

非対称散逸粒子系の N 体系の揺動散逸関係

石渡 龍輔¹, 矢口 令朗², 杉山 雄規¹

¹ 名古屋大学 大学院情報学研究科 複雑系科学専攻,

² 名古屋大学 大学院情報科学研究科 複雑系科学専攻

概要

非対称相互作用を含む散逸系である線形化された N 体の BL-OV モデルの揺動散逸関係を調べる.

Fluctuation dissipation relation in a N-body dissipative system with asymmetric interactions.

Ryosuke Ishiwata¹, Reo Yaguchi², Yuki Sugiyama¹

¹ Department of Complex Systems Science, Graduate School of Informatics,
Nagoya University,

² Department of Complex Systems Science, Graduate School of Information Science,
Nagoya University

Abstract

We investigate the Fluctuation-Dissipation-Relation in an asymmetric dissipative system using a linearized N-Body BL-OV model.

1 はじめに

魚や鳥や昆虫の群れの移動, 自動車の交通流, 人間の歩行者流, アメーバの凝集運動などは, 自己駆動する物体により創発される集団運動として研究されている. 自己駆動する物体を質点として取りあつかう場合, そのような物体を自己駆動粒子とよぶ. 自己駆動粒子は, 粒子自身の自己駆動力によって推進し, 自己駆動粒子間に働く相互作用は作用・反作用や運動量保存の法則を満たさない. この相互作用は, 非対称相互作用と呼ばれており [1], 自己駆動する物体間に働く基本的な力と考えられる.

非対称相互作用は, エネルギーの散逸とともに導入されることで, 自己駆動粒子系にみられる集団運動を特徴付けている. エネルギー散逸と非対称相互作用を含む物理系は, 非対称散逸系 (Asymmetric Dissipative System) とよばれる [1].

集団運動を特徴づける巨視的な物理量を発見することは, 非対称散逸系という新奇な物理系において

も重要であると考えられる. 本研究では, ラグランジアンなどの保存量を見いだされていない非対称散逸系のモデルである BL-OV モデルを対象として, 非対称性が要因となる揺動散逸関係のやぶれを解析的に計算する.

2 線形 BL-OV モデル

2.1 線形化された BL-OV モデル

中山たちの先行研究 [2] において, 線形化された BL-OV は定常流からのずれ y_i ($i = 1, \dots, n$) に関する 2 階微分方程式で与えられる. :

$$\frac{d^2 y_i}{dt^2} = a \left\{ \left[V'_F(b) \cdot \Delta y_{i+1} + V'_B(b) \cdot \Delta y_i \right] - \frac{dy_i}{dt} \right\}. \quad (1)$$

パラメーター a は, 各粒子共通に応答時間を決定する「感応度」をあらわしている. V_F, V_B は, $V_F(x) = a' [\tanh(x - \beta) + \Gamma]$, $V_B(x) = -a'' [\tanh(x - \beta) + \Gamma]$ で与えられる. $\Delta y_{i+1} := y_{i+1} - y_i$, $\Delta y_i := y_i - y_{i-1}$, $V'_F(b) =$

$\left. \frac{dV_F(x)}{dx} \right|_{x=b}$, $V'_B(b) = \left. \frac{dV_B(x)}{dx} \right|_{x=b}$ である。また、周期境界を考え、 $y_0 = y_n$, $y_{n+1} = y_1$ と設定する。

定数をそれぞれ

$$\frac{k_L}{m} := a \cdot V'_F(b), \quad -\frac{k_R}{m} := a \cdot V'_B(b), \quad \frac{g}{m} := a,$$

とおきかえ、変数も $y_i(t) \rightarrow x_i(t)$ ($i = 1, 2, \dots, n$) と置き換えれば、運動方程式は、

$$m \frac{d^2 x_i}{dt^2} = k_L (x_{i+1} - x_i) - k_R (x_i - x_{i-1}) - \gamma \cdot \frac{dx_i}{dt} + R_i(t) + f_i(t). \quad (2)$$

