

可逆力学系における決定論的拡散

ミクロ力学とマクロ現象論のインターフェイス
としてのフラクタル構造

基礎化学研究所 田崎 秀一

Brussels 自由大 Pierre Gaspard

§1. 序

輸送現象はマクロなレベルでは現象論的法則によって記述される。他方、ミクロなレベルでは系を構成する粒子は純力学的法則に従って運動している。この両者の関係を明らかにすることは輸送現象を理解する上で非常に重要な問題である。ミクロな力学法則に基づく現象論的法則の導出、輸送係数の計算に関しては、これまで活発に研究が行なわれ、久保らによる線形応答理論など数多くの理論が提出されている。また適当なスケーリング極限をとることにより直接ミクロな力学法則から輸送現象のマクロな側面を捉えようというアプローチも行なわれている¹⁾。近年、著者の一人 (GP) らによって^{2,8)}、輸送現象に付随しミクロなレベルで Fractal Repeller が形成され得、そこからの逃散率と輸送係数の間に密接な関係が生じることが議論されている。この Fractal Repeller は輸送現象によって減衰する物理量 C が与えられた範囲 $c_0 \leq C \leq c_0 + \Delta$ の値をとり続ける軌道から成る。これはミクロな力学とマクロな現象論をつなぐインターフェイスとしてフラクタルが重要な役割を果たしていることを示唆している。ここでは少し違う角度から力学系に現れる拡散過程におけるフラクタルの役割を見ていく。

拡散を示す純力学的カオス モデルは、近年いろいろと提案され、その性質が研究されている³⁻¹¹⁾。とりわけ、ベルヌーイ写像を空間的に拡張したモデル⁵⁻⁷⁾やパイコね変換を空間的に拡張した保存的なモデル⁹⁻¹¹⁾では、平衡への接近を特徴付ける減衰モードおよび減衰率が密度分布関数の時間発展演算子 (Frobenius-Perron 演算子) の一般化された固有関数および対応する固有値として計算されることが示されている。この固有値 (の対数) は Pollicott-Ruelle の共鳴^{12,13)}に相当している。非可逆性と分布関数の時間発展演算子の間にあるこのような関係の存在とその一般性は、Prigogine ら¹⁴⁻¹⁸⁾によって主張されている。その理論では、(通常は現象論的方程式やマスター方程式を通して得られる) 熱平衡への接近を特徴付ける減衰率・減衰モードが、分布関数の時間発展演算子 (Liouville-von Neumann 演算子) の一般化された固有値・固有関数として計算される。

以下の節では多重パイコね変換という保存的な決定論的拡散モデルを取り上げ、厳密に、分布関数の時間発展演算子の固有値問題の解として現象論的減衰モードを導き、非平衡定常状態を構成する。そして、フラクタル的な特異測度が重要な役割を演じていることを示す。2 節でモデルを説明し、3 節で累積分布関数の発展方程式を導く。4 節では均一分布からのずれの減衰を密度分布関数の発展演算子の固有値問題を通じて調べ、5 節では累積分布関数の発展方程式の定常解として非平衡状態を構成し、その性質を論じる。詳細は文献 9、31-33 を参照されたい。

§2. 多重パイこね変換

多重パイこね変換は、格子状に配列された無限個の単位正方形上で定義される可逆な写像で、拡散を示す。Gaspard⁸⁾は四進版の多重パイこね変換を構成し、拡散および非平衡状態の性質をゼータ関数と"Thermodynamic Formalism"を利用して厳密に調べた。多重パイこね変換は Lebesgue 測度を一つの不変測度として持ち、一様分布からのずれは拡散過程を経て減衰する。この減衰過程を記述する Frobenius-Perron 演算子のスペクトルの性質は、Gaspard⁹⁾、長谷川、Driebe¹⁰⁾、田崎、Hakmi、Antoniu¹¹⁾により調べられた。系の周期性により、Frobenius-Perron 演算子の Fourier 変換は、準運動量に関してブロック対角化される。各 Fourier 成分は、ユニタリーであるにもかかわらず、Jordan ブロックの構造を持つことが形式的に示される。この結果は、Frobenius-Perron 演算子の定義域を二乗可積分関数のなす Hilbert 空間より広い関数空間に拡張することにより数学的に正当化できる。この点に関しては、4 節で触れる。

ここでは、次のように定義される最も単純な多重パイこね変換 B を扱う。

$$B(n, x, y) = \begin{cases} (n-1, 2x, \frac{y}{2}), & 0 \leq x < 1/2 \\ (n+1, 2x-1, \frac{y+1}{2}), & 1/2 \leq x \leq 1 \end{cases} \quad (2.1)$$

ここで、整数 n は、単位正方形のラベルであり、実数の組 (x, y) ($0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1$) は、各単位正方形内での座標を表わす。図 1 に、写像 B を模式的に示す。容易にわかる様に、写像 B は、保測かつ可逆で、次の逆写像を持つ。

$$B^{-1}(n, x, y) = \begin{cases} (n+1, \frac{x}{2}, 2y), & 0 \leq y < 1/2 \\ (n-1, \frac{x+1}{2}, 2y-1), & 1/2 \leq y \leq 1 \end{cases} \quad (2.2)$$

