RIMS Kôkyûroku Bessatsu
B41 (2013), 173–179

非平衡系のダイナミクスと特殊関数 (Dynamics of nonequilibrium systems and the special functions)

By

金井政宏*

Abstract

Since 90s, mathematical methods, e.g. the transfer matrix, in exactly solvable models have been applied to many particle systems on lattice. It brings a breakthrough in investigation of nonequilibrium steady states (NESS) far from equilibrium. The NESS is obtained as the steady solution of the master equation, admitting for a stationary flow of energy and/or particles in the system. The master equation is determined by the hop rates between macroscopic states, the rates which originate from microscopic dynamics of the system. In the present work, we show a master equation which has a hypergeometric solution.

§1. 非平衡系のダイナミクス

§1.1. 平衡統計力学の原理

古典力学に従う粒子の多体系を考察する．原理的には，系の状態は全ての粒子についての運動方程式を（微小時間内で）解くことによりどこまでも追跡可能である．しかし，現実にこれを十分な精度を保って実行することは不可能であるし，たとえ成功したとしても指定された状態を実際に観測することは不可能であろう．

一方，多粒子系については温度・体積・圧力などの観測可能な物理量（すなわち熱力学的物理量）が別に存在し，これらの量によって熱力学の状態が指定される．熱力学は，熱力学的状態の変化を経験的根拠に基づいた基本法則により表現した体系で，それ故に一般に極めて正確である．そして，熱力学的状態と力学的状態を幾つかの仮定の下に結びつける体系が統計力学である．統計力学は次の二つの原理を承認して力学的状態と熱力学的状態に対応をつける．

Received December 2, 2012.
2000 Mathematics Subject Classification(s): 2000 Mathematics Subject Classification(s):
Key Words: *Key Words*: 非平衡系，マスター方程式，超幾何関数
*東京大学大学院数理科学研究科
e-mail: kanai@ms.u-tokyo.ac.jp

(i) 力学的状態の時間発展に関する物理量の長時間平均は，軌道がエネルギーの等しい全ての状態を経ると考えて（エルゴード仮説），全ての状態に関する平均（すなわち相平均）に等しい．

(ii) 等重率の原理 : エネルギー一定の条件の下でに許される力学的状態は，他に条件がなければ相平均において全て等しい重率 (weight) を持つ．

すなわち，統計力学においては，(i) の原理のために力学的状態全体の上の重率分布（あるいは規格化されて確率分布）が熱力学的状態を指定する．さらに，(ii) の原理によってエネルギー一定の下で力学的状態は等重率であるから，結局エネルギー毎に力学的状態数を数え上げることに全てが帰着される．

以上のように，統計力学においては時間発展の概念が消失し，熱力学的状態についての過程（すなわち熱力学的物理量の変化）が考察される．統計力学の完成以来，基礎となる古典力学に基づいて力学的状態の時間発展から熱力学的物理量の時間発展を記述する試みも行われているが，ここでは確率論における過程により統計力学に時間発展を導入する．

§ 1.2. 確率的ダイナミクス

ここで導入される時間発展は力学的状態間の遷移確率 (transision probability)$T(\mathcal{C} \to \mathcal{C}')$ による．すなわち，時刻 n での分布 $P_n(\omega)$ が次の時刻 $n+1$ の分布 $P_{n+1}(\omega)$ を決定する Markov 連鎖であるとし，その時間発展方程式をマスター方程式と呼ぶ．

離散時間のマスター方程式は，

$$P_{n+1}(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}'} T(\mathcal{C}' \to \mathcal{C}) P_n(\mathcal{C}'),$$

と書かれる．ここで，遷移確率は次の条件を満たしている：

$$T(\mathcal{C}' \to \mathcal{C}) \geq 0, \qquad \sum_{\mathcal{C}'} T(\mathcal{C} \to \mathcal{C}') = 1, \qquad T^{m+n} = T^m T^n.$$

このとき，

$$\sum_{\mathcal{C}} P_{n+1}(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}'} \Big(\sum_{\mathcal{C}} T(\mathcal{C}' \to \mathcal{C}) \Big) P_n(\mathcal{C}') = \sum_{\mathcal{C}'} P_n(\mathcal{C}'),$$

より $\sum_{\mathcal{C}} P_n(\mathcal{C})$ は保存する．(従って，$P_n(\mathcal{C})$ の規格化は方程式を解いた後に行えばよい．)

遷移行列 (transition probability matrix) の代わりに微小時間 Δt 当たりの遷移割合 (hop rate) を導入する．

$$T(\mathcal{C} \to \mathcal{C}') = W(\mathcal{C} \to \mathcal{C}')\Delta t \ (i \neq j), \qquad T(\mathcal{C} \to \mathcal{C}) = 1 - \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C} \to \mathcal{C}')\Delta t$$

として $\Delta t \to 0$ の極限を取れば，連続時間のマスター方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathcal{C}; t) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C}' \to \mathcal{C}) P(\mathcal{C}'; t) - \Big(\sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C} \to \mathcal{C}') \Big) P(\mathcal{C}; t)$$

が得られる.

