数理解析研究所講究録
980巻 1997年 112-119

粒子系における非可逆な定常状態について

中大理工　香取眞理　(Makoto Katori)

本講演では、Durrett and Griffeath (1983) によって導入された、1次元 contact process のある family に関する我々の研究について報告する（最近 contact process について、日本物理学会誌に解説を書いたので参照のこと: 香取 (1994))。1次元 contact process は $\mathbf{Z}$ 上の連続時間 Markov 過程である。これは一種の格子ガスモデルであり、各格子点は粒子に占有されているか、空孔であるかのいずれかであるとする。各時刻 t での状態は、そのときに粒子に占有されている格子点の集合 $\eta_t \subset \mathbf{Z}$ で表される。系は次のような確率的なルールによって時間発展する。

(i) 格子点 x が $x \in \eta_{t^-}$ ならば、rate 1 で $x \notin \eta_t$ となる。

(ii) 格子点 x が $x \notin \eta_{t^-}$ ならば、最近接格子点 $\{x-1, x+1\}$ のうちで時刻 t^- に粒子に占有されている数

$$N_x = |\eta_{t^-} \cap \{x-1, x+1\}| \tag{1}$$

に依存して rate $f(N_x)$ で $x \in \eta_t$ となる（$|A|$ は集合 A に含まれる格子点の数を表す)。関数 $f(N)$ は次のように与えられるものとする。

$$f(N) = \begin{cases} 0 & N=0 \quad \text{の場合} \\ \lambda & N=1 \quad \text{の場合} \\ \theta\lambda & N=2 \quad \text{の場合}. \end{cases} \tag{2}$$

ただしここで、λ, θ は非負の値をとるパラメーターである。

このプロセスは、各格子点上に生物個体が棲んでいて $x \in \eta_t$ なる格子点上の個体は伝染病に感染しており、他方 $x \notin \eta_t$ なる格子点上の個体は健康な状態にあると思うと、伝染病の伝播を表す簡単な数理モデルと見なせる。パラメーター λ は左右の隣人のうち一方だけが感染しているときに伝染する感染率を表している。左右の両隣人とも感染しているときの伝染率は一方だけの時と一般には異なっているであろう。パラメーター θ はこの2つの場合の感染率の比を表すものである。特に $\theta=2$ の場合は、このプロセスは basic contact process と呼ばれ（以下 BCP と略称)、最初に Harris (1974) によって導入され研究が始められた。$\theta=1$ の場合には $N=0$ のときに $f(N)=0$ であり、$N \geq 1$ では $f(N)=\lambda$ である。このときプロセスは threshold contact process (TCP) と呼ばれる。

BCP はかつて高エネルギー物理学の分野で研究された Reggeon quantum spin model と実は等価である (Brower *et al.* 1978, Grassberger and de la Torre 1979)。また、TCP はまた別のコンテキストで研究されている。Dickman and Burschka (1988) は 触媒表面の化学反応系に対して Ziff *et al.* (1986) によって提案されたモデルの簡略化されものと

してある非平衡格子モデルを導入した。彼らのモデルは A モデルと呼ばれているが、その粒子を空孔に、空孔を粒子と考え直せば TCP と等しくなるのである。ここでは、パラメーターθが

$$1 \leq \theta \leq 2 \tag{3}$$

である場合を包括的に扱うことにする。この contact process の family をここでは θ-contact process (θ-CP と略称) と呼ぶことにする。

θ-CP η_t は interacting particle systems に関する Liggett (1985) の教科書にある標準的な方法によって以下のように定義される。まず、$x \in \eta$ のとき $\eta(x) = 1$、$x \notin \eta$ のとき $\eta(x) = 0$ と書くことにする。state space は $X = \{0,1\}^{\mathbf{Z}}$ で与えられ、X 上の連続関数全体を $C(X)$ と書くことにする。この $C(X)$ に含まれる $f(\eta)$ に対して、次のように formal generator Ω を定義する。

$$\Omega f(\eta) = \sum_{x \in \mathbf{Z}} c(x,\eta)[f(\eta^x) - f(\eta)]. \tag{4}$$