さらにこの系は、変換

$$I(n, x, y) \equiv (n, 1-y, 1-x) \quad (2.3)$$

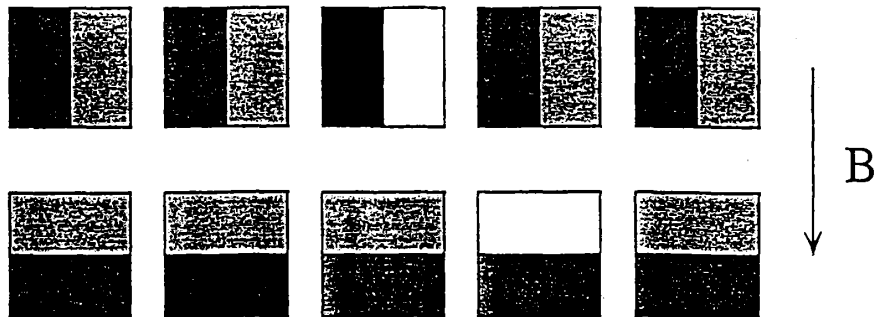


図 1: 多重パイこね変換 B

に対して

$$B^{-1} = IBI, \quad (2.4)$$

という性質を持つので、時間反転不変である。変換 I は、通常の力学系での速度反転の操作に対応している。多重パイコネ変換 B は、一様に双曲的であり、その最大 Lyapunov 指数は $\ln 2$ である。

§3. 測度の時間発展

統計力学の通常のアプローチでは、考えている系の状態は分布関数によって指定される。分布関数は Liouville 測度に関して絶対連続な測度を定め、逆にそのような測度は分布関数を定める。つまり、系の状態は、相空間上で定義された測度により表わされている。今、測度の時間発展を直接考えると、必ずしも Liouville 測度に関して絶対連続でない測度も含めることができ、より一般の場合も扱える。

多重パイコネ変換の場合にこれを実行しよう。一般性を損なうことなく測度 μ を Borel 測度に限ることができる。この時、任意の μ -可測集合は、次の様な半開矩形の可算個の和集合として表わされる。

$$\{[0, x) \times [0, y)\}_n, \quad (3.1)$$

ここで添字 n は、矩形 $[0, x) \times [0, y)$ が n 番目の単位正方形の部分集合であることを示す。従って、測度 μ は、累積分布関数 G :

$$G(n, x, y) \equiv \mu\left(\{[0, x) \times [0, y)\}_n\right), \quad (3.2)$$

により完全に指定される。測度 μ の時間発展方程式は、Liouville 方程式と同様に導出される。

$$\mu_{t+1}(A) = \mu_t(B^{-1}A), \quad (3.3)$$

ここで、 μ_t は時刻 t での測度を表し、 A は任意の可測集合である。矩形 $\{[0, x) \times [0, y)\}_n$ の逆像が

$$B^{-1}\left\{[0, x) \times [0, y)\right\}_n = \begin{cases} \left\{[0, \frac{x}{2}) \times [0, 2y)\right\}_{n+1}, & 0 \leq y \leq 1/2 \\ \left\{[0, \frac{x}{2}) \times [0, 1)\right\}_{n+1} \cup \left\{[\frac{1}{2}, \frac{x+1}{2}) \times [0, 2y-1)\right\}_{n-1}, & 1/2 < y \leq 1 \end{cases} \quad (3.4)$$

と与えられるので、累積分布関数 G の発展方程式は結局

$$G_{t+1}(n, x, y) = \begin{cases} G_t(n+1, \frac{x}{2}, 2y), & 0 \leq y \leq 1/2 \\ G_t(n+1, \frac{x}{2}, 1) + G_t(n-1, \frac{x+1}{2}, 2y-1) \\ \quad - G_t(n-1, \frac{1}{2}, 2y-1), & 0 \leq y \leq 1/2 \end{cases} \quad (3.5)$$

となる。ここで $G_t(n, x, y) \equiv \mu_t(\{[0, x] \times [0, y]\}_n)$ は時刻 t での測度の累積分布関数である。
(3.5) 式で $x=1, y=1$ と置くと

$$G_{t+1}(n, 1, 1) = \alpha_{n+1,t} G_t(n+1, 1, 1) + (1 - \alpha_{n-1,t}) G_t(n-1, 1, 1), \quad (3.6)$$

が得られる。ただし $\alpha_{n,t} \equiv G_t(n, 1/2, 1)/G_t(n, 1, 1)$ である。明らかに不等式 $0 \leq \alpha_{n,t} \leq 1$ が成立するので、(3.6) 式は、時刻 t のサイト n から $(n-1)$ への遷移確率が $\alpha_{n,t}$ である様な酔歩を表わしている。 $\alpha_{n,t}$ は選んだ測度に依存して様々な値を取り得るが、これは多重パイこね変換という力学系が無数の確率過程（酔歩）を含んでいることを意味している。

§4. 均一な定常状態への緩和

関数 $f_\alpha(x)$ を deRham 方程式^{19-21,7)}

$$f_\alpha(x) = \begin{cases} \alpha f_\alpha(2x), & 0 \leq x \leq 1/2 \\ (1 - \alpha) f_\alpha(2x - 1) + \alpha, & 1/2 < x \leq 1 \end{cases} \quad (4.1)$$

の一意解とし、

$$G(n, x, y) = f_\alpha(x) f_\alpha(y), \quad (4.2)$$

とおくと、容易に分かる様にこれは方程式 (3.5) の定常解である。つまり (4.2) の累積分布を持つ測度 μ_α は、多重パイこね変換 B の不変測度である。文献 19,20 で調べられているように (22,23 も参照)、関数 $f_\alpha(x)$ は、 $\alpha \neq 1/2$ ($0 < \alpha < 1$) の時、ほとんどいたる所で導関数が零となる連続な狭義単調増加関数、つまり、Lebesgue の意味での特異関数である。 $\alpha = 1/2$ の時は、これは可微分な関数 $f_{1/2}(x) = x$ になり、対応して測度 $\mu_\alpha|_{\alpha=1/2}$ は Lebesgue 測度となる。あとで見るように、異なる測度は異なる酔歩に対応している。

