化学反応，交通渋滞そして界面成長[*]

市野 悠

August 26, 2008

1　Burgers セルオートマトン

交通渋滞のような非平衡相転移現象のモデルとして，Burgers セルオートマトン（CA）というものがある．これは式

$$U_j^{t+1} = U_j^t + \min(U_{j-1}^t, 1 - U_j^t) \\ - \min(U_j^t, 1 - U_{j+1}^t)$$

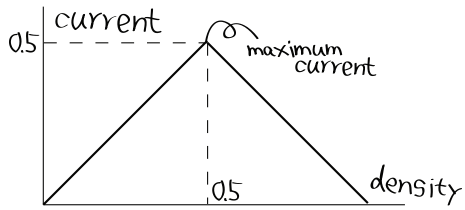
で表される局所性をもつ CA で，1+1 次元の Burgers 方程式の超離散化である．U_i はサイト i に車がいるかいないかを bool で表現している．ここで超離散化の知識がなくとも，$U \in \{0, 1\}$ であるから場合分け（Wolfram ルール[*1]）によって理解すればよい．

$$\frac{U_{j-1}^t U_j^t U_{j+1}^t}{U_j^{t+1}} = \frac{111}{1}, \frac{110}{0}, \frac{101}{1}, \frac{100}{1}, \\ \frac{011}{1}, \frac{010}{0}, \frac{001}{0}, \frac{000}{0}.$$

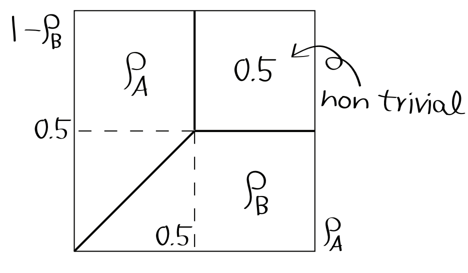
WS では，このルールに基づいて適当な初期状態を時間発展させると渋滞に対応する衝撃波解が現れることを確認した．

2　渋滞転移

次に Wolfram 社の作ったデモアプリケーション[*2]を使って初期状態の密度 ρ を変えることによって，定常状態がどのような変更をうけるか観察し，$\rho = 0.5$ を境に渋滞の解消時間が臨界的な振る舞いをすることを確認した[*3]．



$\rho = 0.5$ の意味を探るため，簡単な思考実験を考えた．密度 ρ_A と ρ_B の粒子溜に繋げたパイプを考え，パイプ中央に入れた仕切りを $t = 0$ に取り除く．すると仕切り位置の密度 $\rho(t)$ を考えることができるが，直感的には定常状態 $\rho(t \sim \infty)$ が "受入能力"ρ_A と "排出能力"$1 - \rho_B$ で決まりそうだと分かる．つまり $\rho_A > 1 - \rho_B$ のとき $\rho = \rho_B$，$\rho_A < 1 - \rho_B$ のとき $\rho = \rho_A$ という定常状態が実現されそうである．しかし厳密な解析によると，その間に $\rho = 0.5$ という非自明な領域が現れる（図）．いずれにせよ，ρ_A と $1 - \rho_B$ は重要な量であり，非平衡定常状態が初期状態に大きく依存することがわかる．



[*] 数理の翼ワークショップ（WS）2008 講義録

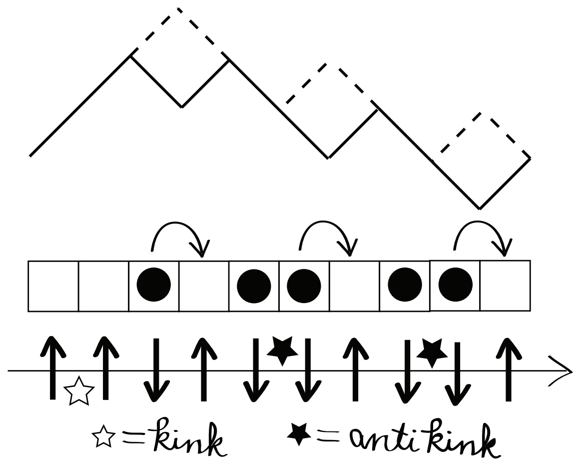
[*1] 分母のビットを並べて読むと 184 なので Rule184 とも呼ばれている．