ここで

$$c(x,\eta) = \eta(x) + \lambda(1-\eta(x))\{\eta(x-1) + \eta(x+1) - (2-\theta)\eta(x-1)\eta(x+1)\} \tag{5}$$

であり、

$$\eta^x(u) = \begin{cases} 1-\eta(x) & u = x \quad \text{の場合} \\ \eta(u) & u \neq x \quad \text{の場合} \end{cases} \tag{6}$$

である。すなわち、各遷移に際しては、ランダムに選ばれたどこか1つの spin $\eta(x)$ だけが rate $c(x,\eta)$ で flip する ($\eta_t(x) = 0 \to 1$ あるいは $\eta_t(x) = 1 \to 0$) プロセスを考えるのである (single spin flip dynamics)。この場合 Markov semigroup $S(t)$ が $S(t)f = \lim_{n\to\infty}(I - (t/n)\Omega)^{-n}f$ によって Ω から定義される (I は identity operator)。各 $\lambda \geq 0, \theta \geq 0$ に対して $S(t)$ に対応する Markov process が唯一存在する。なお、θ-CP は (3) の場合には graphical representation と呼ばれる方法に依っても構成できる (Griffeath 1979, Durrett and Griffeath 1983)。この方法については Katori and Konno (1993a), 香取 (1994) に解説した。

$\theta \geq 1$ のときには、ある格子点に粒子を付け加えるとその結果別の空孔に粒子が生成される rate は変わらないか増えるかのいずれかであり、減ることはない。またこのとき、どこかの粒子の消滅率が増えることはありえない（消滅率は1に固定されているので)。このような性質は attractiveness と呼ばれる。θ-CP は $\theta \geq 1$ のときには attractive であるので、upper invariant measure と呼ばれる次のような invariant measure が存在することが証明できる。

$$\nu_{\lambda,\theta} = \lim_{t\to\infty} \delta_1 S(t). \tag{7}$$

ここで δ_1 は $\eta \equiv 1$ のときにだけ 1 となる point-mass distribution である。すなわち、$\nu_{\lambda,\theta}$ はすべての格子点が粒子で占有されている（すべての個体が感染している）という初

期状態 ($\eta_0 = \mathbf{Z}$) からスタートしたときの定常状態である。この定常状態における粒子の密度を考える：

$$\rho(\lambda, \theta) = \nu_{\lambda,\theta}\{\eta : \eta(x) = 1\}. \tag{8}$$

$\nu_{\lambda,\theta}$ は並進対称なので、この量は実際には $x \in \mathbf{Z}$ には依存しない。$\rho(\lambda, \theta)$ は一種の order parameter と見なすことができて、これを用いて各 $\theta \geq 1$ に対して次のように臨界値$\lambda_c(\theta)$ を定義することができる。

$$\begin{aligned}\lambda_c(\theta) &\equiv \inf\{\lambda \geq 0 : \rho(\lambda, \theta) > 0\} \\ &= \inf\{\lambda \geq 0 : P(\eta_t \neq \emptyset \ {}^{\forall}t \geq 0) > 0 \quad \text{for any non-empty initial state}\} \\ &= \sup\{\lambda \geq 0 : P(\eta_t = \emptyset \text{ for some } t \geq 0) = 1 \quad \text{for any initial state}\}.\end{aligned} \tag{9}$$

