非平衡定常状態と特異測度、そして測度選択の問題

早稲田大理工・応用物理
田崎 秀一

1 序

与えられた古典系の熱力学的振舞い、特に孤立系における平衡状態への緩和を統計力学的に基礎付ける場合、

(1) 系を記述する統計分布は何か.
(2) 任意の分布が定常分布に緩和し、現象論的な緩和法則が成り立つ条件は何か.

という二点を明らかにしなければならない.

周知のように、非平衡状態を表す統計分布については様々な理論が提案され [1]、今なお新しい研究が行われている [2, 3] が、十分なコンセンサスは得られていない.

熱平衡状態に限れば一般的な分布は分かっており、任意の状態が分布で表されるとすれば、後述するように平衡分布の混合性が熱平衡状態への緩和を保証する. しかし、これで微視的な動力学から巨視的な熱力学が演繹できたわけではない. 実際、一つの力学系が非可算無限個の混合的な測度を持つことがあり、これらの測度の中から物理的に意味ある測度を力学の枠内で決めることができるあるいは観測可能な量の振舞いが測度の選択に依らないことを示さなければならないからである. これを測度選択の問題と呼ぼう.

以下では、巨視的状態の特徴付けから始め、混合性と緩和過程について説明する. 続いて、文献 [4, 5, 6] に沿い、多重パイこね変換という周期的ローレンツ気体を抽象化した、1次元格子上で定義された可逆で双曲的な力学系における非平衡定常状態への緩和を論じる. 有限長の多重パイこね変換の両端に半無限長の自由運動部分を置き、そこに粒子を Lebesgue 測度について異なる密度で一様に分布させる. そして、$t \to +\infty$ の極限で系の状態が拡散の Fick の法則に従う非平衡定常状態に(弱い意味で)緩和することを示す. この非平衡定常状態を表す分布は運動のカオス性を反映してフラクタル的になり、系の大きさが無限大の極限で特異分布になる. さらに、負方向の時間発展も同様に調べ $t \to -\infty$ の極限で負の拡散係数を持つ非平衡定常状態が得られることを示し、二つの定常状態を比較して運動法則の可逆性と状態の不可逆変化が両立することを説明する. 最後に、特異不変測度について一様な粒子分布から出発した場合に輸送現象が変わることを示し、測度選択の問題を論じる.

2 巨視的状態

2.1 古典系の状態と測度

力学の考え方をそのまま外挿すれば相空間 X の各点が状態を表すことになるが、ここではより一般的に C*代数 [7] の考え方に沿って古典系の状態について再考しよう.

実験で状態を決める手続きを思い起こそう. 状態は直接測られるわけでなく、様々な物理量の測定結果から決められる. 従って、十分多数の物理量の観測値の一覧表があれば状態は定まる. 観測可能な物理量は相空間で定義された実数値関数で表されるので、状態は、それぞれの関数に観測値

を対応させる汎関数で指定される．以下、与えられた状態ωにおける関数$f(x)$の観測値を$\omega(f)$と記す．

この汎関数の性質を考えよう．まず、十分多数の物理量を用意しないと状態の区別ができない．そこで、相空間X上で定義された連続関数は全て観測可能な物理量に含まれるとする．物理量f、gおよび実数αについて、和$f+g$とスカラー積αfの観測値は、観測値の和および観測値のスカラー倍と考えられ、必ず正値をとる物理量については観測値も正と考えられる．さらに、連続関数列$\{f_n\}$が関数f_∞に一様収束するとき、観測値もまた収束するとするものとする．つまり、以下の性質を持つと考える．

(i) $\omega(\alpha f+g)=\alpha\,\omega(f)+\omega(g)$ （f,g : X上の関数、α : 実数）
(ii) $f\geq 0\Longrightarrow\omega(f)\geq 0$ （f : X上の関数）
(iii) $\lim_{n\to+\infty}\omega(f_n)=\omega\left(\mathrm{u}\!-\!\lim_{n\to\infty}f_n\right)$ （f_n : X上の連続関数列）

ここで$\mathrm{u}-\lim$は一様極限を表す．さらに、相空間上で常に1となる関数$\mathbf{1}(z)\equiv 1$は連続で、これを測定するとその値は常に1のはずである：

(iv) $\omega(\mathbf{1})=1$

(i)〜(iii)の性質を持つ汎関数は正値連続線形汎関数と呼ばれる．

さて、相空間の部分集合$A\subset X$の特性関数をχ_Aとおく：

$$\chi_A(z)=\begin{cases}1 & z\in A\\ 0 & z\notin A\end{cases}\tag{1}$$

そして$\mu(A)\equiv\omega(\chi_A)$と定めるとこれは$X$上で定められた測度になる．任意の連続関数$f$は特性関数の和で近似される：$f(z)=\lim_{N\to\infty}\sum_j c_j^{(N)}\chi_{A_j^{(N)}}(z)$ので、

$$\omega(f)=\lim_{N\to\infty}\sum_j c_j^{(N)}\omega\left(\chi_{A_j^{(N)}}\right)=\lim_{N\to\infty}\sum_j c_j^{(N)}\mu\left(A_j^{(N)}\right)=\int_X f(z)d\mu(z)$$