この節では、 μ_α で表される状態からのずれの緩和について調べる。ずれた状態としては、 μ_α に関し密度 ρ_t を持つ（即ち μ_α について絶対連続な）測度 μ_t で表されるもののみを考える。

$$G_t(n, x, y) = \int_0^x dx' \int_0^y dy' \rho_t(n, x', y'). \quad (4.3)$$

この時 G_t の運動方程式 (3.5) 式は密度 ρ_t の運動方程式

$$\rho_{t+1}(n, x, y) = U \rho_t(n, x, y) \equiv \rho_t(B^{-1}(n, x, y)) = \begin{cases} \rho_t(n+1, \frac{x}{2}, 2y), & 0 \leq y < 1/2 \\ \rho_t(n-1, \frac{x+1}{2}, 2y-1), & 1/2 \leq y \leq 1 \end{cases} \quad (4.4)$$

と等価である。(4.4) 式中で定義される演算子 U は Frobenius-Perron 演算子と形式的に一致し、二乗可積分関数 ($\sum_n \int d\mu_\alpha |\rho|^2 < +\infty$ を満たす関数 ρ) の作る Hilbert 空間 $\mathcal{H}_\alpha$ 上でユニタリーである。

Hilbert 空間上では、 U のユニタリー性から散逸的な時間発展を期待することはできない。しかし、写像 B はエルゴード的なので⁸⁾、相関関数の時間発展に関しては平衡への接近を期待することができ、事実、次の命題が成立する³³⁾。これは、拡大写像、公理 A 系について成立する Pollicott-Ruelle の定理^{12, 13)} の特別な場合である。

命題

関数空間 $C_{\alpha x}$ を

$$C_{\alpha x} \equiv \left\{ f \mid \begin{array}{l} \text{i) } f(n, x, y) \text{ は全ての } n, \text{ ほとんど全ての } y \text{ に対し } x \text{ について連続微分可能、} \\ \text{ii) } n, x \text{ を固定するたびに } y \text{ について二乗可積分、} \\ \text{iii) } \sum_n \sqrt{\int_0^1 df_\alpha(y) \sup_x |f(n, x, y)|^2} < +\infty, \\ \sum_n \sqrt{\int_0^1 df_\alpha(y) \sup_x |\partial_x f(n, x, y)|^2} < +\infty \end{array} \right\} \quad (4.5)$$

と定義し、(4.5) で x と y を入れ替えて定義される空間を $C_{\alpha y}$ とする。すると任意の初期分布 $\rho \in C_{\alpha x}$ と可観測量 $A \in C_{\alpha y}$ に対し、時刻 t での期待値 $\langle A | U^t \rho \rangle \equiv \sum_n \int d\mu_\alpha A^* U^t \rho$ は次のように減衰する：

$$\langle A | U^t \rho \rangle = \int_{|\beta_p| > \max(\alpha, 1-\alpha)} \frac{dp}{2\pi} \langle A | F_{\alpha p} \rangle \beta_p^t \langle \tilde{F}_{\alpha p} | \rho \rangle + \langle A | W_t \rho \rangle, \quad (4.6)$$

ただし $\beta_p \equiv \alpha e^{-ip} + (1-\alpha)e^{ip}$ で、第二項は第一項より速く、

$$|\langle A | W_t \rho \rangle| \leq (K_0 + K_1 t + K_2 t^2) \{\max(\alpha, 1-\alpha)\}^t, \quad (4.7)$$

のように減衰する。ここで K_j ($j = 0, 1, 2$) は A, ρ に依存する正定数である。反線形汎関数 $F_{\alpha p}$ 、線形汎関数 $\tilde{F}_{\alpha p}$ は

$$\langle A | F_{\alpha p} \rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-inp} \int_{[0,1]^2} df_\alpha(x) df_{\alpha p}^*(y) A^*(n, x, y), \quad (4.8a)$$

$$\langle \tilde{F}_{\alpha p} | \rho \rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{inp} \int_{[0,1]^2} df_{\alpha p}^*(x) df_\alpha(y) \rho(n, x, y). \quad (4.8b)$$

で定義される。関数 $f_{\alpha p}$ はパラメータを複素数 $\alpha_p \equiv \alpha e^{ip} / \beta_p^*$ に選んだ時の deRham 方程式 (4.1) の解で、連続だが微係数は至る所 0 または無限大で、 $p = 0$ を除き有界変分ではない²⁴⁾。図 2 に示した関数 $f_{\alpha p}$ のグラフから、この関数がフラクタル的であることが分かる。さらに $F_{\alpha p}$ 、