となる。 $R_n(t)$ は、熱平衡状態での相関関数を求めるために導入した熱ゆらぎであり、 $f_n(t)$ は外力を表している。

2.2 解

各粒子ごとの方程式を行列でまとめて表すと

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = \mathbf{M} \mathbf{x}(t) - \gamma \frac{d\mathbf{x}}{dt} + \mathbf{R}(t), \quad (3)$$

$$\mathbf{x}(t) := \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ \vdots \\ x_n(t) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}(t) := \begin{pmatrix} R_1(t) + f_1(t) \\ R_2(t) + f_2(t) \\ \vdots \\ R_n(t) + f_n(t) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{M} := \begin{pmatrix} -k_L - k_R & k_L & 0 & 0 & k_R \\ k_R & -k_L - k_R & k_L & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ k_L & 0 & \cdots & k_R & -k_L - k_R \end{pmatrix},$$

となる。これを解くにはまず、固有モードを求める。そして、各モードごとに方程式を解き、モードの位置や速度から粒子ごとの位置や速度を求めればよい。

初めに行列 \mathbf{M} の固有値、固有ベクトルを求める。固有方程式を解くと固有値 s は

$$s = f(1), f(a), f(a^2), \dots, f(a^{n-1}), \quad (4)$$

となる。ここで $a, f(1), f(a), \dots, f(a^{n-1})$ は、

$$a := e^{i\frac{2\pi}{n}}, \\ f(a^0) = f(1) \\ = 0,$$

$$f(a) = -(k_L + k_R) + k_L a + k_R a^{n-1} \\ = -(k_L + k_R) + k_L a + k_R a^{-1},$$

$$f(a^2) = -(k_L + k_R) + k_L a^2 + k_R a^{2(n-1)} \\ = -(k_L + k_R) + k_L a^2 + k_R a^{-2},$$

\vdots

$$f(a^{n-1}) = -(k_L + k_R) + k_L a^{(n-1)} + k_R a^{(n-1)^2} \\ = -(k_L + k_R) + k_L a^{-1} + k_R a,$$

となる。また、行列 \mathbf{M} を対角化するための直交行列 \mathbf{P} は

$$\mathbf{P} = \frac{1}{\sqrt{n}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & a & a^2 & \cdots & a^{(n-1)} \\ 1 & a^2 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 1 & a^{(n-1)} & \cdots & \cdots & a^{(n-1)^2} \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$\mathbf{P}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{n}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & a^{-1} & a^{-2} & \cdots & a^{-(n-1)} \\ 1 & a^{-2} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 1 & a^{-(n-1)} & \cdots & \cdots & a^{-(n-1)^2} \end{pmatrix} \quad (6)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n}} \begin{pmatrix} \mathbf{p}_1 & \mathbf{p}_2 & \cdots & \cdots & \mathbf{p}_n \end{pmatrix}, \quad (7)$$

となる。方程式 (3) は

$$m \frac{d^2 \mathbf{P}^{-1} \mathbf{x}}{dt^2} = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{P} \mathbf{P}^{-1} \mathbf{x}(t) - \gamma \frac{d\mathbf{P}^{-1} \mathbf{x}}{dt} + \mathbf{P}^{-1} \mathbf{R}(t), \quad (8)$$

と変形でき、

$$m \frac{d^2 q_i}{dt^2} = f(a^{i-1}) q_i(t) - \gamma \frac{dq_i}{dt} + R_i^{(q)}(t), \quad (9)$$

と表せる。 q_i は座標変換後の基準座標

$$q_i(t) = \frac{1}{\sqrt{n}} \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{x}(t) \quad (i = 1, 2, 3), \quad (10)$$

R_i^q は座標変換後の基準座標であらわした揺動力

$$R_i^q(t) = \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{R}(t) \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (11)$$

を表す。

2.3 線形 BL-OV モデルの解

非斉次の定数係数線形方程式 (9) を解いて

$$q_i(t) = \frac{q'_i(t_0) - \lambda_B^{(i)} q_i(t_0)}{(\lambda_A^{(i)} - \lambda_B^{(i)})} e^{\lambda_A^{(i)}(t-t_0)}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{q'_i(t_0) - \lambda_A^{(i)} q_i(t_0)}{(\lambda_A^{(i)} - \lambda_B^{(i)})} e^{\lambda_B^{(i)}(t-t_0)} \\
& + \int_{t_0}^t dt' \frac{R'_i(t') e^{\lambda_A^{(i)}(t-t')}}{m(\lambda_A^{(i)} - \lambda_B^{(i)})} \\
& - \int_{t_0}^t dt' \frac{R'_i(t') e^{\lambda_B^{(i)}(t-t')}}{m(\lambda_A^{(i)} - \lambda_B^{(i)})}, \quad (12)
\end{aligned}$$

