

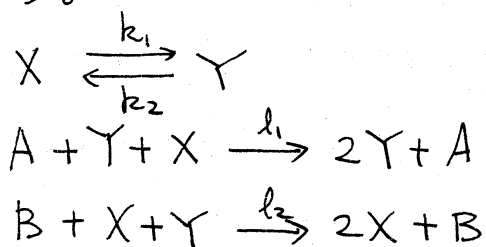
Arnold 模型におけるゆらぎと緩和

東大 理 笹川 文義

§1 序論

非平衡系を議論する際には種々の形式が考えられる。平衡近傍に議論を限るならば久保の線型応答理論で形式的には話はすんでしまう。しかし平衡から遠く離れた状態を扱う場合には各種の形式があり、場合に応じて使いわけの必要があるように見える。第一原理から出発して非平衡系を扱うという立場はそれ自身意味のあることである。しかしスバーレフなどが議論している非平衡統計演算子¹⁾から非平衡系の特徴を引き出すのは困難のように思われる。これに反して現象論的方程式は第一原理から出発するという立場からは、かなり怪しい基礎に立ってはいるが、非平衡系の特徴を引き出すには充分に役立つと思われる。この種のアプローチの方法は化学反応系に対して実行され成功を収めている。たとえばブリュッセルーター(3分子反応モデル)に対して決定論的方程式を

立て熱力学的分岐が不安定化したときに生じる散逸構造についてブリュッセル学派は詳しい解析を行なった³⁾。また化学反応系等に対してゆらぎの影響を取り入れる方法はたとえば birth and death process としてこれをとらえマスター方程式をたてる方法が考えられる。この方程式は一般に複雑な多変数の非線形方程式となる。もしこのような複雑な方程式の一般解をかりに得たとしても何が非平衡系の特徴であるのかを確かむのはむずかしいだろう。非平衡系のある特徴をデフォルメし、その部分に焦点を合わせて研究するののも一つの有効な研究方法であると思われる。最近ゆらぎによって引き起こされる非平衡相転移(定常分布の profile の定性的な変化として定義する。)と Critical Slowing Down の関係が一変数 Langevin equation について詳しく議論されている⁴⁾。この様な視点から非平衡系を見た場合、純粋にゆらぎによって非平衡相転移が引き起こされるような模型を考えてみることは意義があると思われる。ここではこの視点から非平衡系を捉えようと思う。そこで Arnold 等²⁾にしたがって次の様な化学反応系を考えよう。



ここで A と B は触媒である。 X と Y に着目して kinetic equation を立てると,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{X}{N} \right) = k_2 \left(\frac{Y}{N} \right) - k_1 \left(\frac{X}{N} \right) + \left(\frac{X}{N} \right) \left(\frac{Y}{N} \right) \left(l_2 \frac{B}{N} - l_1 \frac{A}{N} \right) \dots \textcircled{1}$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{Y}{N} \right) = k_1 \left(\frac{X}{N} \right) - k_2 \left(\frac{Y}{N} \right) + \left(\frac{X}{N} \right) \left(\frac{Y}{N} \right) \left(l_1 \frac{A}{N} - l_2 \frac{B}{N} \right) \dots \textcircled{2}$$

となる。上の式から明らかに $X + Y = N$ であるから①式から Y を消去して, fraction $x = X/N$ に対する方程式,

$$\dot{x} = \alpha - x + \tilde{\beta} x(1-x) \dots \textcircled{3}$$

を得る。ここで $\alpha = k_2/(k_1 + k_2)$, $\tilde{\beta} = (l_2 B - l_1 A) / \{A(k_1 + k_2)\}$ である。今 $k_1 = k_2 = 1/2$ の場合を考えるとさらに③式は簡単になって,

$$\dot{x} = \frac{1}{2} - x + \tilde{\beta} x(1-x) \dots \textcircled{4}$$

を得る。ここでパラメータ $\tilde{\beta}$ が平均値 β のまわりで, ゆらいでいるとする。つまり

$$\tilde{\beta} = \beta + \eta(t), \quad \langle \eta(t) \eta(t') \rangle = 2\varepsilon \delta(t-t') \dots \textcircled{5}$$

と仮定する。ここで $\eta(t)$ はガウシアンホワイトノイズである。すると確率微分方程式

$$dx(t)/dt = \frac{1}{2} - x(t) + x(t)(1-x(t))(\beta + \eta(t)) \dots \textcircled{6}$$

を得る。これを以後, 簡便に Arnold 模型と呼ぶことにする。現象論的方程式③は集団遺伝学にも登場する⁵⁾。その時, 変数 $x(t)$ は集団のある遺伝子の頻度構成を表わす。

