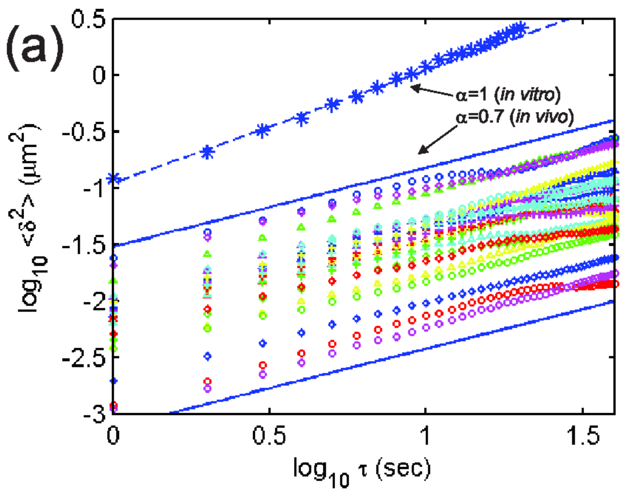
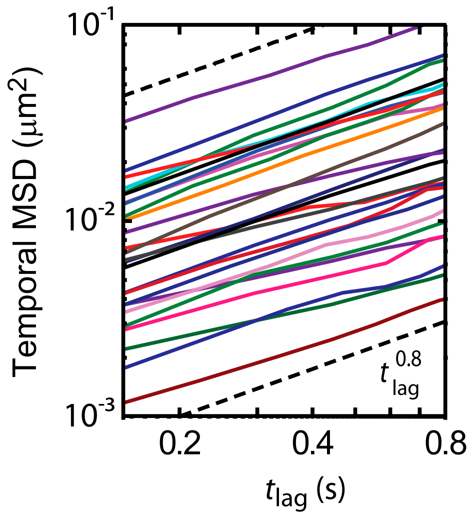
異常拡散における
長時間平均量の分布極限法則

ー非再現性の中の分布的な再現性ー





慶應義塾大学理工学研究科　秋元　琢磨

第２回統計物理学懇談会@学習院大学２０１４年３月１１日（火）

再現性（エルゴード性）

任意の初期条件に対して、長時間観測すれば、観測量が同じ値に収束するとき、再現性（エルゴード性）があるという。

$$\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} \boxed{f(x_k)} \to \langle f \rangle_{eq} \quad \text{as } n \to \infty$$

観測関数

例えば、<u>平均２乗変位</u>

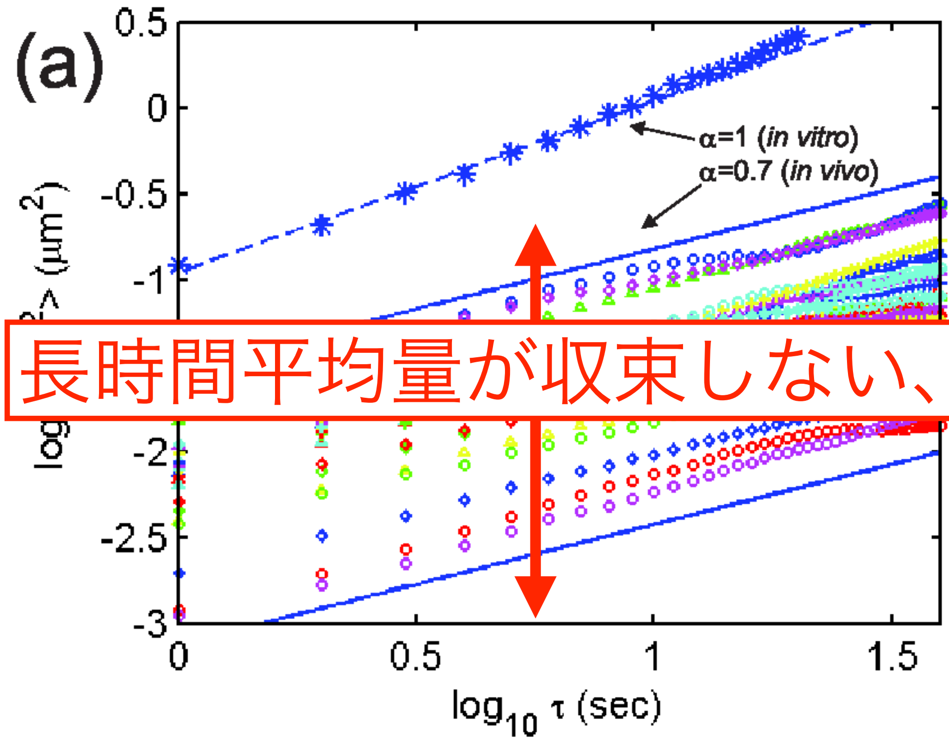
$$\overline{\delta^2(\Delta;t)} \equiv \frac{1}{t-\Delta}\int_0^{t-\Delta} \{x(t'+\Delta) - x(t')\}^2 dt'$$