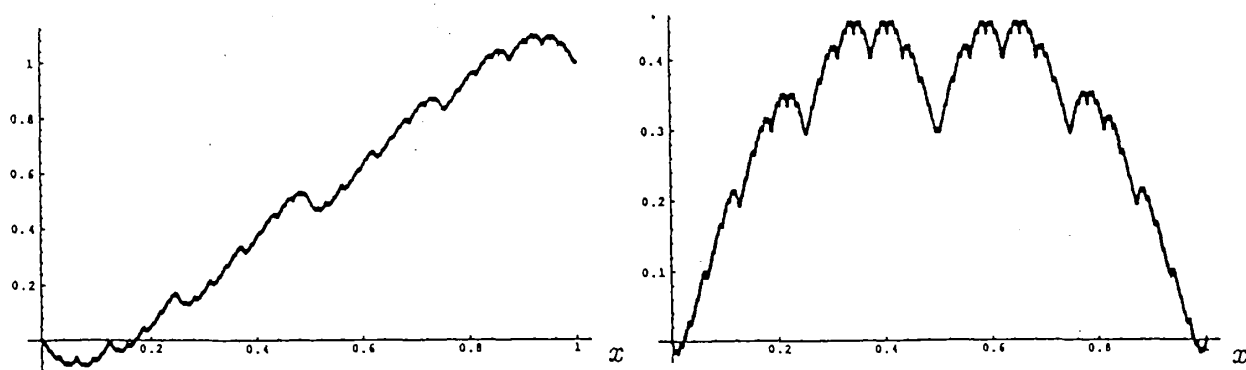


図2: 関数 $f_{\alpha_p}(x)$ のグラフ ($\tan p = 3/5$ の場合)。左: 実部、右: 虚部

$\tilde{F}_{\alpha p}$ はそれぞれ発展演算子 U の固有値 β_p に対応する (一般化された) 右左の固有ベクトルである。

$$UF_{\alpha p} = \beta_p F_{\alpha p}, \quad U^\dagger \tilde{F}_{\alpha p} = \beta_p^* \tilde{F}_{\alpha p}. \quad (4.9)$$

相関関数の減衰を表す (4.6) 式の第一項は酔歩に対応している。事実、一次元格子上で定義された右から左への遷移確率が α である酔歩の確率分布 $\Pi_t(n)$ の発展方程式

$$\Pi_{t+1}(n) = \alpha \Pi_t(n+1) + (1-\alpha) \Pi_t(n-1), \quad (4.10)$$

は減衰率 $\beta_p \equiv \alpha e^{-ip} + (1-\alpha)e^{ip}$ に対応する減衰モード $\Pi(n) \propto e^{-in p}$ を持ち、これは正確に (4.6) 式の第一項に対応している。因に、 $\alpha = 1/2$ で p が小さいとき $\ln \beta_p \simeq -p^2/2$ であり、これより拡散係数は $D = -\lim_{p \rightarrow 0} \ln \beta_p / p^2 = 1/2$ となる。

(4.6) 式では $|\beta_p| > \max(\alpha, 1-\alpha)$ を満たす長波長の減衰モードだけが考慮されている。これは p がこの不等式を満たさないほど大きくなると $|\alpha_p| \geq 1$ となり、deRham 方程式 (4.1) の解 f_{α_p} が存在せず汎関数 (4.8) が意味をなさなくなるからである。しかし、この場合でもより滑らかな初期分布 ρ 及び可観測量 A を用いることにより、減衰モードを定義し (4.6) の形の分解を得ることができる。事実、方程式

$$g_{\alpha p}(y) = \begin{cases} \frac{\alpha_p}{2} g_{\alpha p}(2y), & 0 \leq y \leq 1/2 \\ \frac{1-\alpha_p}{2} g_{\alpha p}(2y-1) + \alpha_p(y - \frac{1-\alpha_p}{2}), & 1/2 \leq y \leq 1 \end{cases}, \quad (4.11a)$$

を考えると、これは (4.1) が解を持たなくても $\max(\alpha, 1-\alpha) \geq |\beta_p| > \max(\alpha, 1-\alpha)/2$ であれば一意解を持つ。そして、 y について二回連続微分可能な可観測量 A に対して

$$\langle A | F_{\alpha p} \rangle \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in p} \int_0^1 df_{\alpha}(x) \left\{ A^*(n, x, 1) - \int_0^1 dg_{\alpha p}^*(y) \partial_y A^*(n, x, y) \right\}, \quad (4.11b)$$

によって定義される汎関数 $F_{\alpha p}$ は、密度の発展演算子 U の固有値 β_p に対応する固有ベクトルとなっている： $UF_{\alpha p} = \beta_p F_{\alpha p}$. 関数 $g_{\alpha p}$ は $f_{\alpha p}$ を積分したものに当たる： $g_{\alpha p}(y) = \int_0^y dy' f_{\alpha p}(y')$. 文献9で指摘されているように、これを繰り返して $f_{\alpha p}$ を何回か積分した関数を用いることによって、より短波長の減衰モードを構成することができる。

(4.8)、(4.11b) に見られるように $F_{\alpha p}$ 、 $\bar{F}_{\alpha p}$ は汎関数としてしか定義されておらず、従ってこれらが U の固有関数であるという主張にはより詳しい説明が必要である。これは厳密には次のように示される。まず (4.5) で定義される関数空間 $C_{\alpha z}$ は適当なノルムの下で Banach 空間となる³³⁾。これは二乗可積分関数のつくる Hilbert 空間 $\mathcal{H}_\alpha$ の稠密な部分空間で、Banach 空間としての位相は $\mathcal{H}_\alpha$ の位相より強い。 $C_{\alpha z}$ 上で定義される反線形汎関数 $\bar{F}_{\alpha p} : \rho \rightarrow \langle \bar{F}_{\alpha p} | \rho \rangle^*$ は Banach 空間としての位相に関し連続である。 $C_{\alpha z}^\dagger$ を $C_{\alpha z}$ の反双対空間、つまり $C_{\alpha z}$ 上の連続反線形汎関数のつくるベクトル空間とすると、 $\bar{F}_{\alpha p} \in C_{\alpha z}^\dagger$ である。次に演算子 U は x -方向の滑らかさを保持するので $UC_{\alpha z} \subset C_{\alpha z}$ が成り立ち $C_{\alpha z}$ 上有界（故に連続）である。よって任意の $\rho \in C_{\alpha z}$ に対し $\rho \rightarrow \langle \bar{F}_{\alpha p} | U\rho \rangle^*$ は一つの連続反線形汎関数を定め、Hilbert 空間の場合との類似から $\bar{F}_{\alpha p}$ の $U^\dagger$ による像、 $U^\dagger \bar{F}_{\alpha p}$ と見なされる。この意味で (4.9) の第二式 $U^\dagger \bar{F}_{\alpha p} = \beta_p^* \bar{F}_{\alpha p}$ が成立するのである。ここで本質的なのは Hilbert 空間上で定義される演算子 $U^\dagger$ が関数空間の三つ組： $C_{\alpha z} \subset \mathcal{H}_\alpha \subset C_{\alpha z}^\dagger$ を利用してより大きな関数空間 $C_{\alpha z}^\dagger$ に拡張される点にある。この関数の三つ組は rigged Hilbert 空間あるいは Gelfand の三つ組と呼ばれる。同様に (4.9) の第一式も三つ組 $C_{\alpha y} \subset \mathcal{H}_\alpha \subset C_{\alpha y}^\dagger$ を利用して示される。この方法では $U^{-1\dagger}$ 、 U^{-1} をそれぞれ $C_{\alpha z}^\dagger$ 、 $C_{\alpha y}^\dagger$ 上に拡張できないことを注意しておく。Prigogine ら¹⁶⁻¹⁸⁾ の複素スペクトル理論でも分布関数の発展演算子の一般化されたスペクトル分解を構成する際に Gelfand の三つ組が重要な役割を果たしている。