すなわち、もしも $\lambda < \lambda_c(\theta)$ ならばすべてのプロセスは確率 1 で extinct してしまうが、もしも $\lambda > \lambda_c(\theta)$ ならば non-empty な状態からスタートしたプロセスが永遠に存続する確率が正となる（ここで empty な状態とは $\eta(x) = 0 \ {}^{\forall}x \in \mathbf{Z}$ なる状態を意味する）。θ-CP を伝染病伝播のモデルと見なすと、前者は伝染病が撲滅された状態を、また後者は伝染病が蔓延して感染者と非感染者とが共存している状態をそれぞれ表すものと解釈される。化学反応系のモデルとしてみると、extinction state は触媒表面がある種の分子で完全に覆われてしまい反応が停止した poisoned state に、また survival state は反応が持続する active steady-state に対応すると考えられる。Durrett and Griffeath (1983) は $\lambda_c(\theta)$ は $1 \leq \theta \leq 2$ のときには θ の 単調減少関数であることを証明している。(λ, θ)-平面 $(0 \leq \lambda < \infty, 1 \leq \theta \leq \infty)$ を考えると、$\lambda = \lambda_c(\theta)$ は extinction phase $(\lambda < \lambda_c(\theta))$ と survival phase $(\lambda > \lambda_c(\theta))$ とを区切る相境界を与えることになる。

Durrett and Griffeath (1983) によって θ-CP の long-term behavior は詳しく調べられているが、結果は定性的なものであり、臨界値 $\lambda_c(\theta)$ の値など定量的なことは未だ分かっていない。最もよく調べられている BCP ($\theta = 2$) に対しても臨界値の厳密解はない。ただし、$\lambda_c(2)$ の厳密な上限を与える理論はいくつかあり、その中で最も優れた Holley and Liggett (1978) の議論により、$\lambda_c(2) \leq 2$ が証明されている。

Holley-Liggett の議論では、次のような関係が $\mathbf{Z}$ の空集合ではない任意の有限な部分集合 A に対して成り立つような renewal measure μ が存在することを証明することに依って、survival を証明する。

$$\nu_{\lambda,\theta}\{\eta : \eta(x) = 1 \quad \text{for some } x \in A\} \geq \mu\{\eta : \eta(x) = 1 \quad \text{for some } x \in A\}. \tag{10}$$

（詳しくは Liggett 1985, pp.268-275 を見よ。）ここでいう renewal measure とは、$\{0, 1, 2, ...\}$ 上の、有限の平均を持つ確率密度関数 $f(n)$ に対応して次のように定義される。すなわち、任意の $A = \{x_1, x_2, ..., x_n\}, x_1 < x_2 < ... < x_n$ なる集合に対して

$$\begin{aligned}&\mu\{\eta : \eta(x_i) = 1 \text{ for } 1 \leq i \leq n \quad \text{and } \eta(x) = 0 \ {}^{\forall}x \notin A \text{ s.t. } x_1 < x < x_n\} \\ &= \frac{\prod_{i=1}^{n-1} f(x_{i+1} - x_i)}{\sum_{k=1}^{\infty} k f(k)}.\end{aligned} \tag{11}$$

すなわち、μ は粒子の間隔が独立同分布 $f(n)$ に従うというきわめて簡単なものである。当然、θ-CP の upper invariant measure $\nu_{\lambda,\theta}$ ではこのような独立性は成立しないので、これは $\nu_{\lambda,\theta}$ を μ で近似する操作と考えられる。不等式 (10) が $\mathbf{Z}$ の空集合ではない任意の有限集合 A に対して成立するための条件の 1 つとして、$f(n)$ は n の logarithmically convex function であることが課せられる。すなわち、

$$\frac{f(n)}{f(n+1)} \geq \frac{f(n+1)}{f(n+2)} \tag{12}$$

が、任意の $n \geq 1$ に対して成立しなければならない。Holley and Liggett (1978) は BCP ($\theta = 2$) に対して、$\lambda \geq 2$ のときには望ましい $f(n)$ を陽に与えることに成功した。彼らの与えた $f(n)$ を用いると、$\lambda \geq 2$ のときには $\sum_{k=1}^{\infty} kf(k) < \infty$ である。また (11) において特に $A = \{x\}$ とした場合には、

$$\mu\{\eta : \eta(x) = 1\} = \frac{1}{\sum_{k=1}^{\infty} kf(k)} \tag{13}$$

であることに注意すると、(8) の定義より (10) から、$\lambda \geq 2$ では $\rho(\lambda, 2) > 0$ であることが帰結されることが分かる。これは、定義 (9) より $\lambda_c(2) \leq 2$ を意味する。