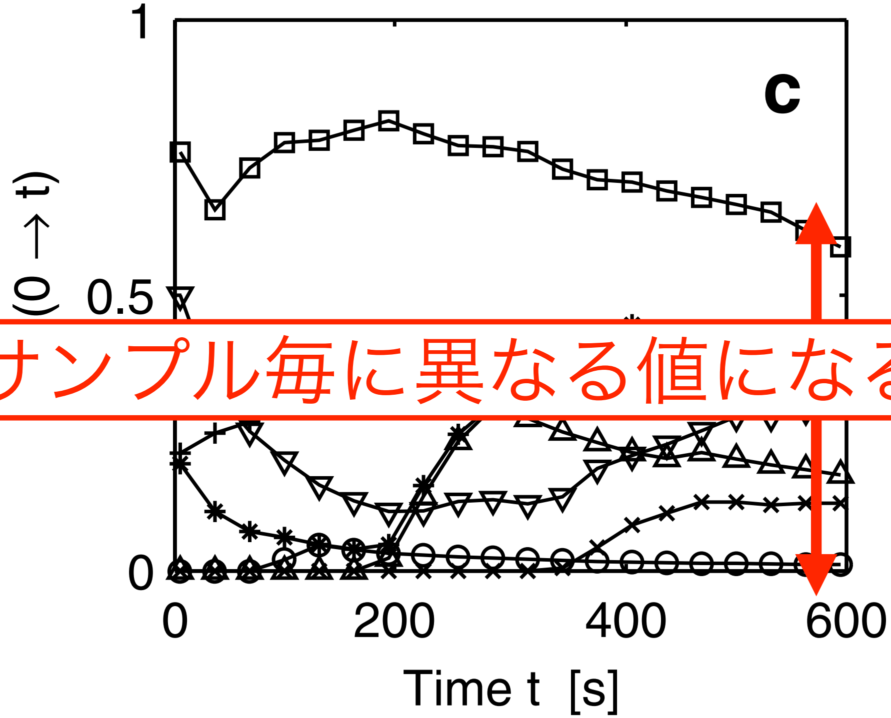
$$\to \langle x(\Delta)^2 \rangle \quad \text{as } t \to \infty$$

非再現性
（エルゴード性の破れ）

$$\overline{\delta^2(\Delta;t)} \equiv \frac{1}{t-\Delta}\int_0^{t-\Delta}\{x(t'+\Delta)-x(t')\}^2 dt'$$

$$\Phi_{\mathrm{on}}(t) \equiv \frac{1}{t}\int_0^t I(t')dt'$$



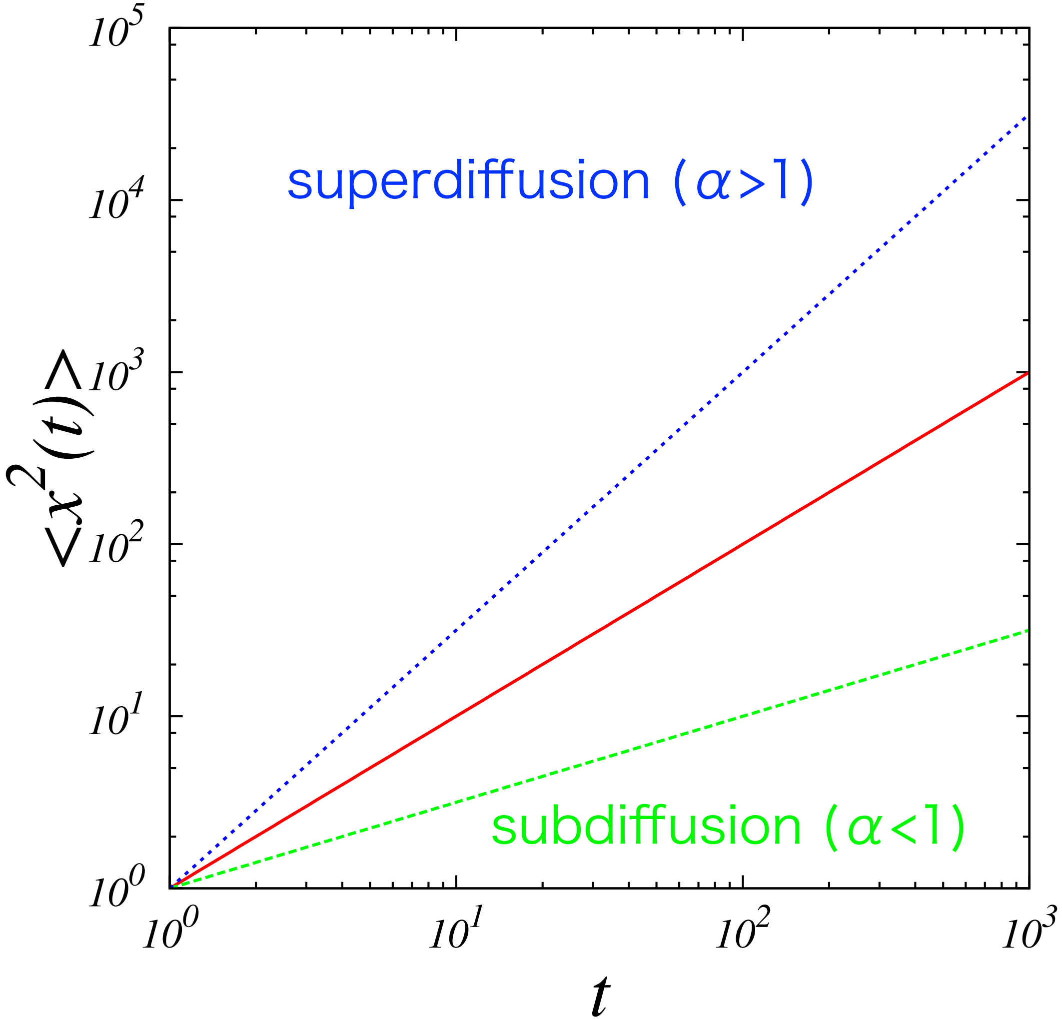


長時間平均量が収束しない、サンプル毎に異なる値になる

I. Golding and E. C. Cox, PRL **96**, 098102 (2008)

X. Brokmann et al., PRL **90**, 12601 (2003)

異常拡散



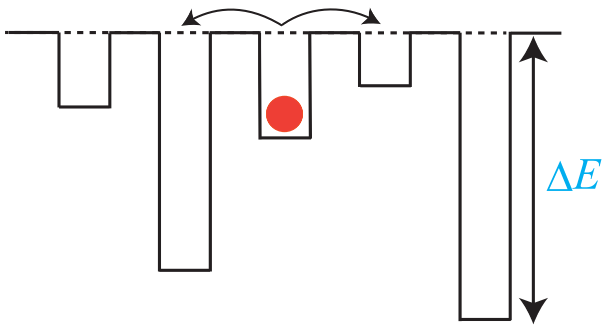
$$
\begin{cases}
\langle x_t \rangle = 0 \\
\langle x_t^2 \rangle \simeq D_\alpha t^\alpha \quad (t \to \infty)
\end{cases}
$$