つまり、汎関数ωは測度μに関する積分で表される（Rieszの定理[8]）：

$$\omega(f)=\int_X f(z)d\mu(z)\tag{2}$$

さらに、(iv)より$\mu(X)=\int_X d\mu(z)=1$なので、μは確率測度である．このように最も一般的な状態は確率測度で表される．

次に、状態の時間発展を考えよう．相空間の各点の時間発展が運動方程式（例えば、正準方程式）

$$\frac{dz}{dt}=F(z)\tag{3}$$

で記述されるとする．このとき初期点z_0から出発した軌道が時刻tに至る点を$z(t)$とし、初期点z_0に$z(t)$を対応させる写像をT_tで表す：$z(t)=T_tz_0$．明らかに(a)$T_0=$(恒等写像)で、運動方程式の解の一意性から(b)$T_tT_s=T_{t+s}$が成立し、初期値および時間に対する滑らかさから(c) $(t,z_0)\to T_tz_0$は連続である．条件(a)、(b)、(c)を満たす写像T_tを「流れ」と呼ぶ．すると、状態の時間発展は次式で与えられる：

$$\omega_t(f)\equiv\omega(f\circ T_t)\tag{4}$$

従って、測度の時間発展は、Xの部分集合をAとするとき、次のようになる：

$$\mu_t(A)=\mu\circ T_t^{-1}(A)\equiv\mu(T_t^{-1}A)$$

2.2 無限粒子系の測度と Poisson suspension

本稿では、無限に拡がった有限次元の一粒子相空間Γに同種の粒子が有限密度で分布している系を扱う. これはどのような状態で記述されるだろうか.

まず、温度β^{-1}の熱平衡状態にある理想気体の場合を考えてみよう. 理想気体が体積Vの容器の中に密度ρ_0で分布しているとしよう. このとき、座標が$\mathbf{r}_1$から$\mathbf{r}_1+d\mathbf{r}_1$で運動量が$\mathbf{p}_1$から$\mathbf{p}_1+d\mathbf{p}_1$、座標が$\mathbf{r}_2$から$\mathbf{r}_2+d\mathbf{r}_2$で運動量が$\mathbf{p}_2$から$\mathbf{p}_2+d\mathbf{p}_2$、$\cdots$ 座標が$\mathbf{r}_N$から$\mathbf{r}_N+d\mathbf{r}_N$で運動量が$\mathbf{p}_N$から$\mathbf{p}_N+d\mathbf{p}_N$の相空間内の各微小領域に粒子を一つずつ見い出す確率は

$$P_V(d\mathbf{r}_1\cdots d\mathbf{r}_N d\mathbf{p}_1\cdots d\mathbf{p}_N)=\prod_{j=1}^{N}\frac{C}{V}e^{-\frac{\beta}{2m}\mathbf{p}_j^2}d\mathbf{r}_j d\mathbf{p}_j\ . \tag{5}$$

但し、$N=\rho_0 V$は全粒子数、mは粒子の質量で、Cは規格化定数である：$C\int_{\mathbf{R}^3}e^{-\frac{\beta}{2m}\mathbf{p}^2}d\mathbf{p}=1$. 座標空間の有界閉集合$K_c$と運動量空間の有界閉集合$K_m$の直積で表される集合$K_c\times K_m$に$n$個の粒子を見い出す確率は(5)より

$$P_V\left(C_{K_c\times K_m,n}\right)=\frac{N!}{(N-n)!n!}\left(1-\frac{\nu_{eq}(K_c\times K_m)}{N}\right)^{N-n}\left(\frac{\nu_{eq}(K_c\times K_m)}{N}\right)^{n} \tag{6}$$

となる. ここで$\nu_{eq}(K_c\times K_m)$は$|K_c|$を集合K_cの体積とするとき

$$\nu_{eq}(K_c\times K_m)=\rho_0|K_c|C\int_{K_m}e^{-\frac{\beta}{2m}\mathbf{p}^2}d\mathbf{p}$$

で定義される一粒子相空間上の測度で、平均粒子数を表す. (6)でρ_0とnを一定にし体積無限大$V\to+\infty$の極限をとると粒子数nがPoisson分布に従うことが分かる：

$$\lim_{V\to\infty}P_V\left(C_{K_c\times K_m,n}\right)=\frac{\nu_{eq}(K_c\times K_m)^n}{n!}e^{-\nu_{eq}(K_c\times K_m)}\ .$$

これを一般化した分布をPoisson suspension[9]と呼ぶ.

