - y_i^t$ についてもほぼ同じ議論が成立する [22, 11]. これは, 例えば時空カオスの引き込みを使った暗号通信 [10] の安定性の議論に役立つかも知れない.

12.3 CML の Lyapunov 指数

CML の Lyapunov ベクトルを SAPD に従う場 $z(x, t)$ としてモデル化したときの Lyapunov 指数は

$$\lambda_k = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{\langle |z(x, t)|_k \rangle}{\langle |z(x, 0)|_k \rangle}$$

$$|z(x, t)|_k = \left(\int dx |z(x, t)|^k \right)^{1/k}$$

で与えられ ($\langle \dots \rangle$ はノイズによる平均), SAPD の間欠的な成長に関する結果より, 無限系では当然 λ_k は k に依存する. すなわち, 無限系では Lyapunov 指数 λ_k はノルムを定義する k に依存する. 一方, 有限系では非常に強い有限サイズ効果によって, モーメントの成長はあつと言う間に間欠的な成長から非間欠的な成長に変化する. よって, 無事 Lyapunov 指数のノルムへの非依存性が回復するはずである.

さて, CML の Lyapunov ベクトルの対数をとったものが KPZ 普遍クラスに属する事は既に表示されているが, 対数をとる前の元のベクトルは, SAPD と同じスケーリング指数を示すだろうか. 拡散結合 CML の Lyapunov ベクトルに関する予備的な数値計算によると, $k = 4$ 程度までの間欠性指数は SAPD とよく一致したが, それより k 大きな所では外れた. 緩和後のベクトルのモーメントの stretched exponential 的な成長についても, $t^{1/3}$ に従うようにも見えるが, まだ noisy で確かな事は言えない. より詳しい数値計算が必要である.

13 まとめ

確率的な自己触媒反応拡散系のモーメントの成長則を調べた. 無限系においては間欠的な指数的成長を続けるはずが, 有限系においては非常に早い時間に飽和して, 非間欠的な成長に移り変わる. このことを理解するために, 間欠性指数に関する厳密な結果を利用して, モーメントの成長に対する有限サイズ効果を評価した. その結果, モーメントは稀な場の揺らぎのイベントで決まるが, 有限系ではそのような稀なイベントがすぐに観測されなくなり, モーメントの成長は saturate することと, 緩和後のモーメントの成長が stretched exponential 型となることが分かった. また, 稀なイベントのレート関数は, 経路積分を用いた最適揺らぎでの見積りと q が大きい所で一致した. 応用例とし

て、拡散結合 CML の時空カオスの Lyapunov ベクトルについて議論した。

14 謝辞

この興味深い研究会を組織して下さった世話人の皆様と、色々とコメントを頂いた参加者の皆様に感謝します。

References

- [1] A.-L.Barabasi and H.E.Stanley, *Fractal concepts in surface growth*, Cambridge, 1995.
- [2] F. A. Berezin, G. P. Pokhil, and V. M. Finkelberg, *Vestn. Moscow State Univ.* **1**, 21 (1964).
- [3] T. Bohr, M. H. Jensen, G. Paladin, and A. Vulpiani, *Dynamical Systems Approach to Turbulence*, Cambridge, 1998.
- [4] B. Derrida and C. Appert, *J. Stat. Phys.* **94** (1999) 1.
- [5] L. D. Faddeev, in *Solitons*, eds. R. K. Bullough and P. J. Caudrey, Springer, 1980.
- [6] D. Forster, D. Nelson, and M. Stephen, *Phys. Rev. A* **16** 732 (1977).
- [7] U. Frisch, *Turbulence, the legacy of A. N. Kolmogorov*, Cambridge, 1995.
- [8] 藤坂博一, 「非平衡系の統計力学」, 産業図書, 1997.
- [9] C. W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods*, Springer, 1997.
- [10] J. Garcia-Ojalvo and R. Roy, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5204 (2001).
- [11] P. Grassberger, *Phys. Rev. E* **59**, R2520 (1999).
- [12] T.Halpin-Healy and Y-C.Zhang, *Phys. Rep.* **254** (1995).
- [13] 金子邦彦, 津田一郎, 「複雑系のカオス的シナリオ」, 朝倉書店, 1996.
- [14] M. Kardar, G. Parisi, and Y.C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 889 (1986).
- [15] M. Kardar, *Nucl. Phys.* **B290** [FS20] (1987) 582.
- [16] J. Krug and H. Spohn, "Kinetic roughening of growing surfaces" in *Solids Far from Equilibrium* ed. C. Godreche, Cambridge, 1991.
- [17] 熊谷隆, 「確率論」, 共立出版, 2003.
- [18] C-H. Lam and F. G. Shin, *Phys. Rev. E* **57**, 6506 (1998).
- [19] A. S. Mikhailov and A. Yu. Loskutov, *Foundations of Synergetics II. Chaos and Noise* (Springer, Berlin, 2nd revised and enlarged edition, 1996).
- [20] A. S. Mikhailov, *Phys. Rep.* **184**, 307 (1989).
- [21] H. Nakao and A. S. Mikhailov, *Chaos* **13** (2003) 953.
- [22] A. Pikovsky and J. Kurths, *Phys. Rev. E* **49**, 898 (1994) ; A. Pikovsky and A. Politi, *Nonlinearity* **11**, 1049 (1998) ; V. Ahlers and A. Pikovsky, *Phys. Rev. Lett.* **88** 254101-1 (2002).
- [23] S. Redner, *Am. J. Phys.* **58** (1990) 267.
- [24] Y. Tu, G. Grinstein, and M. A. Muñoz, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 274 (1997) ; M. A. Muñoz and T. Hwa, *Europhys. Lett.* **41** 147 (1998).