[*2] demonstrations.wolfram.com に「Phase Transitions in ECA Rule 184」という項がある．

[*3]「相転移というからには何か物理的な量が発散するのか？」という参加者からの質問があったが，この段階では次の基本図において $\rho = 0.5$ でカスプが現れることを指摘するだけで十分であろう．

3　界面成長へのマッピング

粒子がいる状態を傾き -1，いない状態を傾き $+1$ に対応させて，連続なグラフを描くと，界面成長の模型と 1 対 1 に対応することがわかる[*4]．この隠れた対応を調べることで模型の相補的な理解が可能となる．物理的には例えばビーカー内の溶質が沈殿していく様子と思うことができ，$\rho = 0.5$ の場合には界面（表面）が平（たいら）になっていく過程がみられる．これは元の Burgers で言うとカレント最大の定常状態に到達することと対応している．



ところで粒子ではなく，粒子と粒子の間の関係に着目するような量を使うと別の見方ができる．“スピン”$1 - 2U \in \{\pm 1\}$ を改めてプロットしてみると，“half-filled”$\rho = 0.5$ の定常状態が反強磁性的な “基底状態” に対応していることが分かる．そこからの “励起” はキンクとアンチキンクの対生成で記述される．さきほどの交通渋滞を改めて眺めてみると，アンチキンクが渋滞のフロントに対応し，これは速さ 1 で後退していることが分かる．一方のキンクは速さ 1 で前進しており，最終的に渋滞が解消されるまでの過程はこれらの対消滅で支配されているということである．

ここまで偏微分方程式はあらわに出てこなかったが，最後に偏微分方程式の世界ではどういう操作をしていたのかを説明した．Burgers 方程式

$$\partial_t \rho + \rho \partial_x \rho = \nu \partial_x^2 \rho.$$

に変数変換 $\rho = -\lambda \partial_x \phi$ を施すことによって，（ノイズなしの）Kardar-Parisi-Zhang（KPZ）方程式 $\partial_t \phi = \nu \partial_x^2 \phi + \frac{\lambda}{2}(\partial_x \phi)^2$ が得られる．これは Burgers の解法で使われる Hopf-Cole 変換の中間過程にあたるもので，Burgers の衝撃波解に対応する進行解が KPZ でも存在する．そしてこれは化学反応波，たとえば Belousov-Zhabotinsky（BZ）反応のフロント挙動と対応していることが知られている．

詳しく述べる時間はなかったが，KPZ 方程式と蔵本-Sivashinsky（KS）方程式とが動的くりこみ群の意味で繋がっていることを紹介した．KS の低エネルギー挙動を眺めると，∂_x^4 の項が irrelevant となり，KPZ にくりこまれるのである．この結びつきではノイズの有無が微妙な問題をはらんでおり，完全に理解されたとは言えないようだが，まったく無関係な現象論的導出を経て得られた偏微分方程式たちが，互いにつながっている様子が参加者のみなさんに伝わったなら成功としたい[*5]．

市野 悠
京都大学物理学第一教室 M1
web: http://freeshells.ch/%7Ejuno/
mail: yu.ichino@gmail.com

References

[Krug-Spohn] J. Krug and H. Spohn, *“Kinetic Roughening of Growing Surfaces”*, in *Solids Far From Equilibrium* ed. by C. Godrèche, Cambridge (1991).
少し古いが，物理的な成果についてはここからたどるのがよいだろう．

[*4] これはヤング図形とマヤ図形の間にある関係と同じである．

[*5] 以上の話は，PNG 模型という別の界面成長過程や，ランダム行列理論，さらにはダイマー模型とのつながりも含めて一大分野を形成している．これに関するレビューはウェブページにて公開する予定である．