さて、一般の場合に移ろう. 各粒子に番号をつけ、空間Γ内での位置を$z_1,z_2,\cdots z_n,\cdots\in\Gamma$とする. すると、点列$\zeta=\{z_1,z_2,\cdots\}$が系の状態を表す. 同種粒子系を考えているので順序が違う点列は区別せず、いくつかのz_jが一致する場合も含める. 今考えたいのは、有限密度で粒子が分布しているような系である. このような系では、有限の拡がりをもった領域に含まれる粒子数は有限のはずである. そこで、任意の有界閉集合 (i.e., 有限の拡がりをもつ閉集合) 内にある粒子数が有限であるような点列のみを考える. この条件を満たす点列ζの全体Xを配位空間 (configuration space) と呼ぶ. これが今考えている系の相空間である.

個々の粒子が相互作用せず、独立に運動する場合の配位空間上の測度の一つが、一粒子相空間Γ上の測度νのPoisson suspension$P$である. これはΓの有界閉集合K内で粒子がPoisson分布する確率測度で、次のように定義される. Kに丁度m個の粒子が含まれるような配位からなる部分集合$C_{K,m}=\{\zeta\in X|\#(\zeta\cap K)=m\}$を考える (ただし$\#$は集合の要素の個数を表す). このとき、$P$は$C_{K,m}$の型の集合を全て含む最小の$\sigma$代数 (i.e., 測度が定義される集合族) 上で

$$P(C_{K,m}) = \frac{\nu(K)^m}{m!}e^{-\nu(K)}\ , \tag{7}$$

$$P(C_{K,m}\cap C_{K',m'}) = P(C_{K,m})P(C_{K',m'})\ ,\quad (K\cap K'=\phi) \tag{8}$$

により定義される. Pは確率測度で、$\nu(K)$はK内に見い出される平均粒子数である.

$$\sum_{m=0}^{\infty}P(C_{K,m})=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\nu(K)^m}{m!}e^{-\nu(K)}=1\ ,\qquad \sum_{m=0}^{\infty}mP(C_{K,m})=\nu(K)\ .$$

特に ν が確率測度でないことを注意しておく.

粒子間に相互作用がないとき、一粒子相空間上の「流れ」T_t から配位空間上の「流れ」$\tilde{T}_t$ が

$$\tilde{T}_t\zeta = \{T_t z_1, T_t z_2, \cdots\} \qquad (\text{但し}、\zeta = \{z_1, z_2, \cdots\})$$

により定義される. そして、配位空間上の測度の時間発展は $P_t(C_{K,m}) = P(\tilde{T}_t^{-1}C_{K,m})$ となる. 特に、Poisson suspension は、Poisson suspension のまま時間発展する:

$$P_t(C_{K,m}) = \frac{\nu_t(K)^m}{m!}e^{-\nu_t(K)} \; , \tag{9}$$

ただし、$\nu_t \equiv \nu \circ T_t^{-1}$ は時刻 t での測度である.

3 混合性と定常状態への緩和

序で触れたように平衡状態を表す測度 μ_{eq} が混合的なら、平衡状態への緩和は自然に説明される. 混合性とは、任意の物理量 f、g の相関関数がそれぞれの平衡平均の積に緩和する性質である:

$$\lim_{t\to+\infty}\int_X f(T_t z)g(z)d\mu_{eq}(z) = \int_X f(z)d\mu_{eq}(z)\int_X g(z)d\mu_{eq}(z) \tag{10}$$

ここで、平衡測度 μ_{eq} に絶対連続な初期測度 μ_0 を考え、その密度分布関数を ρ_0 としよう:$d\mu_0 = \rho_0 d\mu_{eq}$. μ_0 の規格化条件 $\int_X \rho_0(z)d\mu_{eq}(z) = 1$ に注意すると、時刻 t での物理量 f の平均値 $\langle f\rangle_t$ が $t \to +\infty$ の極限で

$$\langle f\rangle_t \equiv \int_X f(T_t z)\rho_0(z)d\mu_{eq}(z) \equiv \int_X f(z)\rho_0(T_{-t}z)d\mu_{eq}(z) \to \int_X f(z)d\mu_{eq}(z) \quad (t\to+\infty) \tag{11}$$

と熱平衡値に緩和することが分かる. 平衡測度 μ_0 の不変性から2番目の等号が成り立つ. このように、熱平衡を表す測度が混合的なら、熱平衡への緩和は自然に説明される. このアイデアはGibbs[10] に遡るが、その後 Krylov[11] が緩和過程と混合性の関係を詳細に吟味している. ここで、(11) から $\rho_0(T_{-t}z) \to 1$ は言えないことを注意しておく. 初期測度は平均値が収束するという意味でのみ平衡測度に収束するのである. これを測度の弱収束と呼ぶ.

