双曲力学系の非平衡統計力学

― エネルギー座標を含む多重パイこね変換 ―

奈良女子大学物理・財）基礎化学研究所
田崎 秀一

§１．序

従来、古典統計力学と古典力学の関係はエルゴード論の立場から論じられることが多く、孤立した系の状態があらかじめ与えられた平衡分布（ミクロカノニカル分布）にどのような条件の下でどう近づくかということが主要な問題であった [1～５]。このアプローチでは力学系が持つべき条件はすでに与えられており、考えている系がこの条件を満たすかどうかを調べることが課題となる。例えば、力学系の平衡状態をミクロカノニカル分布で記述できることを保証する条件は長時間平均とミクロカノニカル平均が一致するというエルゴード性であり、任意の初期分布がミクロカノニカル分布に緩和することや線形応答の久保公式が成り立つことを保証する条件はミクロカノニカル相関が長時間で切れるという混合性である。他方、非平衡統計力学では、局所平衡分布などの普遍的統計分布の探索やスケーリング極限など、個々の系の性質に依らないアプローチがとられてきた [１および引用文献] 。こういった流れに対し、十年程前から系の力学的特性、特に非線形力学系としての特性を真正面から考慮した非平衡系の研究が行われるようになってきた [６～20]。本稿では、双曲型力学系に関する二つの非平衡統計力学理論をパイこね変換型写像を用いて紹介し、両者の関係等を論じる。

§２．非平衡統計力学と力学系理論

双曲型力学系の正確な定義は他の文献 [21] に譲ることにして、ここでは双曲型写像を定性的に説明する。系の統計力学的性質は、非常に長時間に渡る相空間内の軌道集団のふるまいによって決まってくる。従って、一時的にしか通過しない相空間内の点には興味はなく、何度も何度も初期点の近くに戻ってくるような軌道のふるまいだけが重要である。このような軌道集団が以下に説明する三条件を満たす場合、この写像Sを双曲型写像と呼ぶ。まず、初期点xから出発した軌道$S^t x$ （$t=\pm 1, \pm 2, \cdots$）を基準にして少しずれた軌道がどうふるまうかを考える（図１）。このとき、もし相空間の次元がmなら、初期点はm個の一次独立な方向にずらすことができる。その中のm_s個の方向（縮む方向）にずれた点から出発した軌道が時間が経つにつれ指数関数的に基準軌道に近づき、残りの$(m-m_s)$個の方向（延びる方向）にずれた点から出発した軌道が時間を過去にさかのぼるにつれてやはり基準軌道に指数関数的に近づいていくというのが第一の条件である。図１の黒丸は初期点xから出発した軌道を表しており、±１、±２、±３という番号は時刻を示す。１、２、３と番号をふった白丸の軌道は、縮む方向にずらした点から出発した軌道であり、－１、－２、－３という白丸の軌道は、延びる方向にずらした点から出発した軌道である。縮む方向と延びる方向が一次独立になることは重要

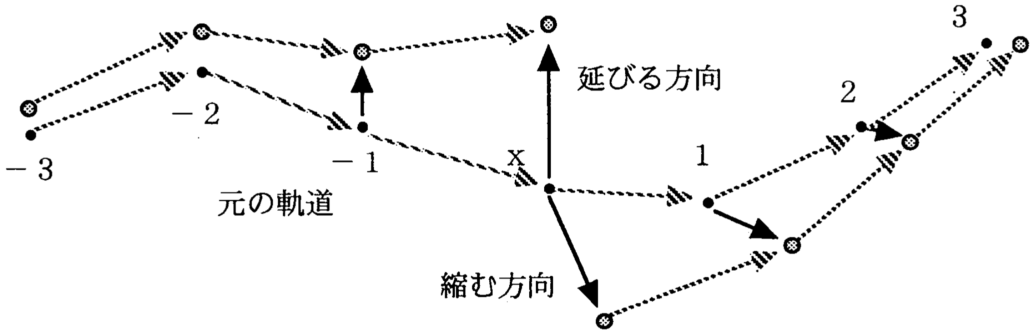

図１：双曲型写像の延びる方向と縮む方向

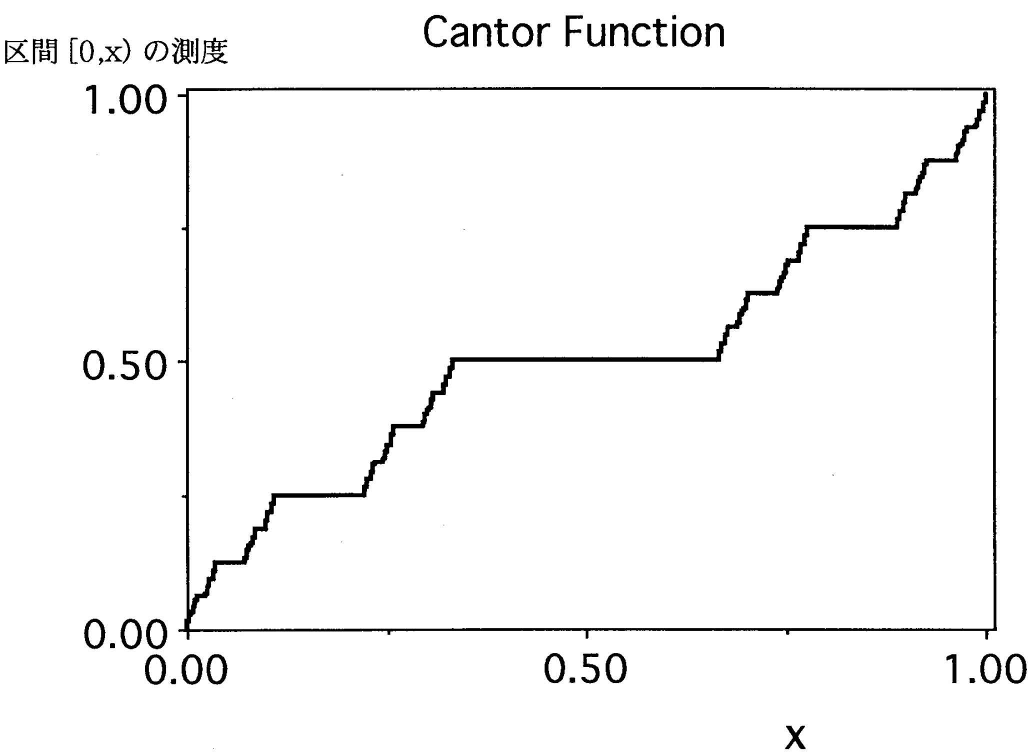

図２：Cantor 関数：縦軸は区間 [0,x) のCantor測度

な点である。そして、第二の条件は、縮む方向と延びる方向が初期点 x を変えたとき x に関して連続に変化することで、第三の条件は、時間が経っても縮む方向は縮む方向のまま、延びる方向は延びる方向のまま変わらないことである。延びる方向にほんの少しずれた軌道は時間が経つにつれ指数関数的に基準軌道から離れていく。つまり双曲型写像はカオス的である。さらに、ずれた軌道が平均としてではなく指数関数的に元の軌道から離れていくことと、意味のあるあらゆる軌道がカオス的であることから、双曲型写像は強いカオス系でもある。この系がエルゴード的になるような分布（より正確に言えば測度）が存在することは Sinai, Ruelle, Bowen らによって証明されている。