ここで, $\lambda_A^{(i)}, \lambda_B^{(i)}$ は,

$$\lambda_A^{(i)} = \frac{-\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4mf(a^{i-1})}}{2m}, \quad (13)$$

$$\lambda_B^{(i)} = \frac{-\gamma - \sqrt{\gamma^2 + 4mf(a^{i-1})}}{2m}. \quad (14)$$

$\mathbf{x}(t) = \mathbf{P}\mathbf{q}(t)$ より, $\mathbf{x}(t)$ の要素 $x_i(t)$ と $\mathbf{q}(t)$ の要素 $q_k(t)$ とは, お互いに次の関係にある:

$$x_i(t) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{j=1}^n a^{(i-1)(j-1)} q_j(t) \quad (i = 1, 2, \dots, n),$$

$$q_k(t) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{l=1}^n a^{-(k-1)(l-1)} x_l(t) \quad (k = 1, 2, \dots, n).$$

これらの関係を用いれば, (12) から, $x_i(t)$ が次のようにもとまる:

$$\begin{aligned}
& x_i(t) \\
& = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n a^{(j-1)(i-k)} \frac{(u_k(t_0) - \lambda_B^{(j)} x_k(t_0))}{(\lambda_A^{(j)} - \lambda_B^{(j)})} e^{\lambda_A^{(j)}(t-t_0)} \\
& - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n a^{(j-1)(i-k)} \frac{(u_k(t_0) - \lambda_A^{(j)} x_k(t_0))}{(\lambda_A^{(j)} - \lambda_B^{(j)})} e^{\lambda_B^{(j)}(t-t_0)} \\
& + \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n a^{(j-1)(i-k)} \int_{t_0}^t dt' \frac{R'_k(t') e^{\lambda_A^{(j)}(t-t')}}{m(\lambda_A^{(j)} - \lambda_B^{(j)})} \\
& - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n a^{(j-1)(i-k)} \int_{t_0}^t dt' \frac{R'_k(t') e^{\lambda_B^{(j)}(t-t')}}{m(\lambda_A^{(j)} - \lambda_B^{(j)})}
\end{aligned}$$

3 応答関数と相関関数

3.1 定義

前節で設定したモデルを用いて, 速度 $u_\mu(t) := dx_\mu(t)/dt$ の応答関数と相関関数を求める. 運動方程式に外力 $f_\nu(t)$ を加えた場合の応答関数 $\phi_{\mu\nu}$ は, 次で定義される (外力の下付き添字は, 外力を加える粒子の番号を表す):

$$\langle u_\mu(t) \rangle_{f_\nu} - \langle u_\mu \rangle_{eq} = \int_{-\infty}^t ds \phi_{\mu\nu}(t-s) f_\nu(s).$$

また, 粒子ごとに独立なガウシアンノイズ $R_\nu(t)$ を加えた場合の速度の相関を

$$C_{\mu\nu}(t-s) := \langle u_\mu(t) u_\nu(s) \rangle_{eq},$$

$$\langle R_\nu \rangle_{eq} = 0,$$

$$\langle R_\mu(t) R_\nu(s) \rangle_{eq} = 2\gamma k_B T \delta_{\mu\nu} \delta(t-s)$$

と定義する. ここで, $\langle \cdot \rangle$ はアンサンブル平均, $\langle \cdot \rangle_{eq}$ は平衡状態における熱ゆらぎのアンサンブル平均, $\langle \cdot \rangle_{f_\nu}$ は粒子 ν だけに外力 f_ν を加えたときのアンサンブル平均をあらわす.

外力を $\mathbf{f} = (0, \dots, 0, f_o(t), 0, \dots, 0)^\top$ と設定したとき, $x'_i(t) \equiv u_i(t)$ として速度を表せば, 速度, 外力, 応答関数の関係が次のようにもとまる:

$$\langle u_i(t) \rangle_{f_o} - \langle u_i \rangle_{eq} = \int_{t_0}^t dt' f_o(t') \phi_{i,o}(t-t'),$$