§2. Ising 模型の Glauber ダイナミクス

Ising 模型について，外部との熱的相互作用によるスピンの反転ダイナミクスを考える．簡単のため，N サイトの周期格子を考える.

スピン配置の状態 $\sigma = \{\sigma_i\}$ $(\sigma_i = \pm 1)$ に対して系の全エネルギー

$$E(\sigma) = -J\sum_i \sigma_i\sigma_{i+1}$$

が定まる. (J は結合定数.) そして，外部との熱交換により系はカノニカル分布に従う．すなわち，状態 σ は

$$P(\sigma) = \frac{e^{-E(\sigma)/kT}}{Z} \tag{2.1}$$

の確率で実現される. (T は外部の温度，k は Boltzmann 定数.) ここで,

$$Z = \sum_\sigma e^{-E(\sigma)/kT}$$

は分配関数である.

いま，外部との接触による系の状態変化はマスター方程式に従うものとし，また，十分時間が経過すればカノニカル分布 (2.1) が実現されるものとする．状態の遷移は一つのスピンが反転することによって進むものとして，マスター方程式に現われる遷移率 $w(\sigma_i \to -\sigma_i)$ を定める．定常状態がカノニカル分布であることは詳細釣り合いが成立することと同値であったから，次の関係式を満たせばよい：

$$\frac{w(\sigma_i \to -\sigma_i)}{w(-\sigma_i \to \sigma_i)} = \frac{\exp(\frac{J}{kT}E(\sigma^{(i)}))}{\exp(-\frac{J}{kT}E(\sigma))} = \frac{\exp(-\frac{J}{kT}\sigma_i(\sigma_{i-1}+\sigma_{i+1}))}{\exp(\frac{J}{kT}\sigma_i(\sigma_{i-1}+\sigma_{i+1}))}$$

ただし，$\sigma^{(i)}$ は σ の i 番目のスピンが反転したものを表す.

$$\begin{aligned}\frac{\exp(-\frac{J}{kT}\sigma_i(\sigma_{i-1}+\sigma_{i+1}))}{\exp(\frac{J}{kT}\sigma_i(\sigma_{i-1}+\sigma_{i+1}))} &= \frac{\cosh(\frac{J}{kT}(\sigma_{i-1}+\sigma_{i+1})) - \sigma_i\sinh(\frac{J}{kT}(\sigma_{i-1}+\sigma_{i+1}))}{\cosh(\frac{J}{kT}(\sigma_{i-1}+\sigma_{i+1})) + \sigma_i\sinh(\frac{J}{kT}(\sigma_{i-1}+\sigma_{i+1}))} \\ &= \frac{1-\sigma_i\tanh(\frac{J}{kT}(\sigma_{i-1}+\sigma_{i+1}))}{1+\sigma_i\tanh(\frac{J}{kT}(\sigma_{i-1}+\sigma_{i+1}))}\end{aligned}$$

より，特に

$$w(\sigma_i \to -\sigma_i) = 1 - \sigma_i\tanh(\frac{J}{kT}(\sigma_{i-1}+\sigma_{i+1}))$$

と選ぶことにする.（この選択は一意ではなく，定常状態でカノニカル分布を実現する遷移率は他にも存在する.）

こうして Glauber ダイナミクス [1] のマスター方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}P(\sigma,t) = -\sum_i P(\sigma,t)w(\sigma_i \to -\sigma_i) + \sum_i P(\sigma^{(i)},t)w(-\sigma_i \to \sigma_i) \tag{2.2}$$

を得る．いま，時刻 t におけるスピンを $\sigma_i(t)$ と書き，同時刻の k サイト離れた二つのスピンの相関関数を

$$C_k(t) = \langle \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \sigma(t)\sigma_{i+k}(t)\rangle,$$

と定義する．（ただし，期待値 $\langle\cdots\rangle$ は全ての初期状態および時間発展について取る．）このとき，マスター方程式 (2.2) から $C_k(t)$ の満たす方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}C_k(t) = C_{k+1}(t) + C_{k-1}(t) - 2C_k(t) \qquad (k>0),$$

