Title	可逆なセル・オートマトンの保存量とカノニカル分布(カオスとその周辺,研究会報告)
Author(s)	武末, 真二
Citation	物性研究 (1987), 48(4): 314-316
Issue Date	1987-07-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/92627
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

研究会報告

可逆なセル・オートマトンの保存量とカノニカル分布

東大・教養　武　末　真　二

セル・オートマトンは，時間・空間・状態ともに離散的な力学系であり，状態の更新は並列的に行われる。このような特性は，計算機での処理に適しており，そのため最近，物理のモデルとしてセル・オートマンを用いようという研究が盛んになってきている。その中でも特に興味深いのは，Frisch らによる流体力学をシミュレートする格子気体モデルと，Creutz によるイジングモデルの決定論的動力学である。これらは，いずれも可逆なセル・オートマンで，微視的レベルでの動力学を，必要な保存則だけ満たすように構成したものである。従って微視的には近似に過ぎないが，統計力学（平衡分布，線型応答理論等）の成立を仮定すると，巨視的には物理的な振舞が期待される。だが，このような離散モデルの動力学で，本当に統計力学が実現できるだろうか。本研究では，この問題について，平衡統計力学（カノニカル分布）に焦点を絞って考えてみる。

カノニカル分布の成立には，一般に，リューヴィルの定理，エネルギー保存則，エルゴード性の三つの条件が必要である。可逆なセル・オートマンでは，状態の離散性のために，リューヴィルの定理は常に満たされている。そこで，以下では，後者の二つの条件について調べてみよう。

最も簡単なモデルとして，次のような可逆なセル・オートマトンを考える。

$$\sigma_i^{t+1} = f(\sigma_{i-1}^t,\ \sigma_i^t,\ \sigma_{i+1}^t) - \hat{\sigma}_i^t\ (\mathrm{mod}\ 2) \tag{1}$$

$$\hat{\sigma}_i^{t+1} = \sigma_i^t \tag{2}$$

ここで，σ，$\hat{\sigma}$ は値 0，1 をとる変数，f は値 0，1 をとる関数，添字 i，t は，それぞれ，一次元格子上の位置，時間を表わす整数である。このモデルの可逆性は式より明らか。上式で表わされるモデルは，関数 f の数だけ，即ち $2^{2^3} = 256$ 個存在する。これらは，左右及びビット反転の対称性により，88 個の同値類に分けられる。

これらに対し，まず，次のような加法的保存量の有無を調べた。

$$\Phi = \sum_i F(\sigma_i,\ \sigma_{i+1},\ \hat{\sigma}_i,\ \hat{\sigma}_{i+1}) \tag{3}$$

ここで“加法的”な量に限ったのは，我々が欲しいのはエネルギーと見做すことができる保存量だからである。大きさNの有限系に話を限れば，可逆性により軌道は常に周期軌道だから，何らかの保存量は常に存在する。しかし，それは必ずしも物理的に意味のあるものとは限らず，例えば大きさ$N+1$の系の保存量と関係がつかないということも起こり得る。そこで，加法的（局所的な量の和の形に書ける）という条件を課した。また，局所的な関数Fを，場所iと$i+1$上の変数の関数としたのは簡単のためであるが，これによって，結合（i，$i+1$）にエネルギー$F(\sigma_i, \sigma_{i+1}, \hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_{i+1})$が存在するという描像を得ることができる。

保存量Φが存在するための条件は，関数Fを展開形で表わすと，展開係数に対する連立一次方程式として得られる。この連立方程式を，88個のモデルに対して各々解くことにより，どのモデルがどのような保存量を持つかがわかる。自明な解（すべての係数が0）しか得られない場合もあり，そのとき保存量Φは存在しない。

保存量Φが存在する場合，エネルギーFに対し連続の式が成立する。即ち，結合（i，$i+1$）上のエネルギーを$F_{i,i+1}$とかくとき，

$$F^{t+1}_{i,i+1} = F^{t}_{i,\,i+1} + J^{t}_{i} - J^{t}_{i+1} \tag{4}$$

となるような“流れ”$J_i = \mathscr{J}(\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1}, \hat{\sigma}_i)$が定義できる。

ここで注意しなければならないのは，和のみならず，局所的な量自体が保存する場合が存在することである。これを局所的保存則と呼ぶ。局所的保存則は，エネルギーの伝播に対して障害（壁）として働くことが多く，一次元系ではカノニカル分布の成立を大きく妨げる。

加法的保存量と局所的保存則に関してモデルの分類を行うと，次のようになる。

$$88\begin{cases}47\ (\Phi\text{あり}) & \begin{cases}40\ (\text{壁あり})\\ 7\ (\text{壁なし})\end{cases}\\ 41\ (\Phi\text{なし}) & \begin{cases}2\ (\text{壁あり})\\ 39\ (\text{壁なし})\end{cases}\end{cases}$$

Φが存在しないにもかかわらず（壁あり）の場合があるのは，3個以上のサイトに跨がる局所的保存量が存在していることを示している。

次に，このモデルのエルゴード性について調べた。有限系（大きさ$N<12$）の可能な配位（4^N個存在）をすべて調べつくすことにより，軌道の数，平均周期等を求めると，一般に軌道の数は$const.\times 2^N$以上存在し，平均周期は$const.\times 3^N$以下であることがわかる。従って，

一つのモデルに対してΦは高々2個しかなく，そのとりうる値は高々$2N$個しか存在しないので，エネルギーの値だけで軌道を完全に分類することはできない。即ち，等エネルギー面に多くの異なる軌道が存在する。従って有限系はエルゴード的ではない。

しかし，熱力学極限を考えれば，カノニカル分布の成立のためには，必ずしも有限系がエルゴード的であることは必要ないかもしれない。もっと粗視化した意味でのエルゴード性が実現していれば十分であろう。そこで，大きな系（$N=10^3$）を考え，その系の一部を部分系（$N' \leqq 14$）とし，残りを熱浴とみなして，部分系でカノニカル分布が成立しているかどうかを数値的に調べてみた。

具体的には，まず，部分系の状態密度$D(E)$（部分系のとりうる全配位のうち，エネルギーがEとなる配位数の割合）を計算する。次に，エネルギー密度$\phi=\Phi/N$の状態から出発して系を時間発展させ，部分系のエネルギーの値がEをとった時間の割合$P(E)$を求める。そして，これらの量が，

$$P(E)=const.\times D(E)\,e^{-\beta E} \tag{5}$$

の関係を満たすかどうか，また，こうして得られたβとϕの間の関係が，統計力学による計算と一致するかどうかを調べた。

その結果，局所的保存則を持つ系では(5)は成立しないが，加法的保存量だけ存在して局所的保存則は持たないようなモデルでは，エネルギー密度ϕのランダムな初期条件から始める限り，(5)を満足することが確かめられた。またこのとき，βの値についても，理論と良く一致するか，または一致しなくても部分系が小さいことを考慮すれば理論と矛盾しないような結果を得た。

但し，初期条件による(5)からのズレに関しては，モデルによってかなり差があり，このことは緩和の性質と関係があるものと思われる。緩和に関しては，現在研究が進行中である。

パターンとルールの動力学
―ルール・ダイナミックス―

早大・理工　相 沢 洋 二
麻布大・獣医　永 井 喜 則

特殊な機能（論理）をもった要素（領域）からなる集団（例えば神経系や計算機等）では力