$\langle u_i \rangle_{eq}$ は定常状態での速度を表している. ここで, 応答関数 $\phi_{i,o}(t)$ は次のように与えられる:

$$\begin{aligned}
& \phi_{i,o}(t) \\
& = \sum_{j=1}^n \frac{a^{(j-1)(i-o)}}{n} \left[\lambda_A^{(j)} \frac{e^{\lambda_A^{(j)} t}}{m(\lambda_A^{(j)} - \lambda_B^{(j)})} - \lambda_B^{(j)} \frac{e^{\lambda_B^{(j)} t}}{m(\lambda_A^{(j)} - \lambda_B^{(j)})} \right]. \quad (15)
\end{aligned}$$

$t > t'$ の場合の相関関数を求めると,

$$\begin{aligned}
& C_{i,o}(t-t') \\
& = \frac{1}{2\gamma} \frac{T}{n^2} \frac{1}{m} \sum_{j=1}^n \frac{a^{(j-1)(i-o)}}{(\lambda_A^{(j)} - \lambda_B^{(j)})} \left[\lambda_A^{(j)} e^{\lambda_A^{(j)}(t-t')} - \lambda_B^{(j)} e^{\lambda_B^{(j)}(t-t')} \right] \\
& + \frac{T}{n^2} \frac{1}{m^2} \sum_{j=1}^n \sum_{p \neq j} \frac{a^{(j-1)(i-o)}}{(\lambda_A^{(j)} - \lambda_B^{(j)})} \\
& \times \left[\frac{-\lambda_A^{(j)} \lambda_A^{(p)} e^{\lambda_A^{(j)}(t-t')}}{(\lambda_A^{(j)} + \lambda_A^{(p)}) (\lambda_A^{(j)} + \lambda_B^{(p)})} + \frac{\lambda_B^{(j)} \lambda_B^{(p)} e^{\lambda_B^{(j)}(t-t')}}{(\lambda_B^{(j)} + \lambda_A^{(p)}) (\lambda_B^{(j)} + \lambda_B^{(p)})} \right] \\
& + \frac{T}{n^2} \frac{1}{m^2} \sum_{j=1}^n \sum_{p=1}^n \sum_{k \neq o} \frac{a^{(j-1)(i-k) + (p-1)(o-k)}}{(\lambda_A^{(j)} - \lambda_B^{(j)})} \\
& \times \left[\frac{-\lambda_A^{(j)} \lambda_A^{(p)} e^{\lambda_A^{(j)}(t-t')}}{(\lambda_A^{(j)} + \lambda_A^{(p)}) (\lambda_A^{(j)} + \lambda_B^{(p)})} + \frac{\lambda_B^{(j)} \lambda_B^{(p)} e^{\lambda_B^{(j)}(t-t')}}{(\lambda_B^{(j)} + \lambda_A^{(p)}) (\lambda_B^{(j)} + \lambda_B^{(p)})} \right]. \quad (16)
\end{aligned}$$

相関関数 (16) の右辺第一項が, 定数倍をのぞいて応答関数 (15) と一致していることが確認できる. この段階まででは, 非対称性と揺動散逸関係のやぶれとの関係がわかりづらいため, 具体的に $N=3$ の場合の結果から考察を行う.

3.2 $N = 3$ の場合の揺動散逸関係

3体の場合は見通しがよく、相関 $C_{11}(t)$ と応答関数 $\phi_{11}(t)$ には以下の関係がある：

$$\begin{aligned} C_{11}(t-s) &= \frac{T\gamma^2(\lambda_A + \lambda_B)}{2\gamma\left((\lambda_A + \lambda_B)\gamma^2 - \frac{m(\lambda_A - \lambda_B)^2}{2}\right)} \phi_{11}(t-s) \\ &+ \frac{T(\lambda_A - \lambda_B)\left(\sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_A}\sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_B}\right)^{-1}}{6\left((\lambda_A + \lambda_B)\gamma^2 - \frac{m(\lambda_A - \lambda_B)^2}{2}\right)} \\ &\times \left(\sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_B}\lambda_A e^{-\frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_A}}{2m}(t-s)} \right. \\ &\quad - \sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_B}\lambda_B e^{-\frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_A}}{2m}(t-s)} \\ &\quad - \sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_A}\lambda_A e^{-\frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_B}}{2m}(t-s)} \\ &\quad + \sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_A}\lambda_B e^{-\frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_B}}{2m}(t-s)} \\ &\quad \left. - \sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_A}\sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_B}\frac{(\lambda_A - \lambda_B)}{2\gamma} e^{-\frac{\gamma}{m}(t-s)} \right), \end{aligned}$$