さて、双曲型力学系の測度について説明する前に、エルゴード性の物理的背景を考えてみよう。熱力学によるとどんな初期状態から出発しても究極的には熱平衡といわれる巨視的変化をしない状態に落ち着く。この変化の過程で巨視的物理量を観測し長時間にわたって平均すると、その観測値が熱平衡値にある時間が圧倒的に長いので、長時間平均値は熱平衡での値と一致する。つまり、熱平衡状態が存在するならば、巨視的物理量の長時間平均は初期状態に依らず一定値になる。長時間平均は、相対滞在時間に相当する測度についての統計平均で表されるから、結局、どんな初期状態から出発しても巨視的物理量の長時間平均は一つの測度についての統計平均になるはずである。これが熱平衡状態の存在を保証するために物理屋が期待したい性質なのだが、ほとんどの系では満たされない。例外的初期状態が存在するのである。そこで、通常は少しゆるめた条件「ほとんど全ての初期状態から出発すると巨視的物理量の長時間平均は一定の測度についての統計平均になる」が満足されれば良いと考えられている。一見すると「全ての」を「ほとんど全ての」に変えただけなので物理屋が期待する条件と大差はないようだが、「ほとんど全て」という初期状態の「量」を測る尺度をどうとるかで様子は大きく違う。状態の「量」を測る尺度は分布、即ち測度である。つまり、「ほとんど全ての初期状態」と言っても、どの測度について考えているかで様子は違ってくるのである。

この違いがはっきりする簡単な例として、区間 $[0,x)$ の測度が図２のような Cantor 関数で表される Cantor 測度と普通の長さ（Lebesgue 測度）を比べてみよう。図２から分かるように Cantor 関数は、線分を三等分し真ん中の開区間を除くという操作を繰り返してできる Cantor 集合 $C \equiv [0,1]\backslash\{(1/3,2/3)\cup(1/9,2/9)\cup(7/9,8/9)\cup\cdots\}$ の所で増加し、それ以外では一定値をとる。このため、Cantor 集合 C の Cantor 測度は１で、その補集合 $[0,1]\backslash C$ の Cantor 測度は０になる。よく知られているように Cantor 集合の普通の長さ（Lebesgue 測度）は０なので、Cantor 集合 C は Cantor 測度について「ほとんど全て」の点を含むが、Lebesgue 測度については「ほとんど空」になる。逆に、その補集合 $[0,1]\backslash C$ は Cantor 測度について「ほとんど空」で、Lebesgue 測度については「ほとんど全て」の点を含む。このように、どの測度を基準にするかで様子は大きく違うのである。

上の議論に二つの測度が出てきたことに注意してほしい。初期状態の「量」を測る測度と統計平均を計算する測度である。与えられた系がエルゴード的であるか否かを判定するときには、統計平均を計算する測度を用いて初期条件の「量」が測られる。つまり、巨視的物理量の長時間平均が統計平均に一致するような初期条件が、統計平均を計算するときに使われる測度についてほとんど全てのとき、系はエルゴード的であると言われ、この測度をエルゴード

的測度と言う。双曲型力学系ではエルゴード的測度は一般に非可算無限個ある [21] 。例えば、区間 $[0,1]$ で定義された一次元写像 $x' = Sx \equiv 3x \pmod 1$ は Lebesgue 測度（つまり普通の長さ）についても、Cantor 測度についてもエルゴード的である。さらに、多重パイこね変換のような系では、どういう測度について「ほとんど全ての初期状態」のふるまいを見るかで力学系が示す巨視的性質も違ってくる [10,22]。このため、どのエルゴード的測度が系の「物理的」状況を表すのにふさわしいかという測度選択の問題が生じる。

測度選択の条件にはいくつかあるが [21]、そのうちの一つを紹介する。この条件では、適当な尺度でデタラメに初期状態をとり、その後の振る舞いを長時間にわたって調べるという思考実験を行ったとき、自然に選ばれるエルゴード的測度が系の「物理的」状況を表すものと考える。では、どの尺度でデタラメにとると物理的に最も適切だろうか？デタラメに初期状態を選ぶとすれば、相空間体積のより大きい領域から初期状態を選ぶ頻度がより高いと考えるのが自然であろう。従って、デタラメさを測る尺度には相空間体積（つまり Lebesgue 測度）を用いるのが自然と考えられる。そこで、Lebesgue 測度についてデタラメにとった初期状態から出発する全ての軌道に沿う長時間平均が一定のとき、その平均を与えるエルゴード的測度を「物理的」状況を表すのにふさわしい測度と考える。Sinai, Ruelle, Bowen [23] は、双曲型力学系ではこの条件を満たすエルゴード的測度が唯一つしかないことを示した。そして、この条件で選ばれるエルゴード的測度は Sinai-Ruelle-Bowen（SRB）測度と呼ばれる。なお、SRB 条件が力学から導かれるものでないことに注意してほしい。一つの系に無数のエルゴード的測度が存在し、そこから唯一の測度を選ぶのに、力学から導くことのできない付加的条件が要るということは、力学系理論では周知の事実である。これはまた、統計力学の枠内で巨視的現象を微視的力学法則に還元できるというナイーブな見方が必ずしも成り立たないことを意味しており [22]、物理的にも重要な問題だが、これまではあまり議論されてこなかったようである。この点については第５節で簡単に論じる。

以上が双曲型力学系のあらましである。微視的運動が双曲型であるような系の非平衡状態は主に二つの立場から論じられている。一つは、従来の平衡統計力学の自然な延長として、系は保存的で非平衡性は境界条件あるいは初期条件からもたらされると考える立場、つまり保存的開放系を基礎とする立場である。Gaspard, Nicolis, 筆者らは、この立場で輸送係数と力学的特性量（Kolmogorov-Sinai（KS）エントロピーなど）の関係、非平衡定常状態や緩和モードを表す統計分布の性質などを調べている [10,11,18]。この場合、外界にある初期状態から出発する相空間軌道は双曲的系を通過して再び外界に出ていく。通過する系が双曲的、つまりカオス的なのでこの過程は、カオス的散乱と本質的に変わらない。そして、後者の場合と同様、力学過程はカオス系内に形成されるフラクタル・リペラーによってコントロールされる。その結果、輸送係数はリペラーに含まれる不変集合上のカオス軌道に関する KS エントロピーと正の Lyapunov 指数の総和の差に比例し、非平衡定常状態や緩和モードを表す分布はフラクタル的になる。特に、非平衡定常状態を表す分布は、SRB 測度と同様の性質を持つ。双曲型保存開放系の輸送現象を、カオス的散乱ととらえる理論は escape rate formalism とも呼ばれている。また、この理論と Prigogine グループが展開している非平衡統計力学理論（subdynamics 又は complex spectral theory）[24] には共通する部分が多い。

いま一つの立場では、外場のかかった系を可逆な散逸的双曲型力学系ととらえる [12〜14,17]。可逆な系が散逸的になることは一見すると不可能だが、Nose-Hoover-Evans らによって導入された方法を用いると可能である。例として三次元の質量 m の粒子に一定の力 $\mathbf{F}$ が働いている場合を考えてみよう。このとき、「摩擦係数」をζとすると運動方程式は次のようになる。

$$\dot{\mathbf{p}} = -\zeta\mathbf{p} + \mathbf{F}\ , \qquad \dot{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{p}}{m}\ . \tag{1}$$

「摩擦係数」ζを運動エネルギー $T = \mathbf{p}^2/2m$ が一定になるように

$$-\zeta\mathbf{p}\cdot\mathbf{p} + \mathbf{F}\cdot\mathbf{p} = 0\ ,\ \text{i.e.,}\ \zeta = \mathbf{F}\cdot\mathbf{p}/\mathbf{p}^2\ . \tag{2}$$

とするところが Nose-Hoover-Evans らの方法のミソである。(1) , (2) 式で定まる運動について長時間後の相空間体積 $\mathcal{V}$の変化を調べると簡単な計算から

$$\lim_{t\to\infty}\frac{\log\mathcal{V}(t)}{t} = -2\langle\zeta\rangle = -\frac{|\mathbf{F}|}{|\mathbf{p}|} < 0\ , \tag{3}$$