最近 Liggett はここで考えている θ-CP とは異なる contact process の 2 つの family に対して、臨界点の上限を新たに与えている。この 2 つはそれぞれ、spatially inhomogeneous contact process (Liggett 1991a) と periodic threshold contact process (Liggett 1991b) と呼ばれているが、この後者は特別な場合として TCP すなわち $\theta = 1$ の場合を含んでいる。彼の結果は、$\lambda^3 - \lambda^2 - 3\lambda + 1 = 0$ の最大実根を λ_1 と書くと ($\lambda_1 = 2.170\cdots$.) $\lambda_c(1) \leq \lambda_1$ であるというものである。これを証明する方法は、やはり Holley-Liggett の議論 (1978) に基づくが、今回は $f(n)$ は陽に求めることはせずに、望ましい renewal measure が存在することだけを証明している。残念ながら、Liggett (1991a, 1991b) の方法を $\theta \neq 1$ の場合に拡張するのは難しく見える。

今回我々は、Holley-Liggett (1978) の original の証明方法を拡張して、$1 \leq \theta \leq 2$ の全ての場合に望ましい $f(n)$ を陽に求めることに依って、次のような結果を得ることができた。

定理 1 (Katori and Konno 1993b) $1 \leq \theta \leq 2$ を仮定する。$\lambda_U(\theta)$ を 3 次方程式

$$\theta\lambda^3 - (3\theta - 2)\lambda^2 - 3(2 - \theta)\lambda + (2 - \theta) = 0 \tag{14}$$

の最大実根とする。すると

$$\lambda_c(\theta) \leq \lambda_U(\theta) \tag{15}$$

が成立する。

この結果は、Holley-Liggett (1978) の結果 $\lambda_c(2) \leq 2$ と Liggett (1991b) の結果 $\lambda_c(1) \leq \lambda_1$ を特別な場合として含むことは明かである。この定理の証明に当たって、我々はまず

望むべき $f(n)$ は次のような条件を満たすべきであることを導いた。

$$
\begin{aligned}
&2\lambda f(3) + f(1)^2 - (2+\theta\lambda) f(2) = 0 \\
&2\lambda f(n+1) + \sum_{k=1}^{n-1} f(k) f(n-k) - 2(1+\lambda) f(n) = 0 \quad n \geq 3 \\
&\sum_{n=1}^{\infty} f(n) = 1
\end{aligned} \tag{16}
$$

$$
\begin{aligned}
&\sum_{n=1}^{\infty} n f(n) < \infty \\
&0 < f(n) < 1 \quad {}^{\forall} n \geq 1.
\end{aligned} \tag{17}
$$

我々は、(16) の解は $x = (2-\theta)/\lambda + (\theta - 1), y = (2-\theta) + \theta\lambda$ と変数変換した後

$$
\begin{aligned}
f(n) &= F(n) - F(n-1), \\
F(n) &= \frac{1}{y^{n-1}} w(n, x)
\end{aligned} \tag{18}
$$

とおけて、ここに現れる関数 $w(n, x)$ は次の漸化式の解で与えられることを導いた。

$$
\begin{aligned}
&(n+2) w(n+2, x) - (2n+1)(1+x) w(n+1, x) - (n-1)(1-x^2) w(n, x) = 0 \\
&w(1, x) = w(2, x) = 1.
\end{aligned} \tag{19}
$$

この解は、Gauss の超幾何級数 $F(a, b, c; z)$ を用いて次のように与えられる。

$$
w(n, x) = \left(\frac{1+x}{2}\right)^{n/2-1} \exp(\mathrm{i}(n-2)\varphi) v(n, \exp(-2\mathrm{i}\varphi)), \quad n \geq 2. \tag{20}
$$

