

非平衡ゆらぎの普遍性

Keyword: KPZ 方程式

1. 非平衡系に対する統計力学

非平衡系は、平衡系には見られない多彩な現象を示し、以前から数多くの研究がなされてきた。伝統的には、乱流や化学反応、生物といった系で見られる特徴的な構造が大きな興味を惹いてきたが、近年、微細構造の加工・測定技術が進展したことにより、非平衡系のゆらぎなど、より精緻な性質に対する関心が高まっている。

非平衡系をミクロな立場から理解しようとする、非平衡系に対する統計力学は、ボルツマンが平衡状態がどのように実現されるかを考えるところからはじまったともいえ、既に一世紀以上の歴史があるが、原理的なことはわかっていないことが多い。

一つの例として、非線形なバネでつながれた振動子系という比較的単純な系を考えてみよう。ハミルトニアンは

$$H = \sum_{j=1}^N \frac{p_j^2}{2} + \sum_{j=1}^{N-1} V(x_{j+1} - x_j)$$

ただし

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{\alpha}{3}x^3 + \frac{\beta}{4}x^4$$

で与えられるとする。α=β=0の線形バネの場合は、よく知られているように一般の振動状態は固有モードの線形結合で表され、各モードは調和振動をする。ここには平衡化は見られない。それでは非線形がある場合は平衡化が見られるのだろうか？というのは自然な疑問である。Fermi, Pasta, Ulam (FPU) は MANIAC (世界初のコンピュータの一つ) を用いてシミュレーションを行い、確認を試みた。結果は平衡化は見られず、むしろ再帰現象が起こっているように見えるというものであった。この問題は今でも完全には解決しておらず、時間発展を追う非平衡系の難しさを表す例となっている。

2. 界面成長と KPZ 方程式

界面の成長は、非平衡現象の例である。色々な種類の界面成長が考えられるが、例えば Eden モデルと呼ばれる、元々ががん細胞の増殖を表すモデルとして導入された単純なモデルでは、2次元格子において最初原点のみが占有されている状態からはじめ、その後は既に占有されている格子点に隣接する点が確率的に占有されてゆく。

界面の成長を記述するには、このような確率的なダイナミクスを持つモデルによる記述が有用である。さらにこのような界面成長で面白いのは、界面のゆらぎに着目すると、非自明なスケールが見られるということがある。長時

間における界面のゆらぎを見ると、 $O(t^{1/3})$ という特徴的なスケールを持つことがわかるのである。これは、平衡系の相転移・臨界現象において見られるスケールリングと類似しており、1/3 という指数は種々の界面成長で見られる。界面成長の問題は非平衡系における普遍性について考える格好の題材となっているのである。

Kardar, Parisi, Zhang の3人は、このような界面の成長を記述する比較的シンプルなモデル方程式として、次のようなものを提案した (KPZ 方程式)。時刻 t 、位置 x における界面の高さを $h = h(x, t)$ で表す場合、方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t} h = \frac{1}{2} \lambda (\nabla h)^2 + \nu \nabla^2 h + \sqrt{D} \eta. \quad (1)$$

ただしここで $\eta = \eta(x, t)$ は平均が0で、共分散が $\langle \eta(x, t) \eta(x', t') \rangle = \delta(x-x') \delta(t-t')$ と与えられるガウス白色ノイズであり、 λ, ν, D は右辺各項の強さを表すパラメータである。

KPZ の3人はこの方程式に動的くりこみ群を適用し、1/3 の指数が得られることを示した。対応する普遍クラスは現在 KPZ (普遍) クラスと呼ばれる。¹⁾

3. 1次元における厳密解

KPZ 方程式は、非線形性とノイズがある無限自由度の系であり、その取り扱いが簡単ではないが、1次元版に対しては厳密解が得られた。²⁾ 狭い角 (ウェッジ) 型初期条件の場合、界面の高さ分布に関する次のように具体的な表式が得られた。かなり複雑ではあるがここに記しておこう：

$$\mathbb{P}[\xi_t \leq s] = 1 - \int_{-\infty}^{\infty} du \exp[-e^{\gamma(s-u)}] \times (\det(1 - P_u(B_t - P_{Ai}) P_u) - \det(1 - P_u B_t P_u)).$$

ここで ξ_t はスケールされた高さ、 $\gamma_t = (t/2)^{1/3}$ である。また \det はフレドホルム行列式を表し、 $P_{Ai}(x, y) = Ai(x) Ai(y)$ 、 Ai はエアリー関数、 P_u は $[u, \infty)$ への射影、積分核 B_t は

$$B_t(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \frac{Ai(x+\lambda) Ai(y+\lambda)}{e^{\gamma\lambda} - 1}$$

で与えられる。

長時間極限を取るにより、スケールされた高さの分布を求めることができるが、それは GUE 型の Tracy-Widom (TW) 分布と一致することが見出された。これは、ガウシアンユニタリアンサンプル (Gaussian Unitary Ensemble; GUE) と呼ばれるランダム行列の、最大固有値の分布である。界面成長とランダム行列理論は一見全く関係ないのに、極限において同じ分布が現れるのは興味深いことである。