となることがわかる。ここで $2\langle\zeta\rangle$ は 2ζの長時間平均である。つまり、相空間体積は収縮し、この運動は散逸的である。ところが、運動方程式 (1) 、(2) に時間反転の操作 $t \to -t$、$\mathbf{p} \to -\mathbf{p}$ を施すと摩擦係数ζが運動量の奇関数なので、運動方程式は変わらない。つまり、この系は可逆でもある。つまり運動状態に依存する摩擦係数を導入することで可逆な散逸系が得られるのである。このように外場の下で運動エネルギー等が保存されるように「摩擦」がいれられた系は thermostated system と呼ばれている（本稿では熱浴付散逸系と呼ぶことにする)。熱浴付散逸系が双曲的であれば、双曲型力学系の一般的性質から、唯一つの SRB 測度が存在する。相体積は保存しないので、この SRB 測度は必然的に特異測度になる。熱浴付散逸系には外場と散逸が含まれるので、この SRB 測度は外場の下で実現する非平衡定常状態を表わしていると考えることができる。次の事実もこの見方を支持している。(3) 式の第一の等号は一般にも成り立つ。従って、運動エネルギーが一定なことと SRB 測度の性質から

$$\lim_{t\to\infty}\frac{\log\mathcal{V}(t)}{t} = -2\langle\zeta\rangle_{\mathrm{SRB}} = -\langle\mathbf{F}\cdot\mathbf{p}\rangle_{\mathrm{SRB}}/T = -\dot{Q}/T \tag{3$'$}$$

が成り立つ。ここで $\langle\cdots\rangle_{\mathrm{SRB}}$は SRB 測度に関する平均で、$\dot{Q}$は系に単位時間あたり流れ込むエネルギーである。熱力学的に考えると、$\dot{Q}$は熱流、運動エネルギー Tは温度と考えられるので (3′) 式の右辺は単位時間あたりのエントロピー生成の符号を変えたものと解釈できる。つまり相空間体積が減少するという散逸性はエントロピー生成が正になるという熱力学の第二法則が SRB 状態で成立することを保証し、その結果 SRB 状態は非平衡定常状態に相当していると考えられるのである。Chernov ら [13] はこの立場で Nose-Hoover-Evans 型散逸を含む Lorentz 気体において非平衡定常状態の存在を示し、オームの法則が厳密に成り立つことを示した。このような立場での非平衡状態の研究はシミュレーション物理の Hoover, Evans, Posch ら、統計力学の Lebowitz, Cohen, Dorfman ら、力学系理論の Gallavotti, Ruelle, Chernov らによって互いの協力の下で勢力的に行われており [12〜14,17]、力学の Gauss の最小束縛の原理 [25] や非平衡統計力学の川崎分布 [26] などとの関係が明らかにされている。

以下の節では、ドリフト流がある拡散系を模す多重パイこね変換を用いて、両アプローチの特徴をより具体的に調べ、最後の節で両者の関係や問題点などを論じる。まず、熱浴付散逸系の方から始める。

§3．熱浴付散逸系ー Tél らの多重パイこね変換ー

§3．1　モデルとスケーリング極限

まず、熱浴付散逸系に相当するパイこね変換 Bを考えよう。相空間は単位正方形である。今の場合、運動方程式に相当するものがないため Nose-Hoover-Evans 流に散逸を導入することはできず、別の方法でモデルを構成しなければならない。手がかりになるのは可逆性と散逸である。可逆性とは時間反転変換と呼ばれるべき等変換 Iが存在して、$IBI = B^{-1}$が成り立つことである。多粒子系の場合 Iに相当するのは全粒子の速度反転の操作である。パイこね変換 Bも時間反転変換 Iも相空間全体で定義されるので、逆変換 $B^{-1} = IBI$も相空間全体で定まるはずである。つまり、変換 Bは単位正方形から単位正方形の上への写像でなければならない。さらに、散逸的であるから、変換の Jacobian が 1 と異なるような領域がなければならない。この要請を満たすパイこね変換を図 3 に示す。この変換は三つのステップから成る：1）正方形を三つの縦長の長方形に分ける。2）各部分を横方向に延ばし縦方向に圧縮する。3）横長の長方形になった各部分を再び積み重ねて元の正方形に戻す。この変換では正方形は全体として正方形に写るが、斜線部分とドット部分の面積は保存しない。つまり、散逸的である。この際、時間反転対称であるためには、左の帯状部分の面積変化率が右の帯状部分の面積変化率の逆数でなければならない。因みに、この写像で時間反転 Iに当たるのは右上がり対角線に関する折り返しの操作である。この写像と熱浴付散逸系が同等なことは自明ではないが、Hoover ら [14] によって同様の方法で構成された二次元写像と熱浴付散逸的 Lorentz 気体の定常分布が似た構造を持つことが数値的に示されていることを付記しておく。

図 4 のように正方形を一列に並べた相空間上で、各正方形にパイこね変換を施した後に一部を両隣の正方形にずらす写像は決定論的拡散を示す。これを多重パイこね変換と呼ぶ。図 4 の多重パイこね変換 $B_{\rm dis}$は図 3 の散逸的パイこね変換をつないだもので、Tél ら [15,16] が導入した。この変換では各正方形の斜線部分は一つ右隣りの正方形に、ドット部分は一つ左隣りの正方形に、真ん中の部分は元と同じ正方形に写される。Lebesgue 測度について絶対連続な分布から出発すると有限の時間 t では分布は絶対連続なままで、密度関数は

$$\rho_{t+1}(n,x,y) = \begin{cases} \frac{l}{r}\rho_t(n+1, lx, \frac{y}{r})\,, & 0 \le y < r \\ \rho_t(n, sx+l, \frac{y-r}{s})\,, & r \le y < 1-l \\ \frac{r}{l}\rho_t(n-1, rx+1-r, \frac{y-1+l}{l})\,, & 1-l \le y \le 1 \end{cases} \tag{4}$$

を満たす。ここで、n は各正方形の番号で、(x,y)（$0 \le x \le 1,\quad 0 \le y \le 1$）は正方形内の一点を表す。また、各正方形を三分割したときの左右の帯状部分の横方向の延び率をそれぞれ $1/r(>1)$, $1/l(>1)$ とした（このとき時間反転対称性より左右の帯状部分の縦方向の縮み率は l, rである）。そして、$s \equiv 1-r-l$は真ん中の帯状部分の幅である（図 4 参照）。相体積が保