αが１でない拡散を異常拡散と呼ぶ

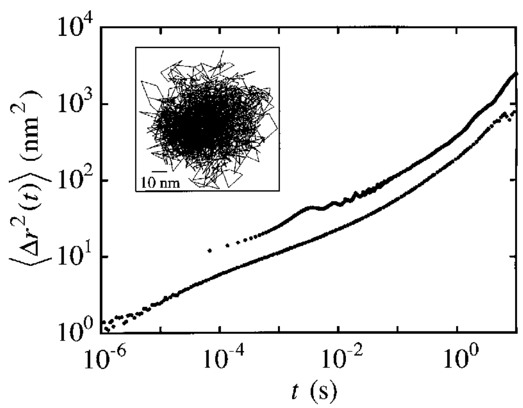
遅い拡散のメカニズム

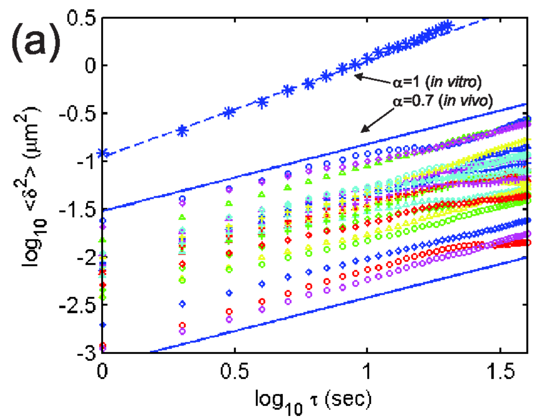
- アモルファス材料における荷電粒子の輸送（トラップモデル）
  平均待ち時間の発散
- からみあった高分子溶液中の拡散（粘弾性）
  相関のあるノイズに駆動されるブラウン運動
- 細胞内における生体分子の拡散（粘弾性 or トラップモデル）

トラップモデル



粘弾性





H. Scher and E. Montroll, PRB **12**, 2455(1975)

T. G. Mason et al, PRL **79**, 3282(1997)

I. Golding and E. C. Cox, PRL **96**, 098102 (2008)

目的

非再現性（エルゴード性の破れ）の起源は何か？

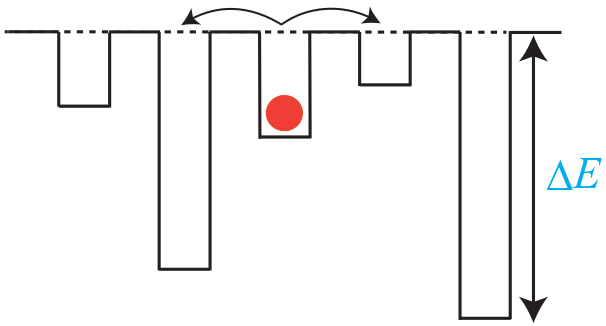
非再現性を示す現象を分布としてとらえたとき、
普遍分布は存在するか？そして、それは何か？

トラップモデルを例として、非再現性が本質的に
現れることを示し、その分布を明らかにする。

モデル

- RWSD (Random walk with static disorder)
- CTRW (Continuous-time random walk)
- SEDLF (Stored-energy-driven Levy flight)

待ち時間はランダムだが各
サイト毎に決まっている



RWSD

粗視化

待ち時間は完全にランダム
(同じサイトでもランダム)