平衡状態への緩和過程は典型的な不可逆変化である. それが測度の弱収束として位置付けられるということは、非平衡状態を引き起こすような初期状態から出発することで、理にかなった非平衡定常状態が得られると考えられる. つまり、非平衡状態を生じる初期測度を μ_0 とするとき、非平衡定常状態を表す測度 μ_{st} は

$$\mu_{st} = \mathrm{w-}\lim_{t\to+\infty}\mu_0\circ T_{-t} \tag{12}$$

のように得られる. ここで $\mathrm{w-}\lim$ は弱収束を意味する. 特に、系がいくつかに分けられるとき、各部分系が異なる熱平衡にある初期状態から (12) に従って非平衡状態を構成する方法は、部分系を異なる熱平衡に置いて結合させ時間発展を見るという思考実験に相当している.

ところで、エルゴード理論でよく知られているように [12]、混合的な系はエルゴード的であり、

任意の可積分関数 f について、その長時間平均は、μ_{eq} についてほとんど全ての初期点 z_0 について μ_{eq}-平均と一致する:

$$\lim_{T\to+\infty}\frac{1}{T}\int_0^T dt f(T_t z_0) = \int_\Gamma f(z)d\mu_{eq}(z) \; . \tag{13}$$

が成り立つ. これは、「大多数の初期状態から出発した軌道では熱力学的な振舞いが見られ、例外的初期状態は非常に少ない」という Boltzmann 以来の描像を表していると考えることもできる. こ

の命題から、μ_{eq} が物理的に許される唯一の測度で、測度選択の問題が存在しない印象を受けるかもしれないが、そうではない．初期条件の多少を測るのに μ_{eq} が使われていることに注意してほしい．μ_{eq} と特異的な測度を用いて初期条件の多少を測ると、「ほとんど全て」の初期点について (13) とは違う振舞いが見られるのである．ここに測度選択の問題が生じる原因がある．

4 多重パイこね変換

多重パイこね変換は周期的 Lorentz 気体の回帰写像を抽象化したもので、格子点に配された正方形列

$$\Gamma=\{(n,x,y)|n\in\mathbf{Z},\ 0<x\leq 1, 0<y\leq 1\}\ , \tag{14}$$

上で定義され、各正方形上のパイこね変換とずらし写像の合成写像である [13, 4, 14]．相空間 Γ やパイこね変換の選び方によって様々な多重パイこね変換が可能だが、ここでは次のものを考える：

$$B(n,x,y)=\begin{cases}\left(n-1,\ \dfrac{x}{l},\ l\,y\right)\ , & (0<x\leq l)\\ \left(n,\ \dfrac{x-l}{s},\ sy+l\right)\ , & (l<x\leq 1-l)\\ \left(n+1,\dfrac{x-(1-l)}{l},ly+(1-l)\right)\ , & (1-l<x\leq 1)\end{cases} \tag{15}$$

パラメータ $l\in(0,1/2]$ は一つ隣りの格子点への遷移確率に、 $s\equiv 1-2l$ は同一格子点への遷移確率に相当する．x 方向に伸び y に縮むので、B が双曲的であることが分かる．

さて、長さ $N+1$ の多重パイこね変換を「自由運動」が定義された半無限長格子に埋め込もう．但し、「自由運動」はずらし写像でモデル化する．全系の運動は、$n\in[1,N-1]$ のとき (15) で、$n\leq -2$ 又は $n\geq N+2$ のときは

$$B(n,x,y)=\begin{cases}(n-1,x,y)\ , & (0<x\leq l)\\ (n,x,y)\ , & (l<x\leq 1-l)\\ (n+1,x,y)\ , & (1-l<x\leq 1)\end{cases} \tag{16}$$

で与えられる．$n=-1,0,N,N+1$ の格子点は結合部にあたり、$B(-1,x,y)$ $(1-l<x\leq 1)$、$B(N+1,x,y)$ $(0<x\leq l)$、$B(0,x,y)$ $(l<x\leq 1)$ 及び $B(N,x,y)$ $(0<x\leq 1-l)$ は (15) 式で、$B(-1,x,y)$ $(0<x\leq 1-l)$ と $B(N+1,x,y)$ $(l<x\leq 1)$ は (16) 式で、残りの部分は次式で与えられる．

$$B(0,x,y) = \left(-1,ly,\frac{x}{l}\right)\ ,\qquad (0<x\leq l) \tag{17}$$

$$B(N,x,y) = \left(N+1,ly+(1-l),\frac{x-(1-l)}{l}\right)\ ,\qquad (1-l<x\leq 1) \tag{18}$$