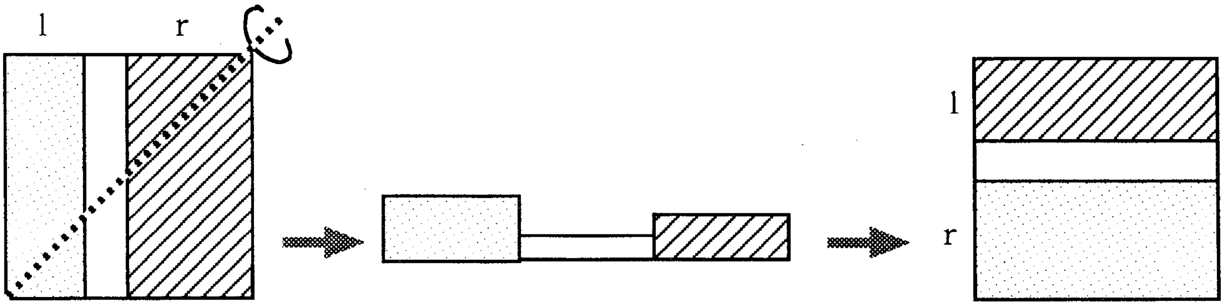

図３：熱浴付散逸系型パイこね変換
点線の対角線についての折り返しが時間反転にあたる

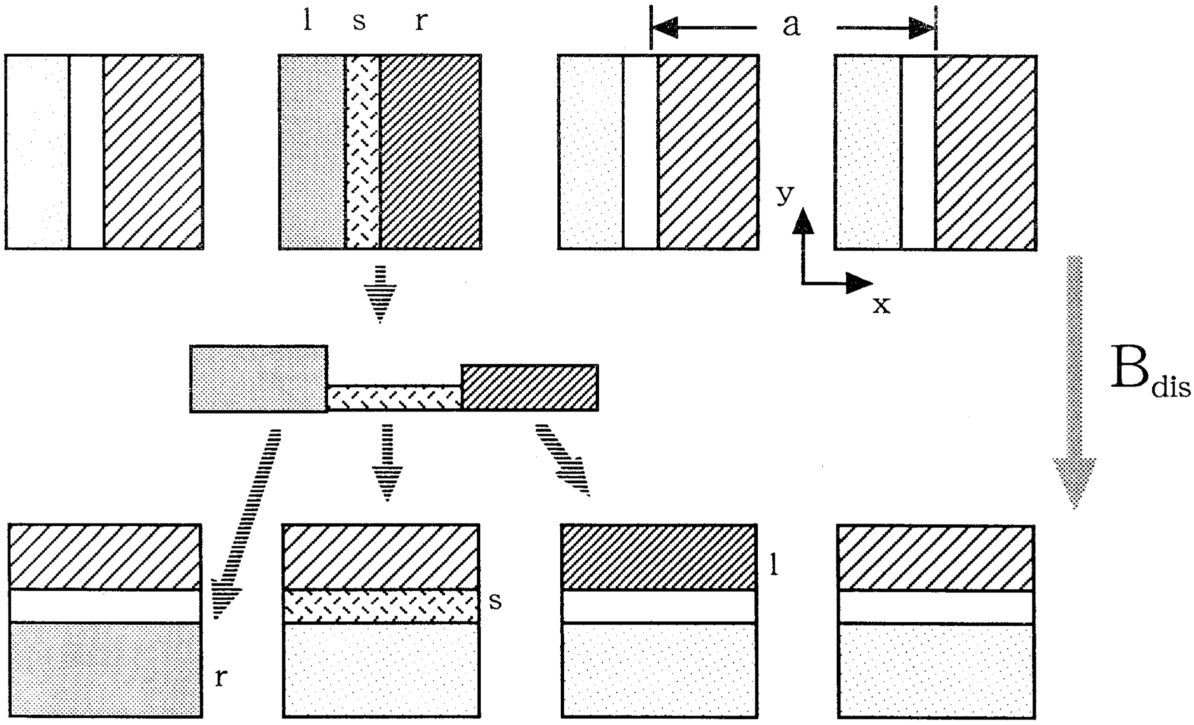

図４：熱浴付散逸系型多重パイこね変換

存しないことを反映して、Jacobian に相当する 因子 l/r, r/lがついていることに注意。(4)式より初期分布が x について適当に滑らかなら時間 t が十分大きい時、分布は横方向に一様になり、粗視化した分布 $N_t(n) \equiv \int dxdy\rho_t(n,x,y)$ は漸近的に次式に従う。

$$N_{t+1}(n) - N_t(n) = l\{N_t(n+1) - N_t(n)\} - r\{N_t(n) - N_t(n-1)\} . \tag{5}$$

これは一次元格子上で定義され、左右の格子点への遷移確率がそれぞれ lと rとなる酔歩の分布関数の方程式と一致する。今、格子間隔を a、時間ステップをτとし、$v \equiv (r-l)a/\tau$、$D \equiv (l+r)a^2/(2\tau)$ を一定にしたままで $a \to 0$、$\tau \to 0$ というスケーリング極限をとると、(5)式は Fokker-Planck 方程式

$$\frac{\partial N(X,T)}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial X}\left\{-vN(X,T) + D\frac{\partial N(X,T)}{\partial X}\right\} , \tag{6}$$

に帰着する。ただし、$X \equiv na, T \equiv m\tau$ (n,m は整数) は粗視化した位置と時間を表す連続変数である。このことから、図4の多重パイこね変換がドリフト流 vと拡散定数 Dの拡散過程を記述していることがわかる。可逆な変換 B_{dis}から漸近的にではあるが、不可逆な Fokker-Planck 方程式(6)が得られたことに注意してほしい。

§3.2 周期的な場合

系が周期的で孤立している場合を考えよう。まず、(5)式の解で、境界条件を満たす巨視的定常分布は、$N(n) = N_\infty (=[一定])$ しかない。このとき$\int_0^y dy'\rho_t(n,x,y')$ にあたる累積分布関数の時間発展を考えると、分布が

$$\mu_\infty(\{[0,x)\times[0,y)\}_n) \equiv N_\infty\, x\, (y + (l-r)T(y)) , \tag{7}$$

で与えられる測度に収束することが分かる。ここで関数 $T(y)$ は図5に示すフラクタル的な連続関数である。(7)式の右辺の yに関する微係数は Lebesgue 測度についてほとんど至るところ零になる。つまり、(7)式で定義される測度は特異測度である。これは SRB 測度に他ならない。

次に Gibbs エントロピー S_Gの変化を考えてみよう。これは

$$S_G(t) = -\sum_n \int_{[0,1]^2} dxdy\rho_t(n,x,y)\log\rho_t(n,x,y) , \tag{8}$$

で定義される。(4)式から $S_G(t)$ の長時間での漸近的変化は

$$\lim_{t\to+\infty}\{S_G(t+1) - S_G(t)\} = MN_\infty\left[l\log\frac{r}{l} + r\log\frac{l}{r}\right] < 0 , \tag{9}$$

となる。ここで Mは系全体に含まれる正方形の数である。即ち、系の Gibbs エントロピーは漸近的には減少し続けるのである。減ったエントロピーは系をとりまく熱浴に流れ込むはずであるから、系+熱浴という孤立系を考えると(9)式右辺の符号を変えたものが全系のエントロピー生成とみなせる。さらに(9)式右辺のかっこ内は Lyapunov 指数の和、つまり相空間

体積の減少率である。以上の結果は一般の双曲型力学系でも成り立つことがRuelleらによって示されている[17]。Gibbsエントロピーが減少し続けることは、直感的には、次のように理解できる。系は双曲型なのでLebesgue測度について絶対連続な分布から出発すると、Lebesgue測度について特異的なSRB測度に時間発展していく。SRB状態では分布はLebesgue測度についてすかすかな所に集中しているので、そこでの分布関数値は無限大になり、従って、この状態のGibbsエントロピーは負の無限大になる。つまり、Gibbsエントロピーは減り続けるのである。

§3.3 流れの存在と散逸

図4の多重パイこね変換では各正方形の左の帯状部分の x 方向の延び率は右の帯状部分の y方向の縮み率の逆数に等しく、左の帯状部分の y方向の縮み率は右の帯状部分の x 方向の延び率の逆数に等しかった。これは写像の可逆性からの結論である。つまり、左右の帯状部分の x 方向の延び率を $1/l$、$1/r$とし、y方向の縮み率をそれぞれ l'、r'とした写像を考えると、時間反転不変であるためには $l'=r$かつ $r'=l$でなければならないのである。

Breymann, Tél, Vollmer[16] は、同様の結論をエントロピーについての考察から導いた。彼等の議論の概要は次の通りである。まず、各正方形について粗視化した分布を考え、これで定義される粗視化エントロピーを系のエントロピーとみなす。その変化のうち、Gibbsエントロピーの変化分に相当する部分を熱浴から流れ込んだものとみなすと、系での（単位時間単位長当りの）エントロピー生成が定義できる。このエントロピー生成のスケーリング極限は、$l'=r$かつ $r'=l$の時に限って非平衡熱力学から期待される形

$$\sigma_i = \frac{j(X)^2}{DN(X)}$$

に一致する。ここで流れ jは

$$j(X) = vN(X) - D\frac{\partial N(X)}{\partial X}$$

で、Dは拡散係数である。つまり、$l'=r$かつ $r'=l$でなければ、正しい熱力学的振る舞いは得られないのである。以上から、時間反転不変性や正しい熱力学的振る舞いなどの条件を満たす散逸が限られていることが分かる。

さて、Breymannら[16]は、さらに次の結論を導いた。(6)式から分かるように図4型の多重パイこね変換は $l \neq r$のときに限り、零でないドリフト流 $vN(X,T)$ を持つ。そして、上述の議論から、このとき正しい熱力学的振る舞いを得るには $l'=r$かつ $r'=l$でなければならない。従って、$l' \neq l$かつ $r' \neq r$、即ち、写像は必ず散逸的になる。要するに図4型の多重パイこね変換にドリフト流が存在するには、写像は散逸的でなければならないのである。この点については次節で改めて論じる。