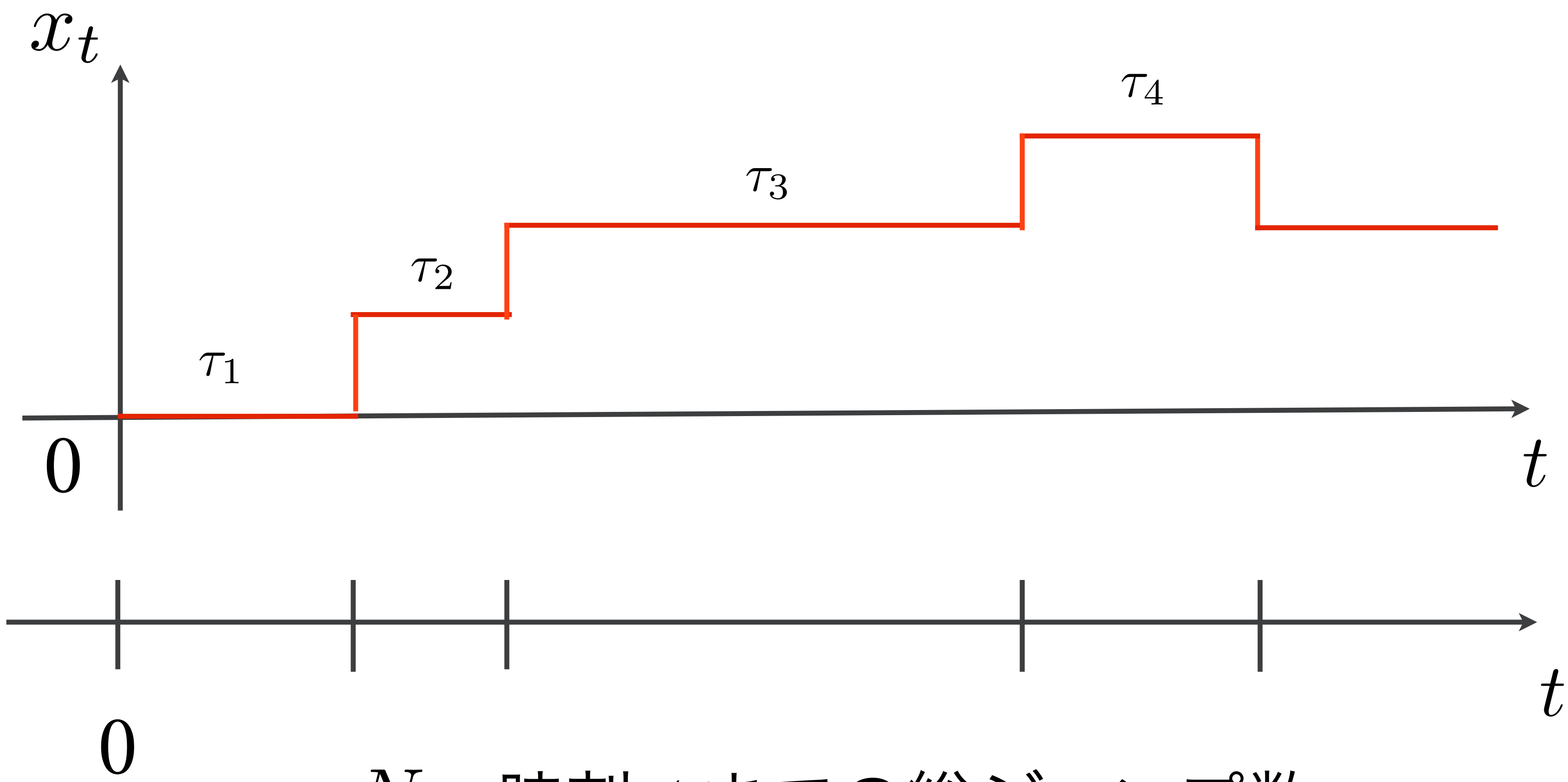
CTRW

待ち時間分布はベキ分布

$$\psi(\tau) \propto \tau^{-1-\alpha}$$

Y. He et al., PRL **101**, 058101 (2008)

CTRWと更新過程



N_t: 時刻 t までの総ジャンプ数

$$\boxed{\langle x_t^2 \rangle = \langle \delta^2 \rangle \langle N_t \rangle}$$

平均２乗変位

待ち時間分布

$$\psi(\tau) \sim \frac{\alpha c^\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} \tau^{-1-\alpha} \quad (\tau \to \infty)$$

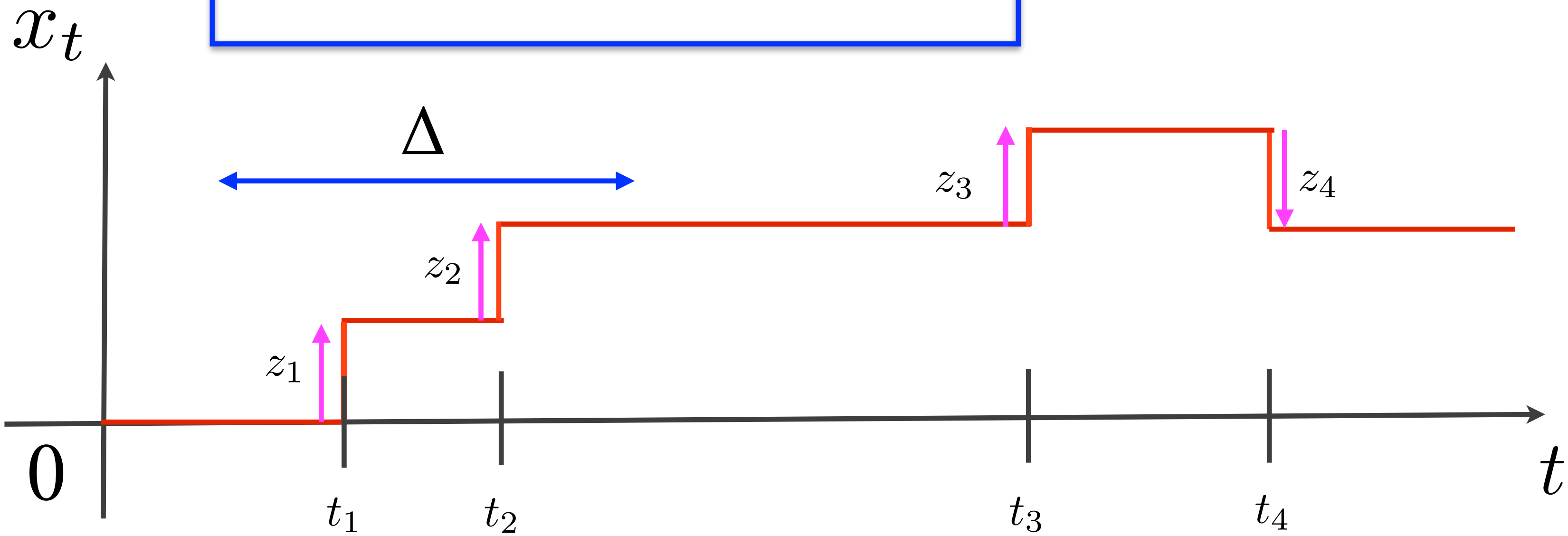
Laplace変換

$$\hat{\psi}(s) = \begin{cases} 1 - \langle \tau \rangle s + (cs)^\alpha + o(s^\alpha) & (1 < \alpha < 2) \\ 1 - (cs)^\alpha + o(s^\alpha) & (\alpha < 1) \end{cases}$$

$$\boxed{\langle x_t^2 \rangle \sim \begin{cases} \dfrac{\langle \delta^2 \rangle}{\langle \tau \rangle} t & (1 < \alpha) \\ \dfrac{\langle \delta^2 \rangle}{\Gamma(\alpha+1)} \left(\dfrac{t}{c} \right)^\alpha & (\alpha < 1) \end{cases}}$$