§5. 非平衡一様定常状態とその性質

前節では、均一な分布状態への緩和を論じたが、この節では、(3.5) 式の一様定常解を構成しその状態における「流れ」を調べ、厳密に Fick の法則に従う状態が可能であることを示す。

5-1. 一様定常状態の構成

一様定常状態は a) (3.5) 式の定常解で、b) 3節で定義した $\alpha_n \equiv G(n, 1/2, 1)/G(n, 1, 1)$ がサイト座標 n によらないものとして特徴付けられる。さて、多重バイコネ変換は、 x 方向を x 方向に、 y 方向を y 方向に写すので、両方向は独立であると考えられ、積測度（累積分布関数が x の関数と y の関数の積に書ける測度）で表される定常状態が存在することが示唆される。因に、4節で考えた不変測度 μ_α (4.2) は積測度である。このとき累積分布関数は次の様に置ける。

$$G(n, x, y) = G(n, 1, y)F(n, x), \quad (5.1)$$

ただし、 $F(n, 1/2) = \alpha$ は n によらない。(5.1) を (3.5) に代入し F に関する条件を使うと次の方程式が得られる。

$$G(n, 1, y) = \begin{cases} \alpha G(n+1, 1, 2y), & 0 \leq y \leq 1/2 \\ (1-\alpha)G(n-1, 1, 2y-1) + \alpha G(n+1, 1, 1), & 1/2 < y \leq 1 \end{cases} \quad (5.2a)$$

$$F(n, x) = \begin{cases} \alpha F(n-1, 2x), & 0 \leq x \leq 1/2 \\ (1-\alpha)F(n+1, 2x-1) + \alpha, & 1/2 < x \leq 1 \end{cases} \quad (5.2b)$$

関数方程式 (5.2) は deRham の関数方程式^{19-21,7)}と同様の形をしている。(5.2a) は $G(n, 1, 1)$ が定まると、(5.2b) はそのまま唯一の解を持つ^{31,32)}。 $G(n, 1, 1)$ は (5.2a) で $y = 1$ と置いて得られる漸化式

$$G(n, 1, 1) = (1-\alpha)G(n-1, 1, 1) + \alpha G(n+1, 1, 1), \quad (5.3)$$

から境界条件を与えることにより定められる。(5.3) は右から左への遷移確率が α である酔歩の定常分布を定める式であり、前節と同様、異なるパラメータ α が異なる酔歩に対応していることが分かる。

因みに、方程式 (5.1-3) によって定められる測度 μ と多重パイコね変換 B の組は、Ornstein の意味²⁵⁾で確率的 Markov 鎖と同型である³²⁾。遷移確率 P_{ij} とそれから計算される KS エントロピー h_{KS} は次式で与えられる。

$$P_{ij} = \begin{cases} \alpha & i = j+1 \\ 1-\alpha, & i = j-1 \\ 0, & \text{その他の場合} \end{cases} \quad (5.4)$$

$$h_{KS} = -\alpha \ln \alpha - (1-\alpha) \ln(1-\alpha). \quad (5.5)$$

さて方程式 (5.2) に戻ろう。(5.2b) の唯一の解は deRham の関数方程式 (4.1) の解 f_α に等しい。

$$F(n, x) = f_\alpha(x). \quad (5.6)$$

$G(n, 1, y)$ については、 $G(n, 1, 1)$ の漸化式 (5.3) の解が

$$G(n, 1, 1) = \sum_{k=1}^n \left(\frac{1-\alpha}{\alpha} \right)^{k-1} \{G(1, 1, 1) - G(0, 1, 1)\} + G(0, 1, 1), \quad (5.7)$$

と与えられるので、二つの場合を区別する必要がある。

ア) $\alpha \neq 1/2$, $0 < \alpha < 1$ の場合

このとき、定数 A , A' を

$$A = \frac{\alpha}{1-2\alpha} \{G(1,1,1) - G(1,1,0)\}, \quad A' = \frac{(1-\alpha)G(0,1,1) - \alpha G(1,1,1)}{1-2\alpha}, \quad (5.8a)$$

と置くと、

$$G(n,1,1) = A \left(\frac{1-\alpha}{\alpha} \right)^n + A', \quad (5.8b)$$

である。 $G(n,1,y)$ が $G(n,1,1)$ と同様の n 依存性を持つと仮定して (5.2a) を解くと次式が得られる。

$$G(n,x,y) = f_\alpha(x)G(n,1,y) = f_\alpha(x) \left\{ A \left(\frac{1-\alpha}{\alpha} \right)^n f_{1-\alpha}(y) + A' f_\alpha(y) \right\}. \quad (5.9)$$