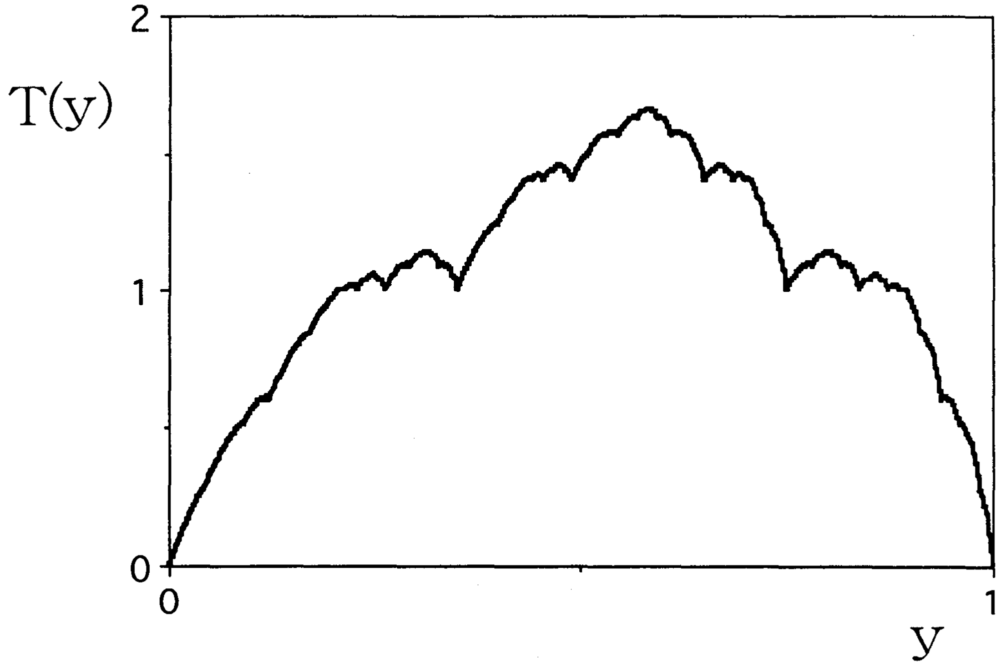

図５：定常分布のフラクタル部分

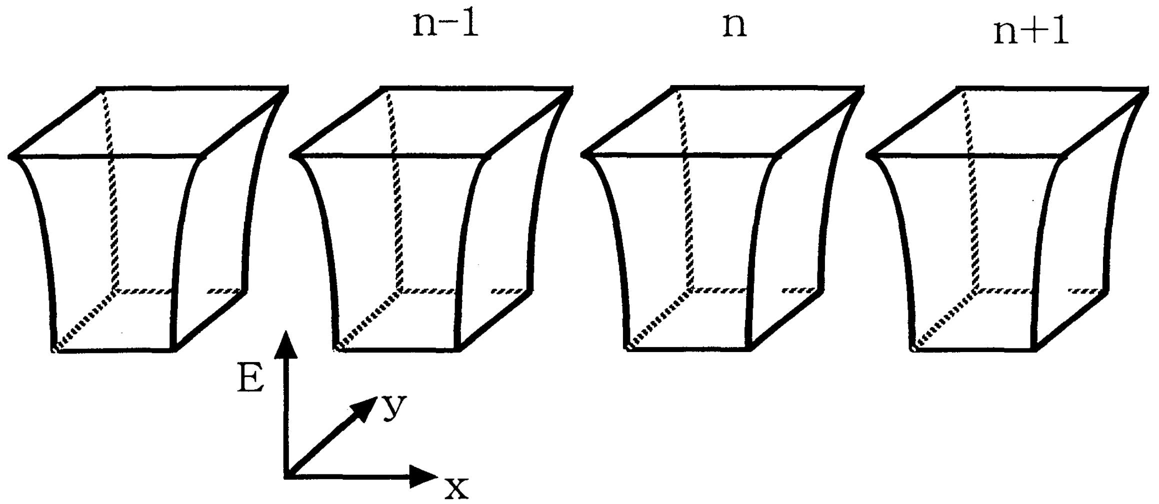

図６：エネルギー付パイこね変換の相空間

§4．開放的保存系ーエネルギー座標を含む多重パイこね変換ー

§4．1　モデルとスケーリング極限

これまでに議論されてきた多重パイこね変換は粒子の拡散のモデルとして優れているが、複数の輸送現象を記述することはできない。また、非平衡状態を作る重要な要素の一つである外場の影響を論じることもできない。そこで、筆者と Gaspard [18] はエネルギーの自由度を持つ多重パイこね変換を導入した。この写像の相空間は図6に示すようになる。各サイトには正方形でなく、三次元の壷のような領域が対応している。縦軸は運動エネルギー Eに相当する座標で、Eの値ごとに断面積は異なる。この系のダイナミックスは、a）外場のポテンシャル・エネルギーと運動エネルギーの和の保存、b）定エネルギー面上でパイこね変換型になること、c）相空間体積の保存、d）対角線折り返しに関する時間反転不変性を要請することで決めることができる。

Tél らのモデルと比較するため、強さ Fの一様な外場がかかっている場合を考えよう。対応するポテンシャルはサイトの座標を n とすると$\Phi(n)=Fn$ となる。このとき、相空間を定エネルギー面で切断したものは大きさがサイト座標 n について指数関数的に変わる正方形の列になる（図7参照)。そして、この定エネルギー面上に制限した多重パイこね変換 $B_{\rm con}$は図7のようになる。各正方形を三分割したときの各部分の比率は図4の Tél らのモデルと同様、$l:s:r$（ただし $l+s+r=1$）で、外場の強さ Fとは $l=re^{2F}$の関係がある。そして、各正方形の斜線部分は一つ右隣りの正方形に、ドット部分は一つ左隣りの正方形に、真ん中の部分は元と同じ正方形に写される。

Tél らのモデルと同様、初期分布が x について適当に滑らかなら時間 t が十分大きい時、分布は横方向に一様になり、粗視化した分布 $N_t(n,E)\equiv\int dxdy\rho_t(n,x,y,E)$（ただし Eは全エネルギーで$\rho_t(n,x,y,E)$ は時刻 t での分布関数である）は漸近的に次式に従う。

$$N_{t+1}(n,E)-N_t(n,E)=l\{N_t(n+1,E)-N_t(n,E)\}-r\{N_t(n,E)-N_t(n-1,E)\}\ . \quad (5')$$

格子間隔を a、時間ステップをτとし、$v\equiv(r-l)a/\tau$、$D\equiv(l+r)a^2/(2\tau)$ を一定にしたままで $a\to0$、$\tau\to0$ というスケーリング極限をとると、これは次の Fokker-Planck 方程式に帰着する。

$$\frac{\partial N(X,T,E)}{\partial T}=\frac{\partial}{\partial X}\left\{-vN(X,T,E)+D\frac{\partial N(X,T,E)}{\partial X}\right\}\ . \quad (6')$$

つまり、図7の多重パイこね変換もドリフト流 vと拡散定数 Dの拡散過程を記述している。因みに、ドリフト流 vは外場の強さ Fと $v=-2DF/a$ の関係がある。前節同様、可逆な変換 $B_{\rm con}$からも不可逆な Fokker-Planck 方程式（6′）が得られることに注意してほしい。

§4．2　開放系における非平衡定常状態

有限の長さ Mのサイト $n=0,1,\cdots M-1$ から成るエネルギー座標付多重パイこね変換の両端に自由運動に相当する写像を張り付け、そこでの分布が Lebesgue 測度について一様になるような境界条件をつける。このとき、左右の自由運動部分での密度$\rho_l(E)$ と$\rho_r(E)$ は異なる

ものとする。これは

$$\rho_t(n=0,x,y,E)=\rho_l(E)\ , \quad (0\le x<la_0(E)\ \text{の場合})$$

$$\rho_t(n=M-1,x,y,E)=\rho_r(E)\ , \quad ((1-r)a_{M-1}(E)\le x\le a_{M-1}(E)\ \text{の場合})$$