（時間）平均２乗変位

$$x(t'+\Delta)-x(t')=\sum_{k=1}^{\infty} z_k I(t'<t_k<t'+\Delta)$$

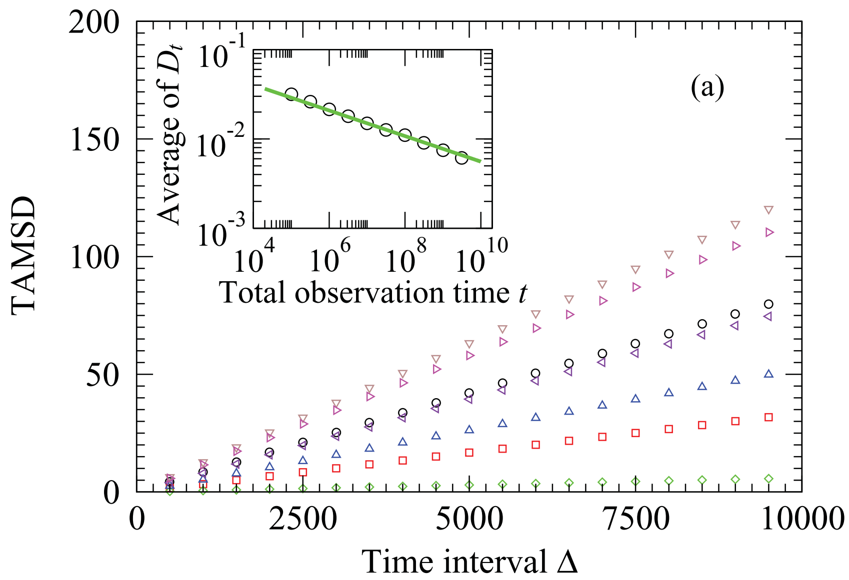


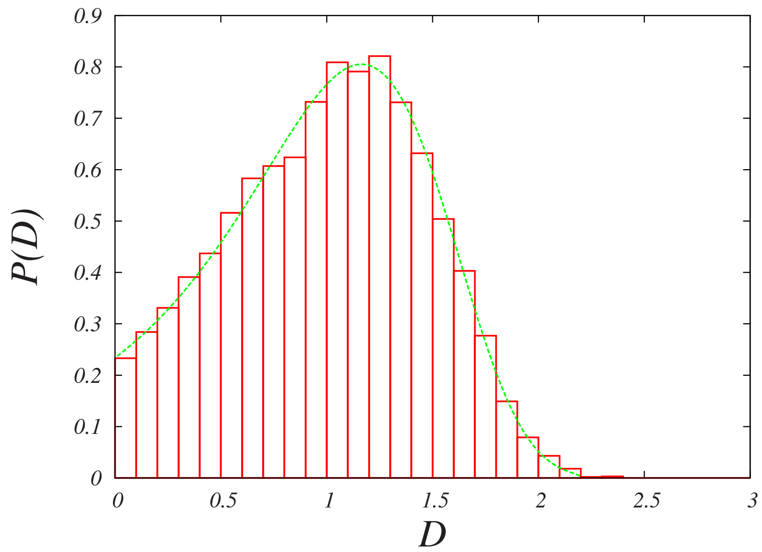
TAMSD（時間平均された平均２乗変位）はノーマル

$$\overline{(\delta x)^2}(\Delta,t)\approx\frac{1}{t}\sum_{k=1}^{N_t}\left[\Delta z_k^2+2\sum_{l=1}^{k-1}z_k z_l\theta(\Delta-(t_k-t_l))\right]=\frac{N_t}{t}\langle z_k^2\rangle\Delta$$

TAMSDの振る舞い

分布的再現性





ノーマル拡散だが、拡散係数が軌道毎に異なる。

$$\boxed{D_t \equiv \frac{\overline{\delta^2(\Delta;t)}}{\Delta} \Rightarrow t^{-\beta}\mathbf{D} \quad (t \to \infty)}$$

相対標準偏差

$$R(t)=\frac{\sqrt{\langle\overline{\delta^2}(\Delta,t)^2\rangle-\langle\overline{\delta^2}(\Delta,t)\rangle^2}}{\langle\overline{\delta^2}(\Delta,t)\rangle}\sim\begin{cases}\sqrt{\dfrac{\langle\tau^2\rangle-\langle\tau\rangle^2}{\langle\tau\rangle}t^{-1/2}} & (2<\alpha)\\[2ex] \sqrt{\dfrac{1}{(2-\alpha)(3-\alpha)\langle\tau\rangle}t^{(1-\alpha)/2}} & (1<\alpha<2)\\[2ex] \sqrt{\dfrac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(2\alpha+1)}-1} & (\alpha<1)\end{cases}$$

αが１より小さいとき（平均待ち時間が発散）、TAMSDは本質的に揺らぐ

一般化された中心極限定理

$\mathbf{X}_1, \cdots, \mathbf{X}_n$ は、独立な確率変数でベキ分布に従うとする。

$$\int_x^\infty \psi(x')dx' \sim \frac{x^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} \quad (x \to \infty)$$

このとき、$(\mathbf{X}_1 + \cdots + \mathbf{X}_n)/n^{1/\alpha}$ は安定分布に従う。

$$\int_0^\infty g_\alpha(x) e^{-sx} dx = \exp(-s^\alpha)$$

$$\int_x^\infty g_\alpha(x')dx' \sim \frac{x^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} \quad (x \to \infty)$$