さて⑥式の対称性を考えてみよう。この式は $x(t) = 1/2$ を原点

としたときに反転対称性を持っている。もしもこの対称性が破れたとしたら平衡系での相転移との類似から、 x の現象を非平衡相転移と呼んでもよさそうである。この現象が実際にArnold模型で起こるかどうかを調べるために⑥式に対応するFokker-Planck方程式を書き x の定常状態の性質を調べてみる。²⁾ ここで⑥式をストラトノヴィチ型の確率微分方程式と考えることにする。

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} [\alpha(x) + \varepsilon \beta(x) \beta'(x)] P(x, t) + \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial x^2} \beta^2(x) P$$

$$(\alpha(x) \equiv \frac{1}{2} - x + \beta x(1-x), \beta(x) = x(1-x)) \quad \dots (7)$$

⑦式の定常分布 $P_{st}(x)$ は

$$P_{st}(x) = N_0 x^{-1} (1-x)^{-1} \exp \left\{ -\frac{1}{2\varepsilon x(1-x)} - \frac{\beta}{\varepsilon} \log \left(\frac{1-x}{x} \right) \right\} \quad \dots (8)$$

となる。 $\beta = 0$ の場合 $P_{st}(x)$ のピークの位置 x_m は

$$x_m = \begin{cases} 1/2 & \text{for } \varepsilon < 2 \\ 1/2 \pm \sqrt{\varepsilon - 2} / 2\sqrt{\varepsilon} & \text{for } \varepsilon > 2 \end{cases} \quad \dots (9)$$

となる。すなわち定常状態のorder parameter $m(\varepsilon)$ として $m(\varepsilon) = x_m - 1/2$ を定義すると $\varepsilon = 2$ で非平衡相転移が生じることになる。つまり元の方程式⑥が持っていた $x(t) = 1/2$ のまわりでの反転対称性が定常状態において、ゆらぎの強さ ε が2を越えたところでは破れていることがわかる。もちろんこの対称性の破れは実験の観測値は分布関数のピークの位置に対応しているということを暗黙に仮定していることであるが。

さてこの非平衡相転移が何によって引き起こされているかを調べてみよう。 $\beta = 0$ の場合には⑥式のdrift項は線形なので拡散項が存在しない時は定常値は常に $1/2$ となり何の変化もない。ところが非線形拡散項を付け加えると、前に議論したことから非平衡相転移が起こることがわかる。つまりArnold模型の非平衡相転移は純粋にゆらぎによって引き起こされている。さてArnold模型の特徴とその定常状態の様相を詳しく述べたので次はその動的性質を調べることにする。Arnold模型は残念なことに解析的にexact solutionを書き下すことができない。そのため近似的手法に頼らざるを得ない。ここでは2種類の近似(摂動展開, 不安定点近傍のスケーリング理論)を使ってその動的性質, 特にCritical Slowing Downが生じるかどうかを見ることにする。

§2 Arnold 模型の動的性質

(A) 摂動展開による解析

摂動展開の方法は種々開発されているがここではモーメントに対する摂動展開を考えてみる⁶⁾。n次のモーメントを $a_n(t)$ と書くことにする。

$$a_n(t) = \int_0^1 x^n P(x, t) dx \quad \dots \textcircled{10}$$

すると直接の微分によって次のモーメントに対する階級方程式を得る。

$$\frac{d}{dt} a_n(t) = \frac{n}{2} a_{n-1}(t) + n(n\varepsilon - 1) a_n(t) - n(2n+1)\varepsilon a_{n+1}(t) + n(n+1)\varepsilon a_{n+2}(t) \quad \dots (11)$$

ただし $\beta = 0$ とした。さてここで n 次のモーメントから deterministic part $\alpha^n(t)$ を引き差した量 $f_n(t)$ を考えることにする。

$$f_n(t) \equiv a_n(t) - \alpha^n(t) \quad \dots (12)$$

ただし $\alpha(t)$ は微分方程式 $\dot{\alpha}(t) = \frac{1}{2} - \alpha(t)$ の解である。量 $f_n(t)$ に対する方程式に (11) を書き変えると

$$\begin{aligned} \dot{f}_n(t) = & \frac{n}{2} f_{n-1}(t) + n(n\varepsilon - 1) f_n(t) - n(2n+1)\varepsilon f_{n+1}(t) \\ & + n(n+1)\varepsilon f_{n+2}(t) + n^2\varepsilon \alpha^n(t) - n(2n+1)\varepsilon \alpha^{n+1}(t) \\ & + n(n+1)\varepsilon \alpha^{n+2}(t) \quad \dots (13) \end{aligned}$$