という条件を課すことにあたる。ただし、$a_n(E)\equiv a(E)\exp(-nF)$ はサイト n での切り口の正方形の一辺の長さで、$a(E)$ は総エネルギー Eのある関数である。この設定は拡散を示す系の両端で濃度を固定して濃度分布の変化を見るという思考実験に相当する。拡散を示す系が場所によって濃度が異なる定常分布に変化していくように、この系の状態も時間 t とともに次の測度で表される非平衡定常状態に時間発展する。

$$\mu_\infty\left(\{[0,x)\times[0,y)\}_n\right)\equiv\xi\left(A_\infty(E)\left(\frac{r}{l}\right)^n\eta+B_\infty(E)\left[\eta+(l-r)T_n(\eta)\right]\right)\ . \tag{10}$$

ここで $\{[0,x)\times[0,y)\}_n$は n 番目の正方形内の領域 $[0,x)\times[0,y)$ を表し、$\xi=x/a_n(E)$ かつ $\eta=y/a_n(E)$ で、$A_\infty(E)$、$B_\infty(E)$ は系の両端の密度$\rho_l(E)$、$\rho_r(E)$ に依存する係数である。総サイト数 $M=9$ の場合、関数 $T_n(z)$ は図８のようになる。系の中間 $n=4$ のグラフは図５の関数 $T(y)$ とほとんど差はないが、$y+(l-r)T(y)$ が Lebesgue 測度についてほとんど至る所零の微係数を持っているのに対し、$\eta+(l-r)T_n(\eta)$ の微分は有限確定である。つまり、（７）式の測度は特異測度だが、（１０）式の測度は Lebesgue 測度について絶対連続である。そして、系の大きさが無限大のとき（１０）式の測度は特異的になる。

この定常状態ではサイト n と $n+1$ の間に

$$\begin{aligned} J_{n|n+1}(E) &= \frac{r-l}{2}\{N_\infty(n,E)+N_\infty(n+1,E)\}-\frac{l+r}{2}\{N_\infty(n+1,E)-N_\infty(n,E)\} \\ &= (r-l)B_\infty(E)\ , \end{aligned} \tag{11}$$

という流れが生じる。ここで $N_\infty(n,E)\equiv A_\infty(E)\left(\frac{r}{l}\right)^n+B_\infty(E)$ は定常状態でのサイト n 上の単位エネルギーあたりの分布である。（１１）式右辺第一項はドリフト流に、第二項は拡散流にあたる。そして、$N_\infty(n,E)$ のサイト座標 n に依存する項からは両方の流れが釣り合うためネットの流れは生じず、サイト座標に依存しない項のみから流れが生じる。このため（１１）式の右辺第三項には $A_\infty(E)$ は含まれない。（１１）をエネルギー Eについて平均したものは物質流を、Eを掛けて Eについて平均したものはエネルギー流を表す。スケーリング極限では物質流、エネルギー流はそれぞれ

$$j_M(X)=v\bar{N}(X)-D\frac{\partial\bar{N}(X)}{\partial X}\ , \tag{12}$$

$$j_E(X)=\epsilon(X)j_M(X)-D\bar{N}(X)\frac{\partial\epsilon(X)}{\partial X}\ , \tag{13}$$

となる。ここで$\bar{N}(X)$ はスケーリング極限での粒子密度、$\epsilon(X)$ は一粒子当たりのエネルギー、Dは以前定義した拡散定数、vはドリフト速度である。（１２）、（１３）式から一粒子当たりのエネルギーの勾配に比例する「熱流」j_q