ここで、応答関数 $\phi_{11}(t-s)$ と λ_A と λ_B は、

$$\begin{aligned} \phi_{11}(t-s) &= \frac{1}{6m\sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_A}\sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_B}} \\ &\times \left(\sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_B}\left(\sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_A} - \gamma\right) e^{-\frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_A}}{2m}(t-s)} \right. \\ &\quad + \sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_B}\left(\sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_A} + \gamma\right) e^{-\frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_A}}{2m}(t-s)} \\ &\quad + \sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_A}\left(\sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_B} - \gamma\right) e^{-\frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_B}}{2m}(t-s)} \\ &\quad + \sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_A}\left(\sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_B} + \gamma\right) e^{-\frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_B}}{2m}(t-s)} \\ &\quad \left. + 2e^{-\frac{\gamma}{m}(t-s)}\sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_A}\sqrt{\gamma^2 + 4m\lambda_B} \right). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \lambda_A &= -\frac{1}{2}\left(3 + i\sqrt{3}\right)k_L - \frac{1}{2}\left(3 - i\sqrt{3}\right)k_R, \\ \lambda_B &= -\frac{1}{2}\left(3 - i\sqrt{3}\right)k_L - \frac{1}{2}\left(3 + i\sqrt{3}\right)k_R. \end{aligned}$$

$(\lambda_A - \lambda_B) \neq 0$ では、右辺の2項目がゼロにならない。したがって、非対称散逸系では、有効温度などによる温度係数 $k_B T$ の補正を行なっても揺動散逸関係が満たされない。また、非対称性の度合い $k_L - k_R$ の大きさに比例して、第2項が大きくなっていくと考えられる。実際に数値計算での確認をおこなったところ、非対称性の度合いが大きくなるにしたがって、相関関数と応答関数の差が大きくなった。

4 まとめ

非対称散逸系である線形化された BL-OV モデルの相関関数と応答関数を解析的に計算した。 N 体の場合における相関関数と応答関数の関係を調べた。 $N = 3$ の場合を具体的に示し、非対称性の度合いが高ければ高いほど揺動散逸関係のやぶれが大きくなることを示した。揺動散逸関係のやぶれを物理的に解釈することを考えた場合、原田と佐々の関係式 $\langle J_i(t) \rangle_{eq} = \gamma_i \left\{ \bar{v}_i^2 + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} [\tilde{C}_{ii}(\omega) - 2T\tilde{R}'_{ii}(\omega)] \right\}$ (文献 [3]) を用いることができるであろう。ここで、 J_i は関本によって提案された、 i 番目の座標からの外系へのエネルギー散逸 [4] (外系が熱環境なら、熱流)、 $J_i(t)\Delta t \equiv \int_t^{t+\Delta t} [\gamma_i v_i(s) - \xi_i(s)] \circ dx_i(s)$ を表している。この解釈は一見リーズナブルに思える。しかし、線形化された BL-OV は、そのままではラグランジュ関数を持たないことが示せるため、 J_i をナイーブな意味でのエネルギー散逸と考えて良いかどうかは、異なる視点での正当化が必要に思える。

今後の展望として、 N 体の場合における非対称性度合いと揺動散逸関係の破れの度合いとの関係を明らかにすることが考えられる。また、解析計算からもとまった値と、線形化する前の非線形項を含む BL-OV での数値シミュレーションの結果とを比較して、非線形性の効果と非対称性の効果の関係を探りたい。

さらなる展望として、元の BL-OV に見られる定常流解ではない動的平衡状態を基準として揺動散逸関係を調べることを考えている。

謝辞

第23回の交通流シンポジウムにて、 N 体での解析についての可能性について有用なコメントをくださった湯川論先生に感謝申し上げます。

参考文献

- [1] Yuki Sugiyama. In *Natural Computing*, pages 189–200. Springer, Tokyo, Tokyo, 2009.
- [2] Akihiro Nakayama, Yuki Sugiyama, and Katsuya Hasebe. *Physical Review E*, 65(1):016112, 2001.
- [3] Takahiro Harada and Shin-ichi Sasa. *Physical Review E*, 73(2):026131, 2006.
- [4] Ken Sekimoto. *Journal of the Physical Society of Japan*, 66(5):1234–1237, 1997.