

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 8 月 8 日現在

機関番号：32612

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2016

課題番号：26800204

研究課題名(和文)非熱的拡散現象におけるエルゴード特性とその応用

研究課題名(英文)Ergodic properties in athermal diffusion processes and its applications

研究代表者

秋元 琢磨(Akimoto, Takuma)

慶應義塾大学・理工学研究科(矢上)・特任准教授

研究者番号：30454044

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,700,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、揺動散逸関係が破れているような拡散過程における拡散性を特徴づける平均2乗変位のエルゴード特性を明らかにする事、そして、データ解析に応用することを目的として、待ち時間に応じてジャンプの大きさが決まる非熱的な揺動力で駆動されるランダムウォークや拡散係数が時間的に変化するブラウン運動を用いたモデルを考え、時間平均で定義された平均2乗変位のエルゴード特性(平均2乗変位やその揺らぎの観測時間依存性)や初期アンサンブル依存性を解析的に明らかにした。これらの成果は、Phys. Rev. EやJ. Stat. Mech.などの雑誌に出版され、いくつかの国際会議で成果発表を行った。

研究成果の概要(英文)：Purpose of our research project is to clarify ergodic properties of time-averaged mean square displacement characterizing diffusivity of systems in non-thermally driven diffusion processes, where fluctuation-dissipation relation is broken. We consider a random walk model where the jump length is coupled to the waiting time and a Brownian motion where the diffusion coefficient changes randomly with time. We analytical showed the ensemble average and the relative standard deviation of time-averaged mean square displacement as a function of the measurement time and its initial ensemble dependency. Our works have been published in Phys. Rev. E and J. Stat. Mech. and I gave presentations on this issue in international conferences.

研究分野：統計物理学

キーワード：異常拡散 エルゴード特性 非熱的な拡散

1. 研究開始当初の背景

ロバート・ブラウンは、生命を持たない物質でも生命力溢れるジグザグした運動を起こすことを顕微鏡により観測し、発見した。このランダムな運動(ブラウン運動)の発見以来、拡散現象の実験的・理論的理解は著しく深まってきている。微粒子が示す複雑な運動であるブラウン運動は、回りの環境を構成する溶媒分子との衝突が物理的な機構であることがわかっており、その揺動力は溶媒の温度に依存して決定される。このような熱的な揺動によって駆動される運動は、確率微分方程式として記述され、揺動力と摩擦力(散逸)は揺動散逸関係によって結ばれている。

一方、ターゲットがどこにあるかわからないときにターゲットを探る過程(例えば、生物の採餌活動)や細胞内の拡散では、熱的な揺動力ではなくアクティブに駆動された運動を行う。このような運動では、通常のブラウン運動とは異なり、揺動散逸関係は成立しないような揺動力が重要な役割を果たしていると考えられている。

このような非熱的な揺動力によって駆動される拡散過程では、様々な異常性が現れると予想される。例えば、通常のブラウンでは粒子の位置の変位の2乗の平均値(平均2乗変位)は時間に対して線形に増大するが、生きた細胞内におけるたんぱく質の拡散では、平均2乗変位は線形ではなく劣線形に(1より小さいベキ指数を持つ関数で)増加することがわかっている。さらに、観測時間を長くすると拡散性が減少するというエイジング現象も実験的に観測されている。このような異常性は、均一な環境下での拡散では生じることはないものであり、不均一な環境下での拡散過程の理論に注目が集まっている。

2. 研究の目的

本研究では、不均一な環境下での拡散現象をその本質的な要素を取り込んだ確率モデルを考え、その理論を構築することを第一の目的とし、その理論を実験系と比較することにより異常拡散現象の物理的なメカニズムを明らかにすることを目的としている。

(1) 確率モデルの理論構築

待ち時間とジャンプの大きさがカップルしたランダムウォークモデルを考え、すべてのパラメータ領域においてアンサンプル平均と時間平均で定義された平均2乗変位を理論的に計算し、拡散の異常性を明らかにする。特に、時間平均で定義された平均2乗変位の観測時間の依存性やアンサンプル平均と時間平均が一致するかどうか(エルゴード性)を明らかにする。また、ランダムウォークモデルを拡張した拡散係数が時間的に変化するブラウン運動のモデルにおいても同じような解析を行い、拡散の異常性を明らか

にすることも目的となっている。

(2) 実験データ解析への応用

本研究で扱う確率モデルでは、待ち時間とジャンプの大きさ(活動度)がカップルした拡散過程であるため、そのようなカップリングを持つ現象に応用可能であると考えられる。そのような待ち時間と活動度がカップルした系として、化学反応に基づいて駆動されるゲルの運動や地震現象を考え、待ち時間と活動度や地震の発生間隔とそのマグニチュードとの関係などを明らかにするための解析手法を提案することも目的としている。