図3 (a),(b),(c) のそれぞれに (5.9) の n, x, y 依存性を示す。

イ) $\alpha = 1/2$ の場合

このとき、定数 B, B' を

$$B = G(1,1,1) - G(0,1,1), \quad B' = G(0,1,1), \quad (5.10a)$$

と置くと、

$$G(n,1,1) = nB + B' \quad (5.10b)$$

である。ア) の場合と同様にして

$$G(n,x,y) = xG(n,1,y) = x[B\{ny + T(y)\} + B'y]. \quad (5.11)$$

ここで、関数 $T(y)$ は次の方程式の一意解として定義される。

$$T(y) = \begin{cases} \frac{1}{2}T(2y) + y, & 0 \leq y \leq 1/2 \\ \frac{1}{2}T(2y-1) + 1-y, & 1/2 < y \leq 1 \end{cases} \quad (5.12)$$

(5.11) の n, x, y 依存性をそれぞれ図4 (a),(b),(c) に示す。関数 $T(y)$ は、高木²⁶⁾により、連続でいたるところ有限な導関数を持たない関数の例として考えられ、高木関数と呼ばれる(図5参照)。高木関数とそれに関連した関数の諸性質は畑、山口^{20,21)}により詳しく調べられている。

ウ) 時間反転状態

2節で示したように、多重パイコね変換 B は時間反転 I のもとで不変である。上述した状態にこの変換を適用したのもも定常状態である。 $\alpha \neq 1/2$ の場合、この操作によって新しい状態は作られない。しかし、 $\alpha = 1/2$ の場合には、次の状態が得られる。

$$\bar{G}(n,x,y) \equiv \mu \left(I \{ [0,x] \times [0,y] \}_n \right) = y[B\{nx - T(x)\} + B'x]. \quad (5.13)$$

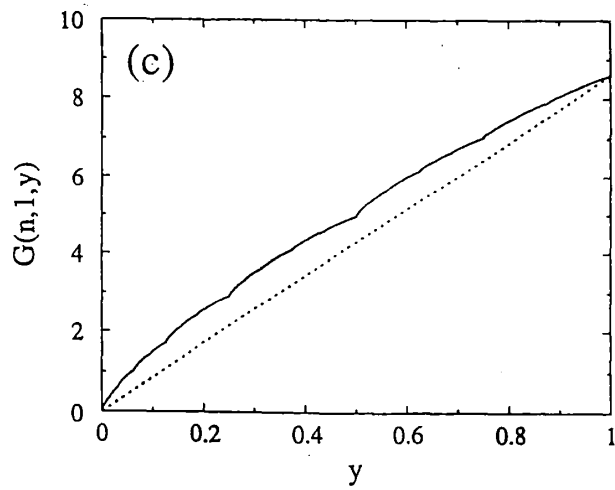
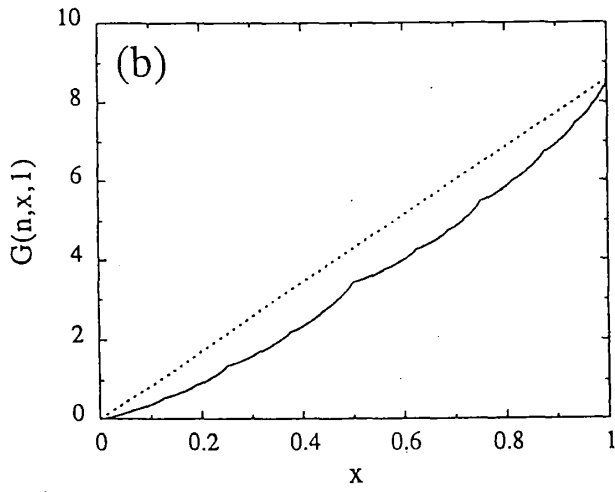
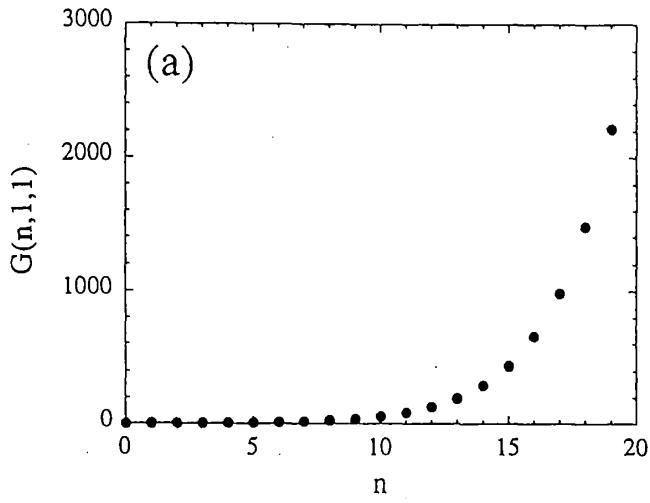


図3：累積分布 $G(n, x, y)$ のふるまい
 $(\alpha = 2/5)$ (a): $G(n, 1, 1)$ v.s. n ,
 (b): $G(5, x, 1)$ v.s. x , (c): $G(5, 1, y)$ v.s. y