が求められる．ただし，$C_0(t)=1$．この方程式は $C_k(0)=\delta_{k,0}$ としたときに解

$$C_k(t) = 1 - e^{-2t}\sum_{j=1}^{\infty}[I_{k-j}(2t) - I_{k+j}(2t)]$$

を持つ．ここで，$I_n(t)$ は変形 Bessel 関数である．

次に，Ising 模型の磁化

$$M(t) = \langle \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\sigma}\Big(P(\sigma,t)\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\Big)$$

について考察する．再びマスター方程式から

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}M(t) =& \frac{1}{N}\sum_{\sigma}\Big(\frac{\partial}{\partial t}P(\sigma,t)\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\Big)\\ =& -\frac{2}{N}\sum_{\sigma}\Big(P(\sigma,t)\sum_{i=1}^{N}\sigma_i w(\sigma_i \to -\sigma_i)\Big)\\ =& -(1-\tanh\frac{2J}{kT})M(t)\end{aligned}$$

あるいは，これを解いて

$$M(t) = M(0)\exp\Big(-(1-\tanh\frac{2J}{kT})t\Big),$$

を得る．

§3. 超幾何関数を解に持つマスター方程式

§3.1. Gauss 超幾何関数

Gauss 超幾何関数

$$F(\alpha,\beta;\gamma;z) = {}_2F_1(\alpha,\beta;\gamma;z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n(\beta)_n}{(\gamma)_n n!} z^n$$

は隣接関係式

$$\overset{(\alpha)}{T} := z\frac{d}{dz} + \alpha, \qquad \underset{(\alpha)}{T} := z(1-z)\frac{d}{dz} + \gamma - \alpha - \beta z,$$

$$\overset{(\gamma)}{T} := (1-z)\frac{d}{dz} - (\alpha+\beta-\gamma), \qquad \underset{(\gamma)}{T} := z\frac{d}{dz} + \gamma - 1$$

$$\overset{(\alpha)}{T} F(\alpha,\beta;\gamma;z) = \alpha F(\alpha+1,\beta;\gamma;z), \qquad \underset{(\alpha)}{T} F(\alpha,\beta;\gamma;z) = (\gamma-\alpha)F(\alpha-1,\beta;\gamma;z),$$

$$\overset{(\gamma)}{T} F(\alpha,\beta;\gamma;z) = \frac{(\gamma-\alpha)(\gamma-\beta)}{\gamma} F(\alpha,\beta;\gamma+1;z),$$

$$\underset{(\gamma)}{T} F(\alpha,\beta;\gamma;z) = (\gamma-1)F(\alpha,\beta;\gamma-1;z),$$

を持つ．これらを上手く組み合わせることによりマスター方程式の形を実現することが出来る：

$$\begin{aligned}
&\frac{(\alpha-\beta-1)(\alpha-\beta+1)(\alpha-\beta)}{\alpha\beta}\frac{\partial}{\partial s}F(\alpha,\beta;\gamma;z) \\
&\quad = (\beta-\alpha+1)(\gamma-\beta)F(\alpha+1,\beta-1;\gamma;z) - (\alpha-\beta+1)(\gamma-\alpha)F(\alpha-1,\beta+1;\gamma;z) \\
&\qquad\quad - (1+\alpha+\beta-2\gamma)(\alpha-\beta)F(\alpha,\beta;\gamma;z),
\end{aligned}$$

$$z = \frac{1}{1+e^{-s}}.$$

ところが，ここで遷移確率にあたる係数が遷移確率たる条件を満たさないことが確かめられる．

§3.2. Lauricella 超幾何関数

そこで，今度は Lauricella 超幾何関数

$$F_D(\alpha;\beta_1,\dots,\beta_n;\gamma;x) = \sum_{m_1,\dots,m_n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_{|m|}(\beta_1)_{m_1}\cdots(\beta_n)_{m_n}}{(\gamma)_{|m|}m_1!\cdots m_n!} x_1^{m_1}\cdots x_n^{m_n}$$

について同様の事を試みる．ここで，β_i を格子変数と考える．そのため，Gauss の場合の拡張にはなりえない．

ここで，Miller[2] に従って作用素

$$E_{\beta_k,-\beta_p} = \frac{u_k}{u_p}\left((x_k - x_p)\frac{\partial}{\partial x_k} + u_k\frac{\partial}{\partial u_k}\right)$$

を導入する．この作用素は $(v, u_1, \ldots, u_n, w, x_1, \ldots, x_n)$ を変数とする関数に作用する．ただし，添え字の $\beta_k, -\beta_p$ には依存していないことに注意せよ．