3. 研究の方法

連続時間ランダムウォークでは、ランダムウォーカーはランダムな時間(待ち時間)だけ待ってランダムな方向へジャンプしながら拡散していく。このとき、ジャンプの大きさと待ち時間は無相関であるが、本研究ではジャンプの大きさを待ち時間とカップルしたモデルを考える。具体的には、ジャンプの大きさは待ち時間のベキ乗で与えられるとする。このベキ指数はモデルのパラメータの一つである。もう一つのパラメータとして、待ち時間分布のパラメータがある。本研究では、待ち時間分布としてベキ分布を考えるため、このベキ指数がもう一つのパラメータである。このモデルに対して、位置の確率密度関数が満たす方程式を導出し、ラプラス空間で方程式を解く。このラプラス空間での解はモーメントを生成する母関数の役割を果たしているため、そこから任意のモーメントを解析的に導出する。時間平均で定義された平均2乗変位は、観測時間内でのジャンプ数とジャンプの大きさと関係づけられるため、更新理論を拡張して理論を構築する。

拡散係数が時間変化するブラウン運動モデルに関しては、待ち時間(拡散係数が変化しない時間)と拡散係数がカップルした系では、上で考えたランダムウォークモデルと関係していることを明らかにする。時間平均で定義された平均2乗変位のエルゴード性を判定するため、相対標準偏差の観測時間依存性を計算する。もしエルゴード的であるならば、この相対標準偏差は観測時間を増加させるにつれてゼロに収束する。

データ解析への応用については、化学反応により駆動されるゲルの運動と地震現象のデータを考える。ゲルの運動に関しては、時間平均で定義された平均2乗変位を実験で得られたそれぞれの軌跡に対して計算する。そして、実験を繰り返すことにより、上述の相対標準偏差やエイジングプロット(時間平均で定義された平均2乗変位において時間差を固定して、さらにアンサンプル平均を取り、観測関数の依存性を明らかにする。地震現象については、気象庁により公開されている地震の発生時間や強度に関するデータを取得し、発生間隔時間と強度(マグニチュー

ド)を明らかにする。

4. 研究成果

連続時間ランダムウォークを拡張し、ジャンプの大きさを待ち時間とカップルしたモデルを提案し、最初の待ち時間分布を一般化することにより、位置の確率密度関数の時間発展を記述する方程式 (Montrol-Weiss 方程式) を厳密に導出した。そして、アンサンプル平均で定義された平均 2 乗変位と時間平均で定義された平均 2 乗変位を解析的に明らかにした。具体的には、アンサンプル平均で定義された平均 2 乗変位は、待ち時間のベキ指数とカップリングの指数に依存して、遅い拡散 (平均 2 乗変位が劣線形に増大) や速い拡散 (平均 2 乗変位が線形より速く増大) を示すことがわかった。そして、時間平均で定義された平均 2 乗変位は、常に (パラメータに依らず) 線形に増大することを明らかにした。このとき、比例係数 (拡散係数) が観測時間に強く依存したり、分布的な振る舞いを示すパラメータ領域があることがわかった。全パラメータ領域でアンサンプル平均と時間平均で定義された平均 2 乗変位のエルゴード特性を計算することでこのモデルの相図を完成させた (文献)。ここで、最初の待ち時間を平衡化させることにより、アンサンプル平均と時間平均が一致することを示すことができた。これらの成果は、学術論文として出版 (文献) しただけでなく、いくつかの国際会議 (学会発表) でも発表を行い、成果を広めることができた。

拡散係数が時間変化するブラウン運動モデル (Langevin equation with fluctuating diffusivity; LEFD) に関しては、二つの異なるモデルを考えた。一つは、拡散係数が 2 状態を取り、各状態がランダムな時間待ってからもう一つの状態へ遷移するモデルである。もう一つは、拡散係数が待ち時間に依存して決まるモデル (Annealed transit time model; ATTM) である。

LEFD は、過冷却液体における動的不均一性や内部状態を持つ拡散過程の簡易モデルである。からみあい高分子の確率モデルであるレプテーションモデルにおける高分子の重心運動は、この LEFD で記述される。LEFD の特徴は、拡散係数の揺らぎが定常であれば、平衡化することで常に通常の拡散になり、エルゴード的である。しかし、拡散係数の揺らぎの情報は、長時間平均で定義された平均 2 乗変位の高次モーメントに含まれていることがわかってきた (T. Uneyama, T. Miyaguchi, and T. Akimoto, Phys. Rev. E **92**, 031140 (2015))。具体的には、長時間平均で定義された平均 2 乗変位の相対標準偏差を観測時間の関数でプロットすることにより、フラットな領域から時間に対して減衰する領域へと変化し、そのクロスオーバー点が拡散係数の揺らぎのタイムスケールを表していることが明らかになってきた。このモデルの特別