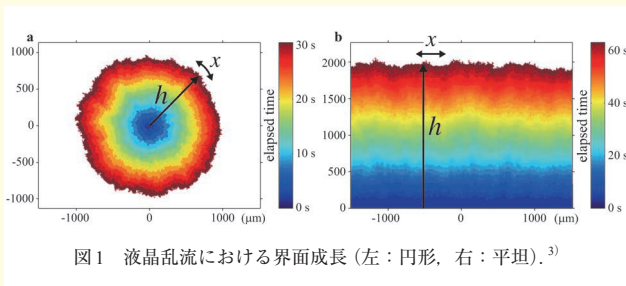


図1 液晶乱流における界面成長(左:円形, 右:平坦).³⁾

独立な要素がたくさんある場合に正規分布(ガウス分布)が現れることは普遍性のよく知られた例である。GUE TW 分布は、界面成長の問題に限らず、タイリング等種々の状況で現れる。相互作用の強い系における普遍性を表す分布の一つのモデルケースとなっている。

普遍性を考えると、GUE TW 分布は実験における界面成長においても見られると期待される。実際竹内・佐野による液晶乱流の2状態を用いた実験(図1)において、極めてよい一致が見られた。

関連する種々の結果も得られている。例えば、平坦な初期条件からスタートした界面は、GOE TW 分布という別のゆらぎを示すことが示されている。ゆらぎの指数を見ると1/3でやはりKPZクラスに属しているが、境界条件の影響により、ゆらぎの分布は変わってしまうのである。竹内・佐野実験においてもこの境界条件依存性ははっきり確かめられている。

非平衡系が示すゆらぎに関する興味は増大しているが、ほとんどの場合具体的な形まではわからない。KPZ系はゆらぎの分布まで決められた珍しい例であるといえる。

4. 非平衡統計力学における Ising 模型

平衡系の統計力学における現象や概念、手法を理解する際、まず Ising 模型の場合を考えてみるのが有益であることが多い。非平衡系の場合、興味や対象が多岐にわたるため、同様な唯一の模型というのは無いかもしれないが、KPZ 方程式やその離散版にあたる非対称単純排他過程(Asymmetric Simple Exclusion Process; ASEP)と呼ばれる確率的伝導模型は、非線形性とゆらぎの効果を持つ可解多体非平衡統計力学模型として、Ising 模型のような役割を果たしている面がある。

例えば、平衡系の熱統計力学において重要な役割を果たすエントロピーの相加性は、非平衡系においては成り立たない。非平衡系において部分系と全系の関係がどのようになっているかという問題を考える際、ASEP のような模型における具体的な計算が重要な知見を与えている。

5. 数学的側面

KPZ 方程式は、式(1)のように書いたままでは、数学的には well-defined ではないことが知られている。非平衡系を記述する方程式は、その非線形性とノイズ効果のため、数学的に意味を付けること自体困難な場合が多々あるのである。KPZ 方程式の場合、コール・ホップ変換を用いて解決する方法が少し前から知られていたが、そのような変換を用いずに方程式を定義する方法が近年ハイラーによって見出された(ハイラーは他の業績とも合わせて2014年にフィールズ賞を受賞した)。

Ising 模型が可解であることの背後には、可積分系との関係がある。KPZ 方程式に対しても、厳密解が得られたことから、背後にある数学的構造に対する興味が高まり、ボース気体、戸田格子、マクドナルド多項式等との関係が見出された。可積分系にはこれまで古典可積分系、量子可積分系というものがあったが、「確率」可積分系という新たな一分野が生まれつつあるのかもしれない。

6. さらなる発展?

KPZ 普遍性は、当初界面成長における普遍性ということで現れたのであるが、その適用範囲はこれまで考えられていた以上に広いかもしれないと思われつつある。例えば、第1節で登場したFPU系は、非線形性を持つハミルトン系の例であり、厳密な扱いはできないため、長時間における系の振る舞いを理解するのは難しいが、最近、適当な時空2点相関関数は、KPZ 普遍クラスを記述する2点相関関数そのものとなっているという予想が立てられ、シミュレーションでの確認等が行われている。

1次元KPZ方程式は非常に特殊な例にすぎないともいえるが、厳密解が見出されたり普遍性に関する理解が深まりつつある近年の成果が一つのきっかけとなり、より一般の非平衡系のゆらぎやその普遍性に関する理解が進展することが期待される。

参考文献

- 1) A.-L. Barabási and H. E. Stanley: *Fractal Concepts in Surface Growth* (Cambridge, 1995).
- 2) T. Sasamoto and H. Spohn: *Phys. Rev. Lett.* **834** (2010) 523.
- 3) K. Takeuchi, M. Sano, T. Sasamoto and H. Spohn: *Sci. Rep.* **34** (2011) 1.

笹本智弘(東京工業大学理学院 sasamoto@phys.titech.ac.jp)

(2015年12月31日原稿受付)