$$j_q(X)=-D\bar{N}(X)\frac{\partial\epsilon(X)}{\partial X}$$

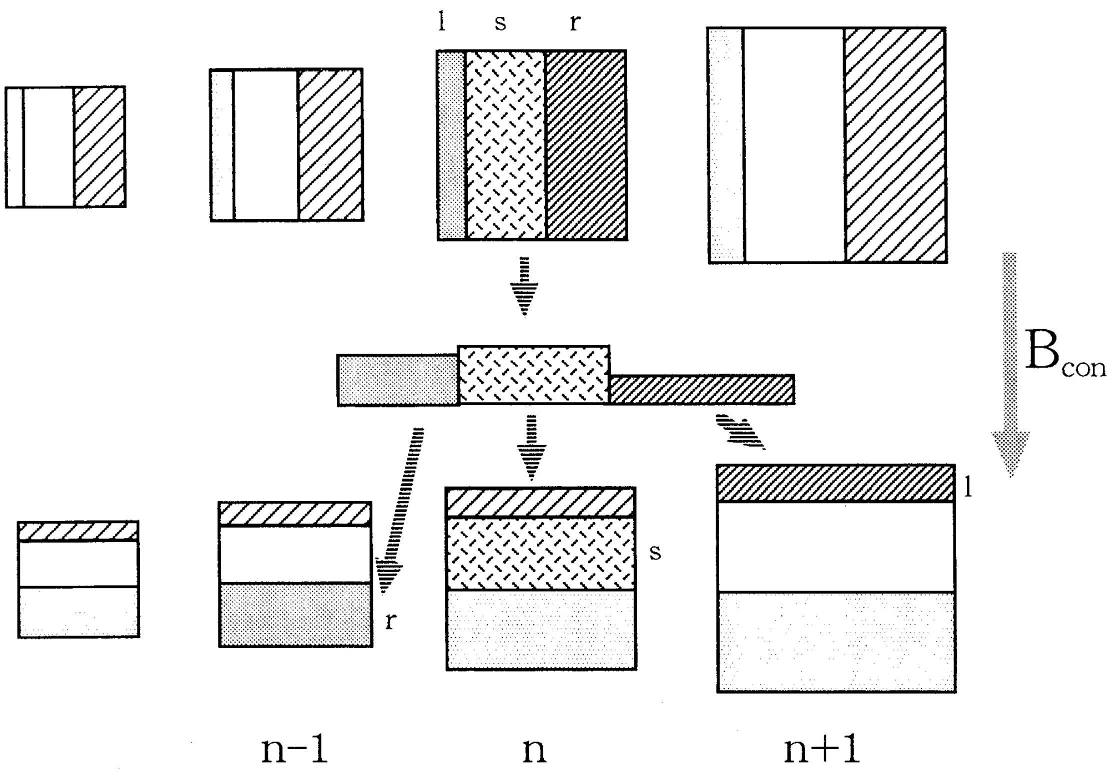

図７：エネルギー座標付多重パイこね変換
定エネルギー面上のダイナミックス

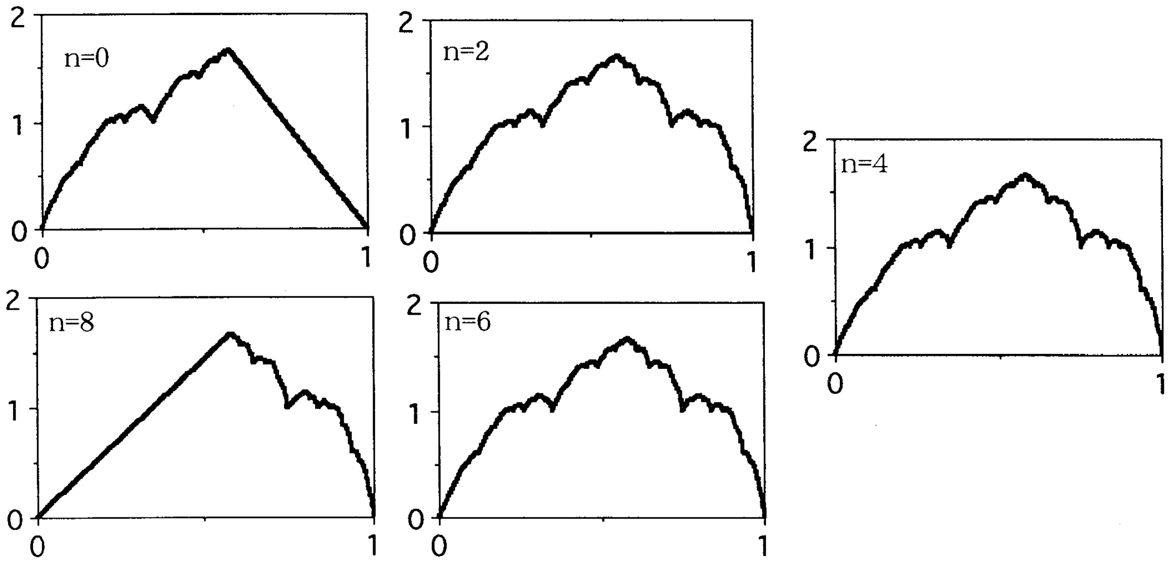

図８：サイト毎の特異関数 $T_n(z)$ v.s. z

が生じていることが分かる。このように、エネルギー座標付多重パイこね変換は質量輸送とエネルギー輸送をよく記述する。

§４．３　散逸型多重パイこね変換との関係

Tél らの散逸的多重パイこね変換で前節と同様の開放型境界条件

$$\rho_t(n=0,x,y)=\rho_l\ ,\quad (0\le x<l\text{の場合})$$

$$\rho_t(n=M-1,x,y)=\rho_r\ ,\quad (1-r\le x\le 1\text{ の場合})$$

を課すと３．２節とは異なった定常状態が得られる。この状態は

$$\mu_\infty(\{[0,x)\times[0,y)\}_n)\equiv\ x\ \left(A_\infty\left(\frac{r}{l}\right)^n y+B_\infty[y+(l-r)T_n(y)]\right)\ , \tag{14}$$

という測度で記述される。ここで係数 A_∞ と B_∞ は、$A_\infty(E)$ と $B_\infty(E)$ で $\rho_l(E)$、$\rho_r(E)$ を ρ_l、ρ_r に置き換えたもので、関数 T_n は図８に示したものである。つまり散逸的多重パイこね変換の定常状態（１４）はエネルギー座標付多重パイこね変換の非平衡定常状態（１０）とスケール因子を除いて同一である。この結果、散逸的多重パイこね変換でも、開放的境界条件の下で実現する定常分布は Lebesgue 測度について絶対連続になり、系のサイズが無限大の時に限り特異的になる。

さて、前節で紹介したように散逸的多重パイこね変換のエントロピー生成はスケーリング極限で熱力学的な表式に帰着する。この写像とエネルギー座標付多重パイこね変換が本質的に同一な開放的定常分布を持つことから、後者も熱力学と consistent なエントロピー生成を持つと期待される。実際そうである [18]。

エネルギー座標付多重パイこね変換は保存系なので Gibbs エントロピーは良い尺度ではない。Gaspard [19], Gilbert, Dorfman [20] が指摘したように、この場合には粗視化エントロピーが適切である。状態 μ における相空間の分割 $\{B_j\}$ に関する領域 A の粗視化エントロピー $S_C(\mu:A:\{B_j\})$ は

$$S_C(\mu:A:\{B_j\})\equiv\sum_{B_j\subset A}\mu(B_j)\ln\frac{\nu_0(B_j)}{\mu(B_j)}\ , \tag{15}$$

で定義される。ここで μ は問題にしている状態の測度で、ν_0 は基準となる Lebesgue 測度である。このエントロピーの変化分

$$\Delta S_C(\mu_t:A:\{B_j\})\equiv S_C(\mu_{t+1}:A:\{B_j\})-S_C(\mu_t:A:\{B_j\})$$

は領域 A の境界から出入りするエントロピー流と A で発生するエントロピー生成に分けられる。（１０）式の定常状態ではエントロピー生成のスケーリング極限は

$$\sigma_i=\int dE\frac{j(X,E)^2}{DN(X,E)}\ , \tag{16}$$

となる。$N(X,E)$ は位置 X での単位エネルギー当りの分布で、流れ $j(X,E)$ は Fokker-Planck 方程式（６$'$）に現われる流れである：

$$j(X,E) = vN(X,E) - D\frac{\partial N(X,E)}{\partial X} \ .$$

つまり粗視化エントロピーから定義されるエントロピー生成はスケーリング極限で熱力学と consistent である。この結論から、熱力学と consistent なエントロピー生成は保存系でも可能で、散逸が必ずしも必要でないことが分かる。即ち、Breymann, Tél, Vollmer[16] の結論は一般には成り立たないのである。最後にエントピー生成の表式（１６）を得るには、有限の分割 $\{B_j\}$ を用いて粗視化エントロピーを計算した後でスケーリング極限をとらなければならないということを注意しておく。

§５．結語

本稿では、多重パイこね変換という可逆な双曲型力学系において、系が保存的か散逸的かに依らず、近似なしに拡散などの輸送過程を記述できることをみてきた。力学法則の可逆性にもかかわらず、これらの系では分布（＝測度）は輸送法則に従って一方向的に時間発展する、つまり不可逆に変化するのである。では、力学の可逆性と分布の時間発展の不可逆性の関係はどうなっているのだろうか？まず、時間反転の影響から見ていこう。非平衡定常状態に時間反転の操作を施すと新たな定常状態が生じる。順方向の時間発展で得られた定常分布が図５や図８に見るように縮む方向、y方向にフラクタル的であったのに対し、時間反転の操作を施した定常分布は延びる方向、x 方向にフラクタル的になる。つまり、二つの定常状態ははっきりと異なる性格を持つ。さらに系に存在する流れの向きも逆になる。実は時間反転の操作を施して得られる定常状態は、同じ初期条件から過去に向かって時間発展させた時に得られる非平衡定常状態に他ならない。つまり、「分布の空間」で言えば、第３節、第４節で論じた定常状態は「吸引点」に、時間反転した定常状態は「反発点」に相当するのである。さらに、この「分布の空間」の「流れ」は可逆でもある。この辺りの事情を説明するには次のダイアグラムが便利である。

$$X' \Longrightarrow A'' \Longrightarrow A \Longrightarrow A' \Longrightarrow X \quad .$$

ここで右端の X は順方向の時間発展で得られる定常状態を、左端の X' は逆方向の時間発展で得られる定常状態を示し、A は任意の初期状態を示す。A から出発してしばらく待つと、系の状態は A' になる。A' では分布は縮む方向にややフラクタル的になっているはずである。このとき時間反転を行うと縮む方向と延びる方向が入れ替わるので延びる方向にややフラクタル的な分布を持つ状態 A'' に変わる。この状態は元の状態 A よりも X' に近いため、A'' は上のダイアグラムでは A よりも左にあるはずである。そして、再び状態 A を通過して順方向の定常状態 X に向かっていくのである。つまり時間反転の操作を施したとき系の状態は A' から元の A に戻るのではなく、より定常状態 X から遠い A'' に移されてから A に戻るのである。この後者の過程は分布の一方向的時間発展と矛盾しない。以上のように運動法則の時間反転不変性（＝可逆性）と分布の一方向的時間発展（＝不可逆性）は両立するのである。

このように双曲型力学系は、散逸の有無にかかわらず同じメカニズムで、力学の可逆性と矛盾することなく不可逆な輸送現象を示す。また、4節で見たように、多重パイこね変換でドリフト流が存在するためには散逸が必要であるという Breymann らの結論も成り立たない。つまり今の所、散逸が存在しなければならない積極的理由は見あたらない。そして何よりも熱浴付散逸系に基づくアプローチでは運動状態に依存する散逸を導入することで微視的力学法則を変更しているため、筆者には不自然に感じられる。従って、筆者は「(熱浴付散逸系は)シミュレーションには便利で興味深い振る舞いを示すが、… 実世界の微視的構成要素の動力学を司っている実際の法則とは何の関係もない。」という Lebowitz の批判 [27] に賛成である。しかし、熱浴付散逸多体系のシミュレーションで求められた非平衡定常状態が熱力学的に望ましい性質を持ち、また、4．3節でみたように、少なくとも多重パイこね変換では、熱浴付散逸系と保存開放系で本質的に同一な非平衡定常分布が得られることから、熱浴付散逸系の定常状態が実際の非平衡定常状態を良く記述する理由があるはずである。この点を明らかにするにはさらに研究が必要であろう。