な状況として、拡散係数が二つの異なる値のみを取る場合を詳細に調べた。まず、拡散係数の揺らぎが定常な場合には、長時間平均で定義された平均 2 乗変位の相対標準偏差や変位の確率密度関数 (プロパゲータ) を更新理論を 2 状態へ拡張することにより解析的に明らかにした (T. Miyaguchi, T. Akimoto, and E. Yamamoto, Phys. Rev. E **94**, 012109 (2016))。さらに、拡散係数が非定常に揺らいでいる場合にも、長時間平均で定義された平均 2 乗変位の相対標準偏差が一定値には収束せず、分布的な振る舞いを示すことを明らかにした (文献)。

ATTM は、拡散係数の大きさが待ち時間に依存して決まる (具体的には、長い待ち時間程拡散係数は小さい) モデルであり、拡散係数が不均一に分布した環境下でのモデルとなっている。このモデルは、細胞内における膜たんぱく質の拡散の実験データをよく再現できることが知られており、新しい異常拡散のモデルとして注目されている。一方でこのモデルは、LEFD の特別なものであり、我々が解析してきた長時間平均で定義された平均 2 乗変位の相対標準偏差がここでも重要な役割を果たしていると考えられ、文献でこのモデルの詳細を解析的に明らかにした。本研究の結果は、先行研究の結果を再現するだけでなく長時間平均で定義された平均 2 乗変位の相対標準偏差やそれまで考えられていない定常な過程でも計算を行い、エルゴード性やエイジングを明らかにした。

本研究で得られたこれらの解析結果により、実験データから計算可能な統計量である長時間平均で定義された平均 2 乗変位の相対標準偏差という量が拡散係数の揺らぎを明らかにする上で重要な役割を果たしていることを示すことができた。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 16 件)

T. Akimoto and E. Yamamoto, Distributional behavior of diffusion coefficients obtained by single trajectories in annealed transit time model, *J. Stat. Mech.* **2016**, P123201 (2016), 査読有。

T. Akimoto and E. Yamamoto, Distributional behaviors of time-averaged observables in Langevin equation with fluctuating diffusivity: Normal diffusion yet anomalous fluctuations, *Phys. Rev. E* **93**, 062109 (2016), 査読有。

T. Akimoto, S. Shinkai and Y. Aizawa, Distributional behavior of time averages non-L1 observables in one-dimensional intermittent maps

with infinite invariant measures, *J. Stat. Phys.* **158**, 476 (2015), 査読有.
T. Akimoto and T. Miyaguchi, Phase diagram in stored-energy-driven Levy flight, *J. Stat. Phys.* **157**, 515 (2014), 査読有.

〔学会発表〕(計 38 件)

T. Akimoto, Fluctuation analysis of time-averaged mean square displacements, *Workshop on Stochasticity and Fluctuations in Small Systems*, POSTECH (Korea), 2016 年 11 月 30 日.

T. Akimoto, General Framework for the Propagator in Heterogeneous Diffusion Processes, *WE-Heraeus-Seminar on "Quantifying Complex Transport with Levy Walks: From Cold Atoms to Humans and Robots"*, Bad Honnef (Germany), 2016 年 5 月 25 日.

T. Akimoto, E. Yamamoto, and T. Miyaguchi, Anomalous dynamics of Langevin equation with fluctuating diffusivity in equilibrium case and non-equilibrium case, *Anomalous diffusion: wild and bad? Fundamentals & models for modern complex systems*, Bad Wildbad (Germany), 2015 年 10 月 4 日.

T. Akimoto, E. Yamamoto, and T. Miyaguchi, Fluctuations of time-averaged diffusion coefficients in annealed transit time model, *KIAS workshop on anomalous dynamics in biological systems*, Seoul (Korea), 2015 年 9 月 4 日.

T. Akimoto, E. Yamamoto, and T. Miyaguchi, Distributional limit theorems in Langevin equation with fluctuating diffusivity, *New Frontiers in Non-equilibrium Physics 2015 -Nonequilibrium Statistical Physics-* 京都大学 (京都府・京都市), 2015 年 7 月 28 日.

T. Akimoto, E. Yamamoto, and T. Miyaguchi, Anomalous fluctuations in inhomogeneous diffusion processes, *Stochastic modeling of anomalous dynamics in complex physical and biological systems*, Wroclaw (Poland), 2015 年 5 月 15 日.

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況 (計 0 件)

名称 :

発明者 :
権利者 :
種類 :
番号 :
出願年月日 :
国内外の別 :

取得状況 (計 0 件)

名称 :
発明者 :
権利者 :
種類 :
番号 :
取得年月日 :
国内外の別 :

〔その他〕
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

秋元 琢磨 (AKIMOTO, Takuma)
慶應義塾大学・理工学研究科・特任准教授
研究者番号 : 30454044

(2) 研究分担者

()

研究者番号 :

(3) 連携研究者

()

研究者番号 :

(4) 研究協力者

()