更新理論

$$\Pr(N_t > n) = \Pr(t_n < t)$$

$$\begin{aligned}\Pr\left(\frac{N_t}{t^\alpha} > \frac{n}{t^\alpha}\right) &= \Pr\left(t_n < n^{1/\alpha} x^{-1/\alpha}\right) \\ &= \Pr\left(\frac{t_n}{n^{1/\alpha}} < x^{-1/\alpha}\right) \\ &\to \int_0^{x^{-1/\alpha}} g_\alpha(x')dx'\end{aligned}$$

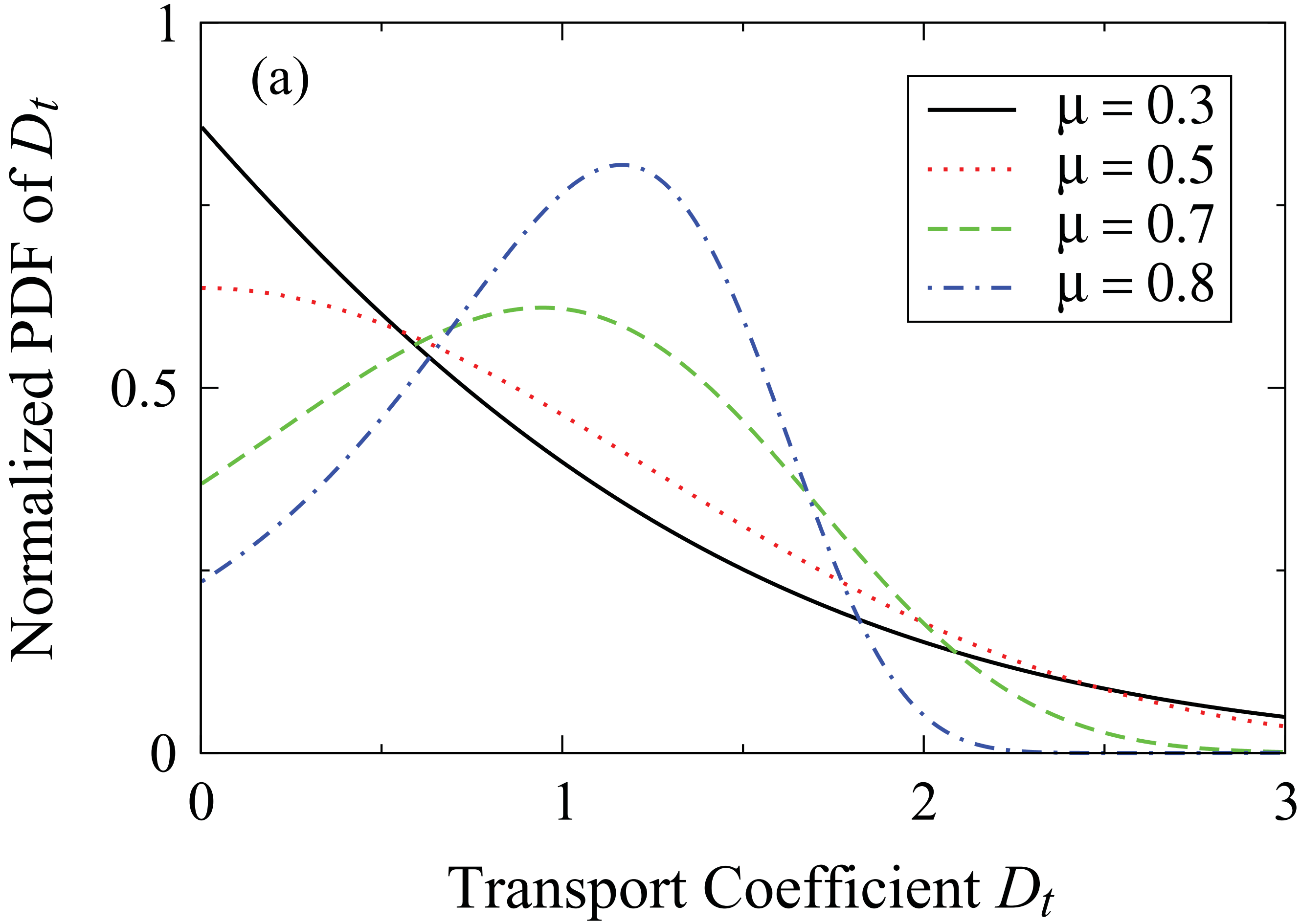
$$\boxed{x \equiv \frac{n}{t^\alpha}}$$