最後に測度選択の物理的意味について触れておこう。本稿では主として普通の体積、Lebesgue 測度を基準とする定常分布について論じたため測度選択の問題は表には出てこなかった。第2節で触れたように、一般の双曲型力学系では互いに特異的な無数のエルゴード測度が存在する。そして、基準になる測度をどう選ぶかでどのエルゴード測度が選ばれるかが変わる。さらに多重パイこね変換では各測度によって系の示す輸送係数が異なる。もう少し詳しく言えば、多重パイこね変換では、左右のサイトにどのくらい移動するかを示す数 l と r が運動を規定する。そして、スケーリング極限で得られる Fokker-Planck 方程式のドリフト速度 v と拡散係数 D は、基準になる測度 ν_0 をどれに選ぶかで決まってくる。逆に言えば、ドリフト速度と拡散係数の組 (v, D) は測度 ν_0 が決まらなければ二数の組 (l, r) だけからは決まらないのである。これらの測度から「適切な」測度を選ぶ条件が SRB 等の条件である。この測度選択の条件が力学的なものでないことに注意してほしい。SRB 条件等は、二数の組 (l, r) からは決められないのである。第2節でも触れたように、こういったことは力学系理論では周知の事実である。しかし、これは統計力学の最終目標とからめてみると物理的にも重要な問題であることが分かる。統計力学、特に還元論的な立場では、あらゆる現象は、究極の構成要素とその運動法則が分かれば理解できると考えている。しかし、測度選択の問題から、運動法則だけでなく、構成要素の従う確率法則のクラス（つまり基準となる測度）を指定しないと、現象が決まらないことがわかる。つまり (v, D) は二数の組 (l, r) だけから説明できないのである。もし、これが一般にも成り立つとすれば、統計力学の処方箋を微視的な動力学から完全に導くことはできないということになる。他の条件を考慮すると、もしかすると測度は一意的に決められるのかもしれないが、筆者には、測度選択に力学から導けない SRB 条件のようなものが要るということは、記述の階層が異なる場合に普遍的にみられる状況のように思われる。

謝辞

本稿は Brussels 自由大学の Dr. P. Gaspard との共同研究によって得られた結果を基にしており、この共同研究に関し Dr. P. Gaspard に感謝する。また、この研究は、文部省の科学研究補助金、国際

学術研究から助成を受けています。

参考文献

[1] 戸田盛和、久保亮五、斎藤信彦、橋爪夏樹「統計物理学（第 2 版）」岩波講座現代物理学の基礎 5（岩波書店、1978）.

[2] 久保泉：数学セミナー、9 月～12 月号（1982）.

[3] 中野藤生・服部真澄「エルゴード性とは何か」（丸善、1994）.

[4] J. W. Gibbs, "Elementary Principles in Statistical Mechanics" (Yale Univ. Press, 1902) .

[5] N. N. Krylov, "Works on the Foundations of Statistical Mechanics" (Princeton Univ. Press, 1979) .

[6] H. Kaburaki and M. Machida, *Phys. Lett.* **A181** (1993) 85 及び引用文献。

[7] S. Takesue, *Phys. Rev. Lett.* **64** (1990) 252 及び引用文献。

[8] N. Saito and A. Shudo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **62** (1993) 53 及び引用文献。

[9] Chaos **8** (1998) focus issue on *Chaos and Irreversibility.*

[10] S. Tasaki and P. Gaspard, J. Stat. Phys. **81** (1995) 935.

[11] P. Gaspard, *Chaos, Scattering and Statistical Mechanics* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1998); P. Gaspard and G. Nicolis, Phys. Rev. Lett. **65** (1990) 1693; P. Cvitanović, P. Gaspard and T. Schreiber, Chaos **2** (1992) 85; P. Gaspard and F. Baras, Phys. Rev. **E 51** (1995) 5332; P. Gaspard and J.R. Dorfman, Phys. Rev. **E 52** (1995) 3525; H. van Beijeren and J.R. Dorfman, Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 4412; T. Tél, J. Vollmer and W. Breymann, Europhys. Lett. **35** (1996) 659.

[12] D.J. Evans and G.P. Morriss, *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Liquids* (Academic, London, 1990); W. G. Hoover, *Computational Statistical Mechanics* (Elsevier, Amsterdam, 1991); W.N. Vance, Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 1356; A. Baranyai, D.J. Evans, and E.G.D. Cohen, J. Stat. Phys. **70** (1993) 1085; D.J. Evans, E.G.D. Cohen and G.P. Morriss, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 2401; G. Gallavotti and E.G.D. Cohen, Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 2694; J. Stat. Phys. **80** (1995) 931; E.G.D. Cohen, Physica A **321** (1995) 293; G.P. Morriss and L. Rondoni, J. Stat. Phys. **75** (1994) 553; L. Rondoni and G.P. Morriss,Phys. Rev. **E 53** (1996) 2143; W.G. Hoover, O. Kum and H.A. Posch, Phys. Rev. **E53** (1996) 2123.

[13] N.I. Chernov, G.L. Eyink, J.L. Lebowitz and Ya. G. Sinai, Phys. Rev. Lett. **70** (1993) 2209; Commun. Math. Phys. **154** (1993) 569.

[14] Wm.G. Hoover and H.A. Posch, Chaos **8** (1998) 366 及び引用文献.

[15] T. Tél, J. Vollmer and W. Breymann, Europhys. Lett. **35** (1996) 659; W. Breymann, T. Tél and J. Vollmer, Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 2945; J. Vollmer, T. Tél and W. Breymann, Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 2759; T. Tél, J. Vollmer and W. Breymann, *A multibaker model of transport in driven systems*, preprint, Eötvös Univ. (1997); J. Vollmer, T. Tél and W. Breymann, Phys. Rev. **E 58** (1998) 1672.

[16] W. Breymann, T. Tél and J. Vollmer, Chaos **8** (1998) 396.

[17] D. Ruelle, J. Stat. Phys. **85** (1996) 1; G. Gallavotti, J. Stat. Phys. **85** (1996) 899; Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 4334; G. Gallavotti and D. Ruelle, Commun. Math. Phys. **190** (1997) 279.

[18] S. Tasaki and P. Gaspard, "Thermodynamic Behavior of an Area-Preserving Multibaker Map with Energy", Theor. Chem. Accounts to appear 1999.

[19] P. Gaspard, Physica **240A** (1997) 54; J. Stat. Phys. **88** (1997) 1215.

[20] T. Gilbert and J.R. Dorfman, *Entropy Production: From Open Volume Preserving to Dissipative Systems*, preprint, Univ. of Maryland, (1998).

[21] J.-P. Eckmann and D. Ruelle, *Rev. Mod. Phys.* **57** (1985) 617; R. Bowen *Equilibrium States and the Ergodic Theory of Anosov Diffeomorphisms*, Lect. Notes in Math. 470 (Springer, Berlin, 1975).

[22] 田崎秀一、数理解析研究所講究録 938 (1996) p.47; 物性研究 vol.66 (1996) p.865.

[23] Ya. G. Sinai, Usp. Mat. Nauk **27**, (1972) 21[Russian Math. Surveys **27** (1972) 21]; D. Ruelle, Am. J. Math. **98** (1976) 619; R. Bowen and D. Ruelle, Invent. Math. **29** (1975) 181.

[24] I. Prigogine, *The End of Certainty* (The Free Press, New York, 1997) の引用文献；H.H. Hasegawa and D.J. Driebe, *Phys. Rev.* **E 50** (1994) 1781 及び引用文献；I. Antoniou and S. Tasaki, Int. J. of Quantum Chemistry, **46** (1993) 425 及び引用文献.

[25] K.F Gauss, J. Reine Angew Math. **IV**, (1829) 232.

[26] T. Yamada and K. Kawasaki, Prog. Theor. Phys. **38** (1967) 1031.

[27] J.L. Lebowitz, Physics Today, Nov. (1994) 115.