(15)、(16)、(17) 及び (18) 式が時間発展を与える．この系は無限に拡がった自由運動する系に有限長の双曲系が埋め込まれているので、カオス散乱系になっている．容易に分かるように、Lebesgue 測度は不変である．また、$I^2=I$ を満たす写像

$$I\ (n,x,y)\equiv\begin{cases}(n,1-y,1-x), & (\text{for}\ \ 0\leq n\leq N)\\ (n,1-x,1-y), & (\text{for}\ \ n\leq -1\ \text{or}\ n\geq N+1)\end{cases}\ , \tag{19}$$

について $IB^tI=B^{-t}$ 故、写像 B は時間反転対称でもある．

5 状態の時間発展と定常状態

5.1 Poisson suspension の時間発展

相空間 Γ に同種粒子が有限密度で分布し、各粒子の運動は独立に B で与えられるとしよう．このとき Poisson suspension で表される状態の時間発展 (9) を考える．初期時刻で平均粒子数分布 ν が Lebesgue 測度について絶対連続の場合、測度 ν_t の部分累積分布関数

$$G_t(n,x,y) \equiv \int_0^y dy' \rho_0 \left(B^{-t}(n,x,y')\right) \tag{20}$$

を用いるのが便利である．但し、ρ_0 は相空間における初期粒子数密度である．部分累積分布関数の発展方程式 [5] は以下のようになる：

$y \in [0,l)$ のとき

$$G_{t+1}(n,x,y) = lG_t\left(n+1,\ lx,\ \frac{y}{l}\right) \ , \tag{21}$$

$y \in [l, 1-l)$ のとき

$$G_{t+1}(n,x,y) = lG_t\left(n+1,\ lx,\ 1\right) + s\ G_t\left(n,\ sx+l,\ \frac{y-l}{s}\right) \ , \tag{22}$$

$y \in [1-l, 1]$ のとき

$$\begin{aligned} G_{t+1}(n,x,y) \ &= \ lG_t\left(n+1,\ lx,\ 1\right) + s\ G_t\left(n,\ sx+l,\ 1\right) \\ &\quad + lG_t\left(n-1,\ lx+1-l,\ \frac{y-1+l}{l}\right) \ . \end{aligned} \tag{23}$$

ここでは、左右の自由運動部分に粒子が（Lebesgue 測度について）一様分布する初期状態の時間発展を考えよう．$(-\infty,-1]$、$[N+1,+\infty)$ の格子点上での初期粒子密度をそれぞれ ρ_- 及び ρ_+ とすれば、中間部の時間発展は次の境界条件の下での時間発展と等価である [4].

$$G_t(-1,x,y) = \rho_-\ y \ ; \qquad G_t(N+1,x,y) = \rho_+\ y \ . \tag{24}$$

5.2 長時間での振舞い

初期分布関数 ρ_0 が x について区分的に連続微分可能なら、測度 ν_t は $t \to +\infty$ である定常的測度 $\nu_{+\infty}$ に近づく．その部分累積分布関数 $G_{+\infty}$ は変数 x によらず、

$$G_{+\infty}(n,y) = \Pi_{+\infty}(n)\ y - \frac{J^{+\infty}_{n|n+1}}{l}\ \varphi_n(y) \tag{25}$$

で与えられる．ここで、

$$\Pi_{+\infty}(n) = \frac{\rho_+ - \rho_-}{N+2}\ (n+1) + \rho_- \ , \tag{26}$$

は格子点 n 上の粒子数で、$J^{+\infty}_{n|n+1}$ は格子点 n から $n+1$ への粒子流で拡散の Fick の法則を満たす：

$$J^{+\infty}_{n|n+1} = -l\ \frac{\rho_+ - \rho_-}{N+2} \ . \tag{27}$$

この粒子流と粒子密度の関係、よって定常状態 $\nu_{+\infty}$ は熱力学の第２法則にかなっており、時間反転対称でないことを注意しておく．

また、関数 φ_n は境界条件 $\varphi_{-1}(y)=\varphi_{N+1}(y)=0$ を満たす次の方程式の唯一解である：

$$\varphi_n(y)=\begin{cases} l\,\varphi_{n+1}\left(\frac{y}{l}\right)+y\ , & (0\le y\le l)\ , \\ s\,\varphi_n\left(\frac{y-l}{s}\right)+l\ , & (l\le y\le 1-l)\ , \\ l\,\varphi_{n-1}\left(\frac{y-1+l}{l}\right)+1-y\ , & (1-l\le y\le 1)\ , \end{cases} \tag{28}$$

この関数のため (25) はフラクタル分布となる．特に、$N\to+\infty$ のとき、分布は特異的になる．

発展方程式 (21)-(23) から、G_t が指数関数的に定常分布 $G_{+\infty}$ に近づくことも分かる：

$$G_t(n,x,y)-G_{+\infty}(n,y) = \sum_{\substack{j=1\\|\kappa_j|>\lambda}}^{N+1}\kappa_j^t b_j\gamma_j(n,y)+\delta\mathcal{G}_t(n,x,y)\ , \tag{29}$$