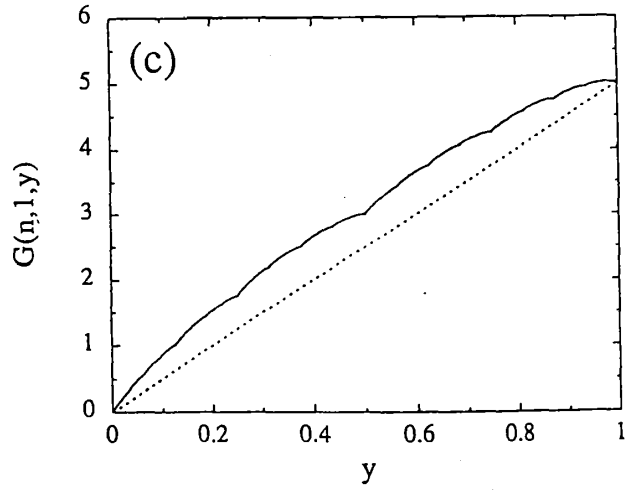
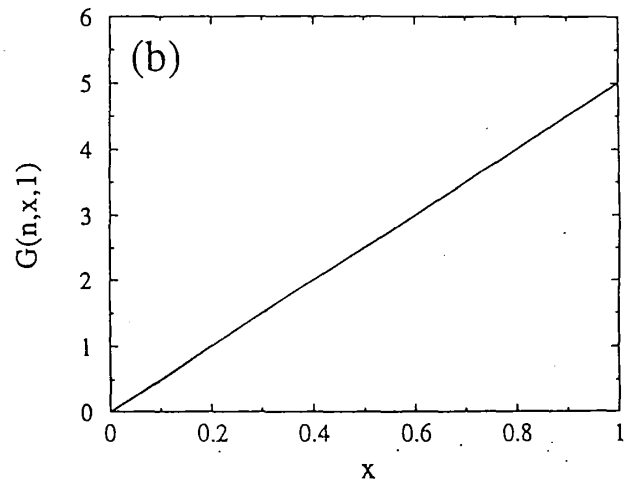
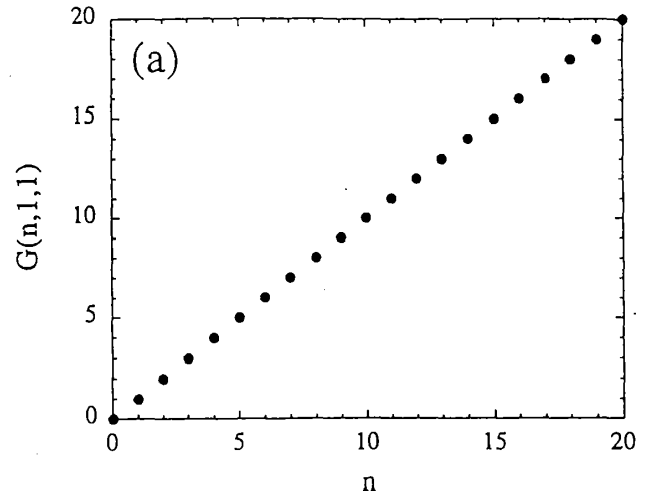
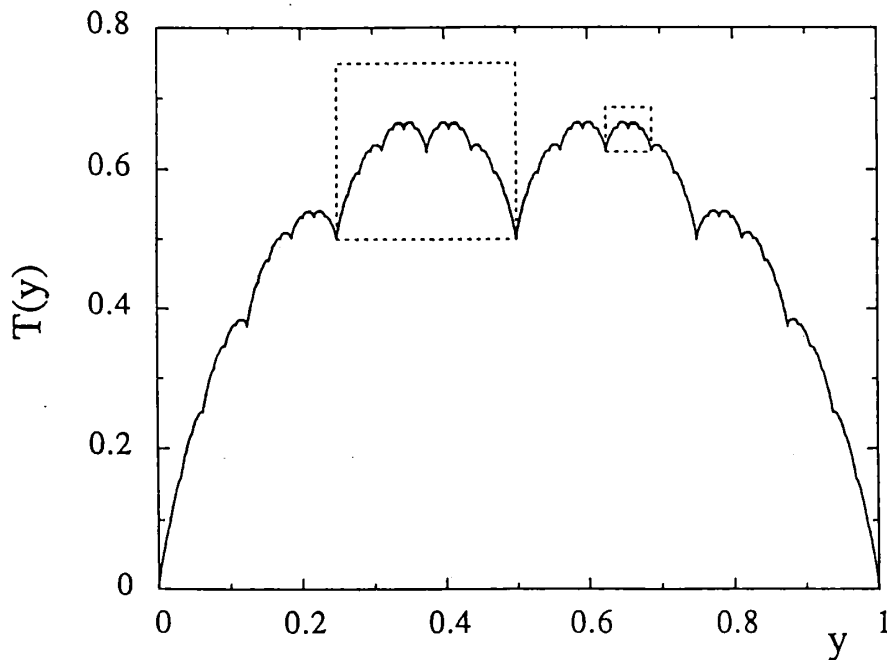


図4：累積分布 $G(n, x, y)$ のふるまい
 $(\alpha = 1/2, \text{Fick 状態})$ (a): $G(n, 1, 1)$ v.s. n ,
 (b): $G(5, x, 1)$ v.s. x , (c): $G(5, 1, y)$ v.s. y

図 5 : 高木関数 $T(y)$

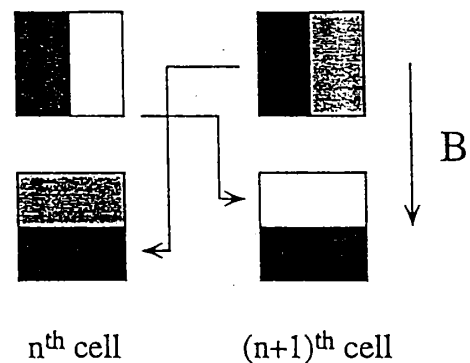
以上の結果より、 $\alpha = 1/2$ かつ $B = 0$ の場合を除き、累積分布関数は、特異関数を含む。従って、対応する測度は、Lebesgue 測度に関して絶対連続ではない。つまり、これらの累積分布を通常の密度分布関数 $\rho_n(x, y)$ を用いて表わすことはできない：

$$G(n, x, y) \neq \int_0^x dx' \int_0^y dy' \rho_n(x', y'). \quad (5.14)$$

パラメータ α の任意性から、与えられた $G(n, 1, 1)$ に関する境界条件に対し、非可算無限個の定常状態、従って不変測度が存在することが解かる。しかし、すべての不変測度が物理的に実現可能ではない²⁷⁻²⁹。この点に関しては後で議論する。