次に，$(v, u_1, \ldots, u_n, w, x_1, \ldots, x_n)$ の関数

$$\begin{aligned} &f_{\alpha,\beta_1,\ldots,\beta_n,\gamma}(v, u_1, \ldots, u_n, w, x_1, \ldots, x_n) \\ &\quad = \frac{\Gamma(\gamma-\alpha)\Gamma(\alpha)}{\Gamma(\gamma)} F_D(\alpha; \beta_1, \ldots, \beta_n; \gamma; x) v^\alpha u_1^{\beta_1} \cdots u_n^{\beta_n} w^\gamma \end{aligned}$$

を基底として導入する．(これを $f_{\alpha\beta_j\gamma}(v, u_j, w, x_j)$ とも書くことにする．)

以上の準備の下で，

$$E_{\beta_k,-\beta_p} f_{\alpha\beta_j\gamma} = \beta_k f_{\alpha,\beta_1,\ldots,\beta_k+1,\ldots,\beta_p-1,\ldots,\beta_n,\gamma}$$

を得る．すなわち，F_D に対する隣接関係式

$$\begin{aligned} &\left((x_k - x_p)\frac{\partial}{\partial x_k} + \beta_k\right) F_D(\alpha; \beta_1, \ldots, \beta_n; \gamma; x) \\ &\quad = \beta_k F_D(\alpha; \beta_1, \ldots, \beta_k + 1, \ldots, \beta_p - 1, \ldots, \beta_n; \gamma; x) \end{aligned}$$

が得られた．この隣接関係式はマスター方程式に変形するために大変便利な形をしている．実際，$p = k + 1$ として両辺の k に関する和を取れば，

$$\begin{aligned} \sum_k (x_k - x_{k+1})\frac{\partial}{\partial x_k} F_D(\alpha; \beta_j; \gamma; x) = &\sum_k \beta_k F_D(\alpha; \beta_1, \ldots, \beta_k + 1, \beta_{k+1} - 1, \ldots, \beta_n; \gamma; x) \\ &- (\sum_k \beta_k) F_D(\alpha; \beta_j; \gamma; x) \end{aligned}$$

ここで，

$$x_2 = \cdots = x_n, \qquad x_1 + x_2 = 2y_1, \qquad x_1 - x_2 = 2y_2$$

とすると，左辺は

$$\sum_k (x_k - x_{k+1})\frac{\partial}{\partial x_k} = (x_1 - x_2)(\frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\partial}{\partial x_2}) = 2y_2\frac{\partial}{\partial y_2}$$

右辺は，$w(\beta) = \beta - 1$ とすれば，

$$\sum_k w(\beta_k + 1) F_D(\alpha; \beta_1, \ldots, \beta_k + 1, \beta_{k+1} - 1, \ldots, \beta_n; \gamma; x) - (\sum_k w(\beta_k) + n) F_D(\alpha; \beta_j; \gamma; x)$$

と書き直せる．以上の計算をまとめれば，Lauricella 超幾何関数を特殊解に持つマスター方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}[e^{nt}F_D(\alpha;\beta_j;\gamma;y_1,y_2)] = \sum_k \beta_k e^{nt} F_D(\alpha;\beta_1,\ldots,\beta_k+1,\beta_{k+1}-1,\ldots,\beta_n;\gamma;y_1,y_2) - (\sum_k \beta_k) e^{nt} F_D(\alpha;\beta_j;\gamma;y_1,y_2),$$

$$y_2 = e^{2t},$$

を得る．

以上のように，Lauricella 超幾何関数を特殊解に持つマスター方程式が得られた．遷移確率にあたる係数が極めて簡単であるため，物理的対象もイメージしやすい．i 番目のサイトに β_i の粒子が載っている系で，ランダムに一つのサイトが選ばれて，確率 $w(\beta_i) = \beta_i - 1$ で一つの粒子を $i+1$ 番目のサイトに移動させるダイナミクスが働いている．すなわち，粒子数が多いサイトほど粒子を放出しやすく，高低差のあった界面が次第に平坦に慣らされていく様子をモデル化したものと考えられる．

§4. 今後の展望

現在まで，超幾何関数の隣接関係式から始めてマスター方程式を得る方法で成功を収めたものは，Lauricella 超幾何関数によるものだけである．このように一つ一つの超幾何関数に対して，その隣接関係式を求めて，さらにマスター方程式の形に変形する作業は一般に極めて困難である．

そこで，逆に微分作用素および差分作用素から超幾何関数の具体的な形を特定せずに隣接関係式を与える，高山のアルゴリズム [3] の利用が有力視される．これについては現在研究中である．

References

[1] Glauber, R. J., J. Math. Phys. **4** (1963), 294–307.
[2] Miller, W., J. Math. Phys. **13** (1972), 1393–1399.
[3] Takayama, N., Jpn. J. Appl. Math. **6** (1989), 147–160.