ここで、$\lambda=\max(1-2l,l)$ で、右辺の和は $|\kappa_j|>\lambda$ を満たす j に渡り、$\delta\mathcal{G}_t$ は $|\delta\mathcal{G}_t|=\mathrm{O}(\mathrm{t}^2\lambda^\mathrm{t})$ の程度で減衰する．緩和率 $\kappa_j(<1)$ は

$$\kappa_j=1-2l+2l\cos(\frac{\pi j}{N+2}) \tag{30}$$

で、Pollicott-Ruelle の共鳴 [15, 16] に相当する．減衰モードを表す $\gamma_j(n,y)$ は $\varphi_n(y)$ と同様、フラクタル・グラフを持つ関数で、b_j は初期分布によって決まる係数である．つまり、運動法則の可逆性にもかかわらず、状態は一方向的に Fick の法則を満たす定常状態に向かって時間発展する．

さらに、Gaspard[17] や Gilbert-Dorfman[18] 式の相対粗視化エントロピー生成について、その符号が正で、適当なスケール極限の下で現象論的表式になることを示すことができる [5].

5.3 逆発展の定常状態及び運動の可逆性

定常状態 $\nu_{+\infty}$ は時間反転対称でなく、運動法則は対称である．従って、これを時間反転した別の定常状態 $\nu_{-\infty}$ が存在する．状態 $\nu_{-\infty}$ における格子点あたりの粒子数 $\Pi_{-\infty}(n)$ は、元の状態と同一だが、粒子流 $J^{-\infty}_{n|n+1}$ は逆符号を持ち、その結果、反 Fick の法則が成り立つ：

$$\Pi_{-\infty}(n)=\Pi_{+\infty}(n)\ , \qquad J^{-\infty}_{n|n+1}=l\,\frac{\rho_+-\rho_-}{N+2}\ . \tag{31}$$

この意味で状態 $\nu_{-\infty}$ は「反」熱力学的である．

状態 $\nu_{-\infty}$ は、初期状態を負の方向に時間発展させた場合（i.e., $t\to-\infty$ の場合）の極限でもある．負の時間発展で近づくことは、正の時間発展で遠ざかることなので、$\nu_{-\infty}$ は「状態の空間」の中で、リペラーのように振舞う．結局、前節の結果も含めると、「状態の空間」の中で $\nu_{+\infty}$ はアトラクターとして、また $\nu_{-\infty}$ はリペラーとして振舞い、状態はリペラーからアトラクターに向かって一方向的に変化する．Ref.[6] で詳しく議論したように、この時間発展は運動法則の可逆性と両立する．

6 測度選択の問題

一般に一つの力学系には、非可算無限個の不変測度あるいは混合的な測度が存在し、単一の「物理的測度」をどう選択するかは力学系理論の重要な問題の一つである [19]．これまでに、二つの物

理的測度が提案されている [19]．一つは、外部からノイズを入れ、ノイズがゼロの極限で得られる測度（Kolmogorov 測度）で、もう一つは、Lebesgue 測度についてランダムに用意された初期状態から得られる軌道についての長時間平均を記述する測度（Sinai-Ruelle-Bowen 測度 [20]）である．

さて、相空間の様子が詳細に観測できるなら不変測度の違いも観測でき、測度選択の問題は物理的にも重要である．ところで、我々が観測できる量（巨視的観測可能量）は限られており、しかも誤差をなくすことはできない．従って、仮に巨視的観測可能量の振舞いが不変測度によらないなら、測度選択の問題は物理的には重要でないことになる．本節では、多重パイこね変換について、この点を吟味し、格子点当たりの粒子数や格子点間の粒子流といった巨視的観測可能量の振舞いが実際に不変測度によることを示す．

次式で与えられる相空間上の測度 $\mu^{(\Lambda\beta)}$ を考えよう．

$$\begin{aligned} \mu^{(\Lambda\beta)}\left(\Gamma(n,\xi,\eta)\right) &= \Lambda^n \psi_{\Lambda\beta}(\xi)\bar{\psi}_{\Lambda\beta}(\eta) \qquad (32)\\ \Gamma(n,\xi,\eta) &= \{(n,x,y)\,|\,0 \le x < \xi\ ,0 \le y < \eta\ .\}\ , \qquad (33)\end{aligned}$$

関数 $\psi_{\Lambda\beta}(\xi)$ は方程式

$$\psi_{\Lambda\beta}(\xi) = \begin{cases} \dfrac{1-\beta}{1+\Lambda}\,\psi_{\Lambda\beta}\left(\dfrac{\xi}{l}\right)\ , & (0<\xi<l) \\ \beta\,\psi_{\Lambda\beta}\left(\dfrac{\xi-l}{s}\right) + \dfrac{1-\beta}{1+\Lambda}\ , & (l<\xi<1-l) \\ \dfrac{\Lambda(1-\beta)}{1+\Lambda}\,\psi_{\Lambda\beta}\left(\dfrac{\xi-1+l}{l}\right) + \dfrac{1+\Lambda\beta}{1+\Lambda}\ , & (1-l<\xi<1) \end{cases} \qquad (34)$$