Mittag-Leffler分布

$\overline{\delta^2(\Delta;t)} = \dfrac{N_t}{t}\Delta$ より、拡散係数は本質的にランダムになる

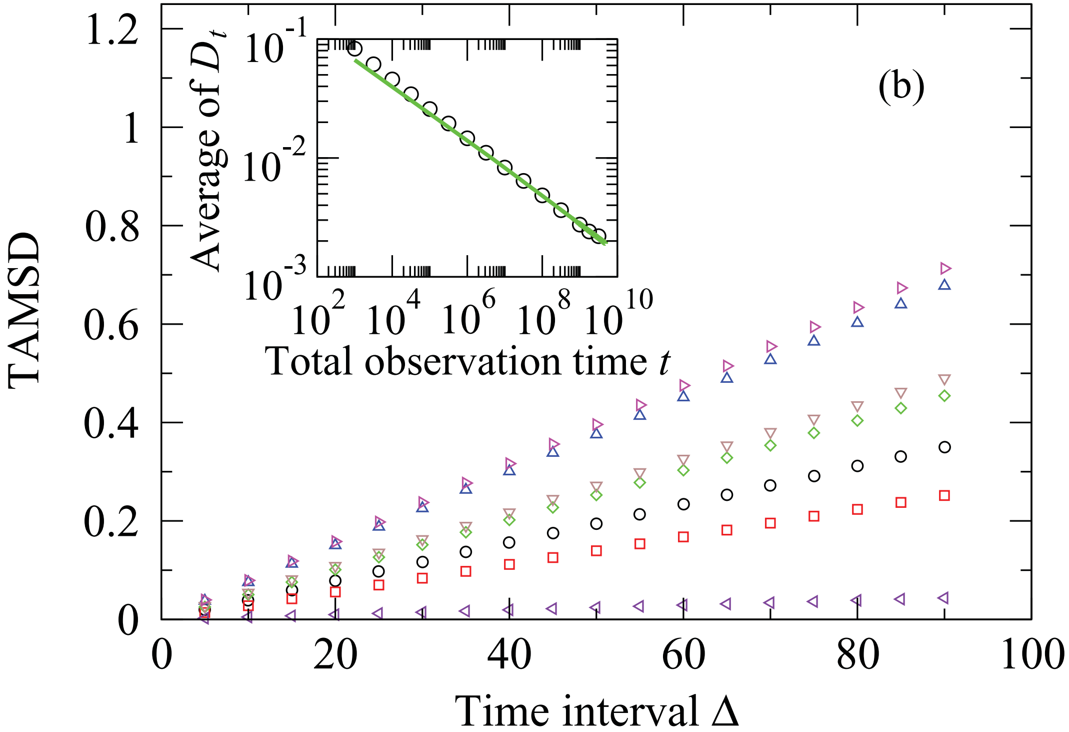
Mittag-Leffler分布

指数分布の一般化（α=0は指数分布、α=0.5はハーフガウシアン）



エイジング

拡散係数の平均（アンサンブル平均）は、観測時間に依存する（観測時間と共に減衰する）



$$\overline{\delta^2(\Delta;t)} = D_t \Delta$$

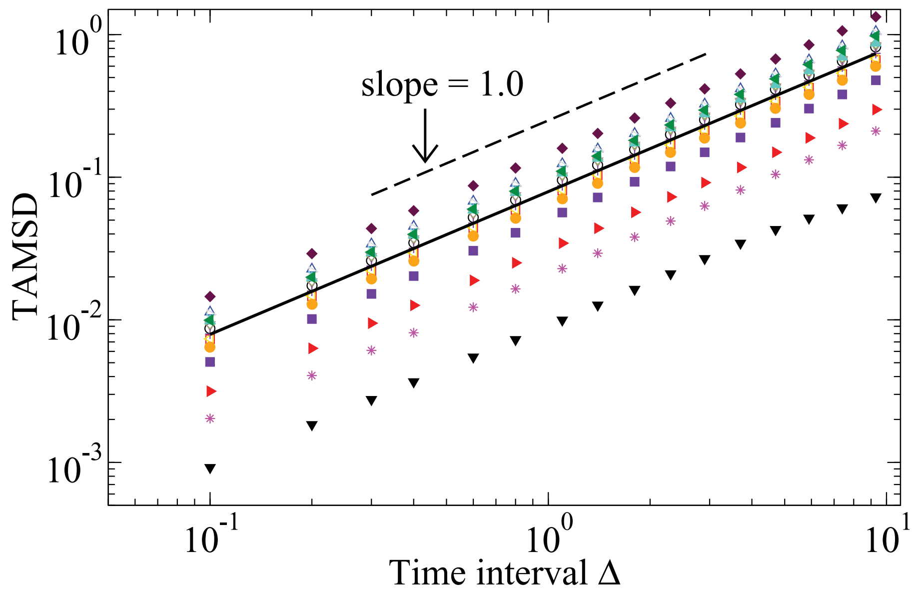
$$\langle D_t \rangle \propto t^{-(1-\alpha)}$$