ただし、

$$
\begin{aligned}
\exp(\mathrm{i}\varphi) &= \sqrt{\frac{1+x}{2}} + \mathrm{i}\sqrt{\frac{1-x}{2}}, \\
v(n, z) &= F(-(n-2), -(n-1), 2; z) \quad n \geq 2.
\end{aligned} \tag{21}
$$

この解が $\lambda \geq \lambda_U(\theta)$ のときに限って条件 (17) を満たすことは比較的容易に証明できる。定理 1 を証明するには、これだけでは不十分であり、同時にこのように与えられた $f(n)$ が logarithmically convex であること、つまり (12) が成立することも示さなければならない。我々は、(19) の漸化式を利用してこれを証明することができた。なお、$\theta \to 2$ の極限では、(20) の $v(n, \exp(-2\mathrm{i}\varphi))$ の 2 番目の引き数 $\exp(-2\mathrm{i}\varphi)$ は 1 になり、このときは Gauss の超幾何級数 $F(a, b, c; 1)$ は Gamma 関数（すなわち階乗）の比で表される。このため、解 $f(n)$ はかなり簡単な形となるが、これが Holley-Liggett (1978) が求めたものである。

$1 \leq \theta \leq 2$ のときに $\lambda_c(\theta)$ の下限を与えるのは、比較的簡単である。次の結果は BCP に対する Griffeath (1975) の結果：$\lambda_c(2) \geq (1+\sqrt{37})/6 = 1.180\cdots$ の拡張である。

定理 2 (Katori and Konno 1993b) $\lambda_L(\theta)$ を次のように定義する。

$$\lambda_L(\theta) = \frac{\theta - 1 + \sqrt{\theta^2 + 10\theta + 13}}{2(\theta+1)}. \tag{22}$$

すると、$1 \le \theta \le 2$ のときには

$$\lambda_L(\theta) \le \lambda_c(\theta) \tag{23}$$

が成立する。

以上の2つの定理は、相図における相境界 $\lambda = \lambda_c(\theta)$ に対して厳密な上限と下限を与えることになる。

computer simulation や（厳密ではない）数値的な方法によると BCP と TCP の臨界値は次のように評価されている。$\lambda_c(2) \simeq 1.649$ (Brower *et al.* 1978, Konno and Katori 1990)、$\lambda_c(1) \simeq 1.742$ (Dickman and Burschka 1988, Dickman and Jensen 1991, Ferreira and Mendiratta 1993)。(Brower *et al.* (1978) の $D = 1$ Reggeon quantum spin model の $T_c = 0.60628 \pm 0.00004$ の逆数が $\lambda_c(2)$ に相当し、また Dickman and Jensen (1991) の A モデルの$\lambda_c = 0.574141(2)$ の逆数がここでの $\lambda_c(1)$ に相当することに注意せよ。)

ごく最近、Jensen and Dickman (1993) は級数展開の方法で θ-CP と等価なモデルを調べた結果を報告している。彼らの方法は厳密なものではないが、臨界値をかなりの精度で評価することができる。彼らは、この方法を $10^{-2} \le \theta \le 10^3$ に対して適応している。その結果を見ると、確かに $1 \le \theta \le 2$ のときに彼らの評価した値は我々の上限と下限の間にあることが分かるが、そればかりか、我々が与えた $\lambda_U(\theta)$ と $\lambda_L(\theta)$ はそれ以外の θ の値に対しても $\lambda_c(\theta)$ の上限・下限になっていることが示唆されている。上で述べた定理1と定理2の証明では、θ-CP の coalescing dual process の性質を使っている (coalescing duality については Katori and Konno 1993a を参照)。故に、$1 \le \theta \le 2$ という制限を除くには、もっと一般的な duality を用いることが必須である。Katori (1993) では、Gray (1986) の duality を用いると定理2が次のように拡張できることを証明した。