の唯一解で、$\bar{\psi}_{\Lambda\beta}(\eta) \equiv 1-\psi_{\Lambda\beta}(1-\eta)$ である．ただし、Λ と $\beta \in (0,1)$ は正のパラメータである．容易に分かるように、全ての Λ と β について、測度 $\mu^{(\Lambda\beta)}$ は B 不変である．

平均粒子数分布が $\mu^{(\Lambda\beta)}$ について絶対連続で、$0 \le n \le N$ のとき

$$\nu_0^{(\Lambda\beta)}\left(\Gamma(n,\xi,\eta)\right) = \Lambda^n \int_0^\xi d\psi_{\Lambda\beta}(\xi')\int_0^\eta d\bar{\psi}_{\Lambda\beta}(\eta')\bar{\rho}_0(n,\xi',\eta') \qquad (35)$$

で、それ以外の場合、

$$\nu_0^{(\Lambda\beta)}\left(\Gamma(n,\xi,\eta)\right) = \begin{cases} \rho_-\Lambda^{-1}\psi_{\Lambda\beta}(\xi)\bar{\psi}_{\Lambda\beta}(\eta)\ , & (n \le -1) \\ \rho_+\Lambda^{N+1}\psi_{\Lambda\beta}(\xi)\bar{\psi}_{\Lambda\beta}(\eta)\ . & (n \ge N+1) \end{cases} \qquad (36)$$

と与えられるとしよう．ここで、$\bar{\rho}_0$ は多重パイこね部分の密度分布関数で、$\rho_\pm$ は自由部分の粒子数密度である．

すると、初期密度 $\bar{\rho}_0(n,\xi,\eta)$ が ξ について区分的に連続微分可能ならば、前と同様に、初期測度が $t \to +\infty$ の極限で定常測度 $\nu_{+\infty}^{(\Lambda\beta)}$ に収束することが示せる．この状態では格子点あたりの粒子数 $\widetilde{\Pi}_{+\infty}(n)$ および格子点 n から $n+1$ への粒子流 $\widetilde{J}_{n|n+1}^{+\infty}$ は

$$\begin{aligned} \widetilde{\Pi}_{+\infty}(n) &= (\rho_+ - \rho_-)\,\frac{\Lambda^{N+1}\left(1-\Lambda^{n+1}\right)}{1-\Lambda^{N+2}} + \rho_-\Lambda^n\ , \qquad (37)\\ \widetilde{J}_{n|n+1}^{+\infty} &= -\,\frac{1-\beta}{1+\Lambda}\,(\rho_+ - \rho_-)\,\frac{\Lambda^{N+1}\left(1-\Lambda\right)}{1-\Lambda^{N+2}}\ . \qquad (38)\end{aligned}$$

で与えられる．

格子点あたりの粒子数および粒子流という巨視的量が写像のパラメータ l ではなく、不変測度のパラメータ Λ および β にのみ依存していることに注意してほしい．例えば、与えられた系の運動が多重パイこね変換 B によって記述されることが分かっているとしよう．このとき、変換のパラメー

タ l を巨視的性質から定められるだろうか. (37) および (38) から分かるように、答は否である. 多重パイこね変換の場合、不変測度によって輸送現象などの巨視的性質が変わり、物理的測度を選ばなければ微視的な運動法則と巨視的現象が対応付けられないのである.

さらに、初期測度として平均粒子数密度が $\nu_{-\infty}$ の局所的摂動 $\nu_0^* = \nu_{-\infty} + \nu^{loc}$ で与えられる場合を考えてみよう. ここで、ν^{loc} は不変測度の一つについて絶対連続で密度関数は $0 \le n \le N$ 以外ではゼロになるものとする. すると、ν^{loc} からの寄与は $t \to +\infty$ で消えるので、長時間極限で $\nu_{+\infty}^* = \nu_{-\infty}$ となる. 初期測度によっては、反熱力学的振舞いすら現われるのである.

前述したように、物理的測度としては、これまでに Kolmogorov 測度と Sinai-Ruelle-Bowen 測度の二つが提案されているが、どちらの測度も力学から導けないことを注意しておく. 前者では、今考えている系外部からのノイズが必要で、後者では Lebesgue 測度が a priori に特別な役割を持つからである. つまり、力学系の統計的振舞いは力学だけから決定できない、言い替えると、力学から統計的振舞いを演繹できないのである.