となる。(13) 式を積分方程式に直すと計算がやりやすくなる。

$$\begin{aligned} f_n(t) = & \int_0^t ds e^{\delta(n)(t-s)} \left[\frac{n}{2} f_{n-1}(s) - n(2n+1)\varepsilon f_{n+1}(s) \right. \\ & \left. + n(n+1)\varepsilon f_{n+2}(s) + F_n(\alpha(s)) \right] \quad \dots (14) \end{aligned}$$

ここで

$$F_n(\alpha(s)) = n\varepsilon \alpha^n(s) ((n+1)\alpha(s) - n)(\alpha(s) - 1) \quad \dots (15)$$

$$\delta(n) = n(\varepsilon n - 1) \quad \dots (16)$$

なる記号を導入した。積分方程式 (14) を iteration で解くことにする。 k 番目の iteration による解を $f_n^{(k)}(t)$ と書くことにすると、漸化式が (14) 式から

$$f_n^{(k+1)}(t) = \int_0^t ds e^{\delta(n)(t-s)} \left[\frac{n}{2} f_{n-1}^{(k)}(s) - n(2n+1)\varepsilon f_{n+1}^{(k)}(s) + n(n+1)\varepsilon f_{n+2}^{(k)}(s) + F_n(\chi(s)) \right] \dots (17)$$

となることがわかる。今初期分布 P_{ini} を

$$P_{ini} = \delta(\chi - \chi(0)) \dots (18)$$

と仮定する。すると $f_n^{(0)} = 0$ に注意して漸化式(17)を使うと、解が逐次、次のように求まることになる。

$$f_n^{(1)}(t) = \int_0^t ds e^{\delta(n)(t-s)} F_n(\chi(s)) \dots (19)$$

$$\begin{aligned} f_n^{(2)}(t) = & f_n^{(1)}(t) + \frac{n}{2(\delta(n-1) - \delta(n))} \int_0^t ds F_{n-1}(\chi(s)) \\ & \times (e^{\delta(n-1)(t-s)} - e^{\delta(n)(t-s)}) - \frac{n(2n+1)\varepsilon}{(\delta(n+1) - \delta(n))} \times \\ & \int_0^t ds F_{n+1}(\chi(s)) (e^{\delta(n+1)(t-s)} - e^{\delta(n)(t-s)}) \\ & + \frac{n(n+1)\varepsilon}{(\delta(n+2) - \delta(n))} \int_0^t ds F_{n+2}(\chi(s)) (e^{\delta(n+2)(t-s)} - e^{\delta(n)(t-s)}) \dots (20) \end{aligned}$$

(20)式を使い $f_1^{(2)}(t)$ を計算し、 εt を固定し、 $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限を取ると、

$$f_1^{(2)}(t) \simeq \frac{3}{4} (\varepsilon t)^2 (\chi(0) - \frac{1}{2}) e^{-t} \dots (21)$$

を得る。これから一次のモーメント $\alpha_1(t)$ の振る舞いは

$$\alpha_1(t) \simeq \frac{1}{2} + (\chi(0) - \frac{1}{2}) (1 + \frac{3}{4} (\varepsilon t)^2) e^{-t} \dots (22)$$

となることがわかる。(22)式を見ると (εt) の一次の項がなく二次の項がこの近似からでてくることわかる。この二次

の項を指数関数の肩にのせるわけにはいかない。よって、すくなくともゆらぎの強さが小さなところでは Critical Slowing Down はなりと結論できる。

(B) 不安定点近傍のスケーリング理論による解析

鈴木によって発展させられた不安定点近傍のスケーリング理論をこの模型に適用する際の困難は複雑な散逸項である。

この項が非平衡相転移を起こす原因となるので、これをうまく扱う必要がある。そのため変数 $z(t)$ を

$$z(t) = x(t) / (1 - x(t)) \quad \dots (23)$$

に変換する。すると⑥式は $\beta = 0$ の場合、

$$\dot{z}(t) = \frac{1}{2}(1 - z^2(t)) + z(t)\eta(t) \quad \dots (24)$$

と変換されて比較的扱いやすい形になる。スケーリング理論⁷⁾のアルゴリズムに従って非線形変換

$$z(t) = F^{-1}(e^{\lambda t} F(\xi)) \quad (\lambda > 0) \quad \dots (25)$$

$$(F(z) = \exp \int_{z_0}^z \frac{2\lambda}{1-y^2} dy)$$

を②④式にほどこすと、

$$\frac{d}{dt} \xi(t) = \eta(t) \frac{e^{-\lambda t} F^{-1}(e^{\lambda t} F(\xi(t))) F'(F^{-1}(e^{\lambda t} F(\xi(t))))}{F'(\xi(t))} \quad \dots (26)$$