定理 3 (Katori 1993) $\lambda_L(\theta)$ を定理2の (22) で定義する。このとき

$$\lambda_L(\theta) \le \lambda_c(\theta) \tag{24}$$

は $\theta \ge 1$ で成立する。

定理1を $\theta > 2$ に対して拡張することは、かなり難しいと思われる。また、$\theta < 1$ については、この領域では attractive ではないため、そもそも $\lambda_c(\theta)$ が定義されるか否かも疑問でありよく分からないというのが現状である。

謝辞　この研究の大部分は、室蘭工大共通群数理科学系の今野紀雄氏との共同研究による。また、本研究を発表するにあたり中央大学理工学研究所より研究助成を受けた。

参考文献

Brower R C, Furman M A and Moshe M 1978 Critical exponents for the Reggeon quantum spin model *Phys.Lett.* **76B** 213-219

Dickman R and Burschka M A 1988 Nonequilibrium critical poisoning in a single-species model *Phys.Lett.* **127A** 132-137

Dickman R and Jensen I 1991 Time-dependent perturbation theory for non-equilibrium lattice models *Phys. Rev. Lett.* **67** 2391-2394

Durrett R and Griffeath D 1983 Supercritical contact processes on **Z** *Ann. Probab.* **11** 1-15

Ferreira A L C and Mendiratta S K 1993 Mean-field approximation with coherent anomaly method for a non-equilibrium model *J.Phys.*A: *Math. Gen.* **26** L145-150

Grassberger P and de la Torre A 1979 Reggeon field theory (Schlögl's first model) on a lattice: Monte Carlo calculations of critical behaviour *Ann. Phys.* **122** 373-396

Gray L 1986 Duality for general attractive spin systems with applications in one dimension *Ann. Probab.* **14** 371-396

Griffeath D 1975 Ergodic theorems for graph interactions *Adv.Appl.Probab.* **7** 179-194

Griffeath D 1979 *Additive and Cancellative Interacting Particle Systems* Lecture Notes in Mathematics 724 (Berlin: Springer)

Harris T E 1974 Contact interaction on a lattice *Ann. Probab.* **2** 969-988

Holley R and Liggett T M 1978 The survival of contact processes *Ann. Probab.* **6** 198-206

Jensen I and Dickman R 1993 Series analysis of the generalized contact process, Preprint

香取眞理 1994 解説「詳細釣合を満たさない定常分布：コンタクト・プロセスを例にして」日本物理学会誌 **49** 2月号

Katori M 1993 Reformulation of Gray's duality for attractive spin systems and its applications, submitted to *J.Phys.* A: *Math. Gen.*

Katori M and Konno N 1993a Phase transitions in contact process and its related processes *Formation, Dynamics and Statistics of Patterns* vol.2 ed K Kawasaki and M Suzuki (Singapore: World Scientific) pp.23-72

Katori M and Konno N 1993b Bounds for the critical line of the θ-contact processes with $1 \leq \theta \leq 2$ *J.Phys.* A: *Math. Gen.* **26** 6597-6614

Konno N and Katori M 1990 Application of the CAM based on a new decoupling procedure of correlation functions in the one-dimensional contact process *J. Phys. Soc. Japan* **59** 1581-1592

Liggett T M 1985 *Interacting Particle Systems* (New York: Springer)

Liggett T M 1991a Spatially inhomogeneous contact processes *Spatial Stochastic Processes* ed K S Alexander and J C Watkins (Boston: Birkhäuser) pp.105-140

Liggett T M 1991b The periodic threshold contact process *Random Walks, Brownian Motion and Interacting Particle Systems* ed R Durrett and H Kesten (Boston: Birkhäuser) pp.339-358

Ziff R M, Gulari E and Barshad Y 1986 Kinetic phase transitions in an irreversible surface-reaction model *Phys.Rev.Lett.* **56** 2553-2556