カットオフの影響

待ち時間分布にカットオフがあるとき（多くの現象には有限性よりカットオフがある）、TAMSDの振る舞い（再現性）はどのようになるか？

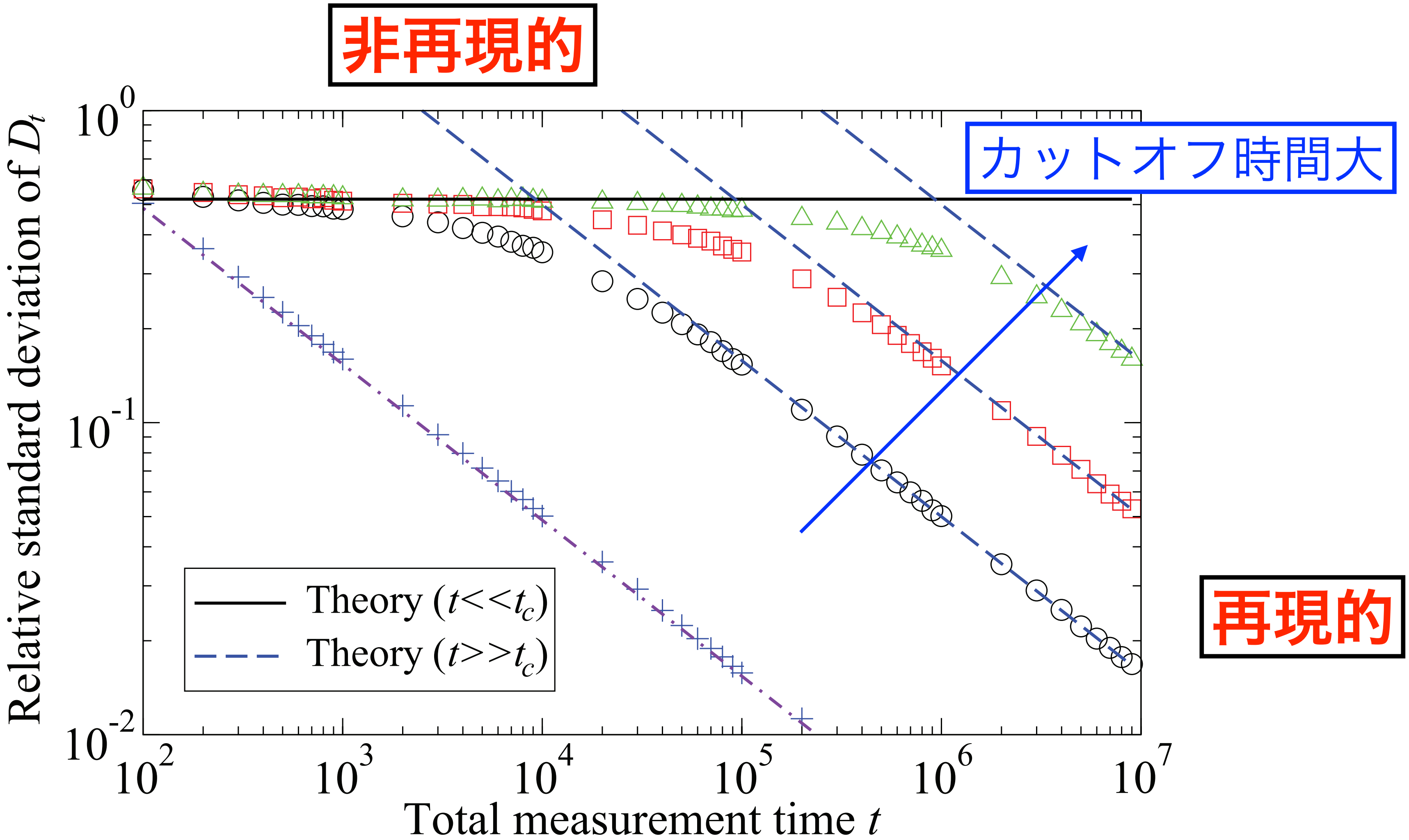
$$\tilde{P}_{\mathrm{TL}}(s,\lambda) = \exp\{-c[(\lambda+s)^{\alpha} - \lambda^{\alpha}]\},$$

$$\Rightarrow \quad \psi(\tau) \propto \begin{cases} \tau^{-1-\alpha} & (\tau \ll 1/\lambda) \\ \exp(-\lambda\tau) & (\tau \gg 1/\lambda) \end{cases}$$



観測時間がカットオフ時間より小さいとき、非再現的になる

非再現性から再現性へのクロスオーバー



T. Miyaguchi and TA, PRE **83**, 062101 (2011)

他のモデル

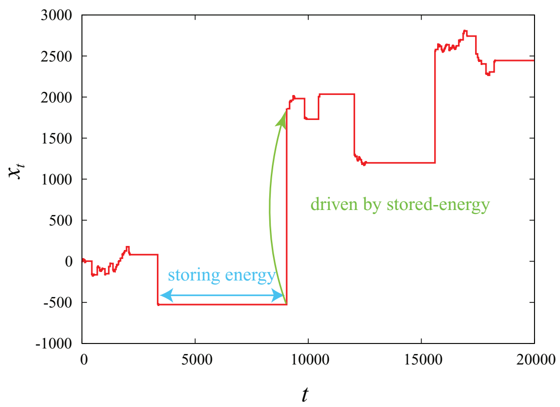
- **RWSD (Random walk with static disorder)**

TAMSDは線形に増大する。
２次元以上では、拡散係数の分布はCTRWと同じになるが、1次元だと異なる分布になる。分布的再現性の起源は同じ（平均待ち時間の発散）

T. Miyaguchi and TA, PRE **83**, 031926 (2011)

- **SEDLF (Stored-energy-driven Levy flight)**

ジャンプ幅と待ち時間のカップルにより生じる大数の法則の破れ

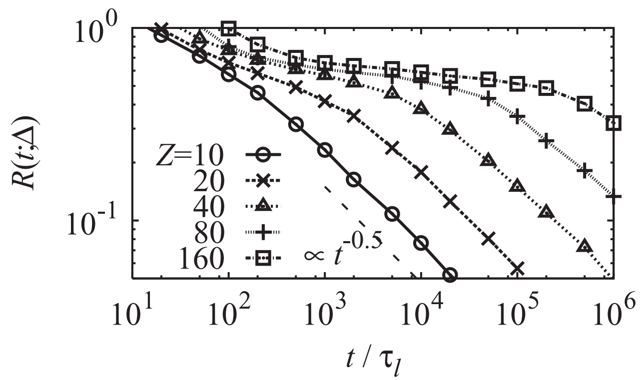


TA and T. Miyaguchi, PRE **87**, 062134 (2013)

Discussion

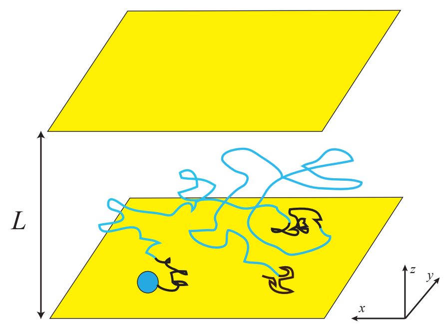
CTRWを例として、分布的再現性が本質的に現れる事を示した。分布的再現性の起源は、平均待ち時間が発散する事による大数の法則の破れである。他にも、

- ジャンプ幅の2次モーメントの発散
- ジャンプ幅と待ち時間とのカップル
- 時間的にランダムに拡散係数が変化する系（過渡的）



レプテーションモデルのRSD

T. Uneyama, TA, and T. Miyaguchi, JCP **137**, 114903 (2012)



表面とバルクで拡散係数が異なる

まとめ

拡散係数が観測毎に変化する（非再現性）

拡散係数の分布は普遍的（分布的再現性）