を得る。②⑥式でいわゆるスケーリング極限をとると、②⑥式は

$$\frac{d}{dt} \xi_{sc}(t) = \eta(t) \xi_{sc}(t)$$

と近似される。よって (24) 式のスケーリング解 $Z_{sc}(t)$ は

$$Z_{sc}(t) = (\tanh t/2 + \xi_{sc}(t)) / (1 + \xi_{sc}(t) \tanh t/2) \quad \dots (27)$$

となる。これを使えば元の変数 $\chi(t)$ のスケーリング解 $\chi_{sc}(t)$ が $Z_{sc}(t)$ を使うことによって

$$\chi_{sc}(t) = Z_{sc}(t) / (1 + Z_{sc}(t)) \quad \dots (28)$$

と表現されることがわかる。物理量 $Q(\chi)$ の期待値

$\langle Q(\chi_{sc}(t)) \rangle$ は Wick の定理を使うとただちに次の積分形に書ける。

$$\langle Q(\chi_{sc}(t)) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} Q\left(\frac{G(\xi, t)}{1 + G(\xi, t)}\right) \quad \dots (29)$$

ただしここで

$$G(\xi, t) = \frac{\tanh \frac{t}{2} + Z(0) e^{\sqrt{2\epsilon} t} \xi}{1 + Z(0) e^{\sqrt{2\epsilon} t} \xi \tanh \frac{t}{2}} \quad \dots (30)$$

$$Z(0) = \chi(0) / (1 - \chi(0)) \quad \dots (31)$$

なる量を定義した。特に我々は期待値 $\langle \chi_{sc}(t) \rangle$ の非線形緩和

時間 τ ,
$$\tau = \int_0^{\infty} dt \frac{\langle \chi_{sc}(t) \rangle - \langle \chi_{sc}(\infty) \rangle}{\langle \chi_{sc}(0) \rangle - \langle \chi_{sc}(\infty) \rangle} \quad \dots (32)$$

に興味がある。この量は公式 (29) を使うとただちに評価できる。

すなわち τ は次の不等式を満たす。

$$\begin{aligned} T = & (\langle x_{sc}(0) \rangle - \langle x_{sc}(\infty) \rangle)^{-1} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} \int_0^{\infty} dt \frac{(1 - \tanh t/2)}{2(1 + \tanh t/2)} \\ & \times \left(\frac{z(0) e^{\sqrt{2\varepsilon t} \xi} - 1}{z(0) e^{\sqrt{2\varepsilon t} \xi} + 1} \right) \leq (\text{const.}) \int_0^{\infty} dt \left| \frac{1 - \tanh t/2}{1 + \tanh t/2} \right| < \infty \quad \text{for } \varepsilon \neq 0 \\ & \dots (33) \end{aligned}$$

すなわち有限でかつゼロと異なる ε に対して非線形緩和時間 T は有限で発散しない。すなわちすくなくともこの近似では Critical Slowing Down は存在しない。摂動展開とスケーリング理論によって得られた近似解とともに Critical Slowing Downを示さない。すなわちすくなくともゆらぎの強さ ε が小さい所では Arnold 模型では Critical Slowing Down は生じないことになる。この結論が果して正しいかどうかは実験によって確認するしかない。幸いにも花島等⁷⁾が電気回路によってシミュレーションを行なっている。それによると、たしかに非平衡相転移が生じてはいるが Critical Slowing Downはないことが報告されている。これは我々の解析結果と矛盾しているない。

参考文献

- 1) D.H. Zubarev, Non-equilibrium Statistical Thermodynamics, Consultant Bureau, 1974.
- 2) L. Arnold, W. Horsthemke and R. Lefever, Z. Phys. B29 (1978) 367.
- 3) G. Nicolis and I. Prigogine, Self Organization in Non-equilibrium Systems (Wiley-interscience, N.Y. 1977)
- 4) M. Suzuki, K. Kaneko and F. Sasagawa, Prog. Theor. Phys. 65 (1981) No. 3
- 5) 福島正俊, 石井一成, 自然現象と確率過程 (日本評論社)
- 6) Y. Hamada, Prog. Theor. Phys. 64 (1980) 1127.
- 7) M. Suzuki, J. Stat. Phys. 16 (1977) 11.
- 7) S. Kabashima et. al. to be published.