7 結語

本稿では無限に拡がった1次元格子上で定義された多重パイこね変換において、左右の半無限部分に粒子が異なる密度で (Lebesgue 測度について) 一様分布する状態に置くと、$t \to +\infty$ のとき平均粒子数密度 $\nu_{+\infty}$ によって表される定常状態に収束することを示した. この状態では粒子の流れが存在し、拡散の Fick の法則が成り立つ. $t \to -\infty$ の極限では初期状態は別の定常状態 $\nu_{-\infty}$ に収束する. これは $\nu_{+\infty}$ の時間反転状態であり、拡散係数が負になるなど反熱力学的性格を持つ. つまり、「状態の空間」で考えると、熱力学的に正常な定常状態 $\nu_{+\infty}$ は「アトラクター」のように振舞い、反熱力学的定常状態 $\nu_{-\infty}$ は「リペラー」のように振舞う. そして、初期状態は、力学の可逆性と矛盾せずに、「リペラー」から「アトラクター」に向かって一方向的に時間発展していく.

このように、状態が一方向的に変化するという意味の不可逆性と動力学の可逆性とは両立する. だからといって全てが動力学から導かれるわけではなく、前節で示したように、輸送現象など巨視的性質を決める Lebesgue 測度や不変測度 $\mu^{(\Lambda\beta)}$ から物理的測度を力学によって決定することはできない.

本稿では、孤立系が力学法則に従って時間発展する場合の状態の緩和に注目して巨視的振舞いと微視的動力学の関係を論じた. 近年、外からの操作に対する系の応答を調べるという立場から、熱力学・統計力学の見直しが行われている [21]. このアプローチ (操作論的アプローチ) においても平衡状態への緩和は重要であるが、筆者の知る限り、仮定されるか、あるいは Langevin 方程式等を経由して確率論的に考慮されているだけである. 従って、両アプローチを融合することは興味深く今後の課題である.

参考文献

[1] 戸田盛和、斉藤信彦、久保亮五、橋爪夏樹「統計物理学」(現代物理学の基礎 (第2版) 5、岩波書店): D.N. ズバーレフ「ズバーレフ非平衡統計熱力学」(久保亮五、鈴木増雄、山崎義武訳、丸善) など.

[2] P. Gaspard, *Chaos, Scattering and Statistical Mechanics*, (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1998): J.R. Dorfman, *An Introduction to Chaos in Non-Equilibrium Statistical Mechanics*, (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1999).

[3] D.J. Evans and G.P. Morriss, *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Liquids* (Academic, London, 1990); W.G. Hoover, *Computational Statistical Mechanics* (Elsevier, Amsterdam, 1991).

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

[5] S. Tasaki and P. Gaspard, Theor. Chem. Acc. **102**, 385 (1999); J. Stat. Phys. **101** 125 (2000).

[6] S. Tasaki, *Irreversibility in Reversible Multibaker Maps* to appear in the Proc. of the 21st Solvay Conference (November 1-5, 1998, Keihanna, Kyoto) (2001).

[7] O. Bratteli and D.W. Robinson, *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics 1* (Springer, New York, 1987); *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics 2*, (Springer, New York, 1997). アカルディ ルイジ、尾畑伸明「代数的確率論入門」(名古屋大学多元数理講義録 vol.2, 1999) も参照.

[8] E. Hewitt and K. Stromberg, *Real and Abstract Analysis* (Springer, New York, 1965).

[9] I.P. Cornfeld, S.V. Fomin and Ya.G. Sinai, *Ergodic Theory*, (Springer, New York, 1982); L.A. Bunimovich et al., *Dynamical Systems, Ergodic Theory and Applications*, Encyclopedia of Mathematical Sciences **100**, (Springer, Berlin, 2000).

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

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

[12] 十時東生、「エルゴード理論入門」(共立出版).

[13] P. Gaspard, J. Stat. Phys. **68**, 673 (1992).

[14] T. Tél and J. Vollmer, *Multibaker Maps and the Lorentz Gas* in *Hard Ball Systems and the Lorentz Gas*, ed. D. Szász, Encyc. Math. Sci. **101**, (Springer, Berlin, 2000) も参照.

[15] M. Pollicott, Invent. Math. **81**, 413 (1985); Invent. Math. **85**, 147 (1986); Ann. Math. **131**, 331 (1990).

[16] D. Ruelle, Phys. Rev. Lett. **56**, 405 (1986); J. Stat. Phys. **44**, 281 (1986); Commun. Math. Phys. **125**, 239 (1989); Publ. Math. IHES **72**, 175 (1990).

[17] P. Gaspard, J. Stat. Phys. **88**, 1215 (1997).

[18] T. Gilbert and J.R. Dorfman, J. Stat. Phys. **96**, 225 (1999).

[19] J.-P. Eckmann and D. Ruelle, Rev. Mod. Phys. **57**, 617 (1985).

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

[21] 佐々真一「熱力学入門」(共立出版): 田崎晴明「熱力学」(培風館) 及び引用文献.