5-2. 定常状態における流れとその性質

ここでは、一様定常状態における流れを調べる。 n 番目と $n+1$ 番目の正方形の境界を考える。図 6 に示す様に、一回の多重パイコね変換 B により、 n 番目の正方形の右半分が右に、 $n+1$ 番目の正方形の左半分が左に移される。従って、この境界を左から右へ横切る流れは、 n 番目のセル中の $[1/2, 1] \times [0, 1]$ という領域の測度と $n+1$ 番目のセル中の $[0, 1/2] \times [0, 1]$ という領域の測度の差である：

図 6 : n と $n+1$ 番目の境界を横切る流れ

$$\begin{aligned}
 J_{n|n+1} &= \mu\left(\left\{\left[\frac{1}{2}, 1\right] \times [0, 1]\right\}_n\right) - \mu\left(\left\{\left[0, \frac{1}{2}\right] \times [0, 1]\right\}_{n+1}\right) \\
 &= G(n, 1, 1) - G(n, \frac{1}{2}, 1) - G(n+1, \frac{1}{2}, 1) .
 \end{aligned} \tag{5.15}$$

ア) $\alpha \neq 1/2, 0 < \alpha < 1$ の場合

このとき、(5.9) 式より

$$J_{n|n+1} = (1 - 2\alpha)A' , \tag{5.16}$$

となる。つまり、この時はセル座標 n に依存しない部分から流れが生じる。この流れは、次のように説明される：不変測度の n に依存しない部分は、各セルの右半分を $(1 - \alpha)A'$ の、左半分を $\alpha A'$ の重みで測る。よって、この測度でみると、一回の変換で右向きに $(1 - \alpha)A'$ 、左向きに $\alpha A'$ の流れが生じ、全体として (5.16) の流れが生じるのである。つまり、各セルの右半分、左半分の重みが異なることが流れの原因なのである。また、流れの表式 (5.15) は上述したメカニズムによる流れと拡散による流れの和に分解できるが、累積分布 (5.9) のセル座標 n に依存する部分から生じる両流れは互いに打ち消しあう。この結果、セル間での測度の違いが流れに反映されないのである。

イ) $\alpha = 1/2$ の場合

このとき、(5.11) 式より

$$J_{n|n+1} = -\frac{B}{2} = -\frac{1}{2}\{G(n+1, 1, 1) - G(n, 1, 1)\} , \tag{5.17}$$

前の場合と異なり、流れはセル間の測度の差により引き起こされる。さらに、4 節で示したように今考えているモデルの拡散係数 D が $1/2$ であるので ((4.10) 式以下の議論参照)、(5.17) 式は Fick の法則を表わしている：

$$J_{n|n+1} = -D\{G(n+1, 1, 1) - G(n, 1, 1)\} . \tag{5.17'}$$

Fick の法則は明らかに時間反転対称性を破っているが、時間反転対称な多重パイコね変換の定常状態としてこのような状態が得られることは興味深い。

ウ) 時間反転状態

(5.13) 式の状態は次の流れを持ち、予想される様に「反」Fick の法則に従う。

$$\begin{aligned}
 J_{n|n+1} &= \frac{B}{2} = \frac{1}{2}\{G(n+1, 1, 1) - G(n, 1, 1)\} \\
 &= D\{G(n+1, 1, 1) - G(n, 1, 1)\} .
 \end{aligned} \tag{5.18}$$

5-3. 状態の選択

パラメータ α に応じ異なる定常状態が得られ、それぞれ異なる輸送過程に対応していることを見てきた。どの状態が物理的に実現し得るかを吟味するには与えられた境界条件の下での系の時間発展を追跡すればよい。文献 32 では、両端が自由運動に相等する写像に接続した有限長の多重パイこね変換を考え、初期条件としてパイこね部の両端で濃度差がつくように自由運動部分に一樣 Lebesgue 分布を与えて、系の時間発展を調べた。その結果、多重パイこね部内の初期分布によらず Fick の法則に従い分布がセル座標に線形に依存する現象論的記述と合致する状態が自発的に現われることが分かった。これは次のように理解できる。まず Fick 状態が伸びる方向に一樣であるのに対し他の定常状態は伸びる方向に特異的である。他方、多重パイこね変換による引き伸ばしのため分布は伸びる方向に沿って一樣化される傾向がある。従って、伸びる方向に関して特異的な分布が終状態として実現するには伸びる方向に自己相似的な初期分布から出発しなければならない。このような初期分布は例外的であると考えられ、この意味で Fick 状態が安定なのである。

KS エントロピーは Fick 状態、「反」Fick 状態の双方で最大値 $h_{KS} = \ln 2$ をとる ((5.5) 式参照)。一般論からも KS エントロピーによって Fick 状態と「反」Fick 状態を区別することはできないという結論が得られる。事実、Fick 状態 G と多重パイこね変換 B の組、 (G, B) は、「反」Fick 状態 $\bar{G}$ と逆変換 B^{-1} の組 $(\bar{G}, B^{-1})$ と、時間反転 I により同型であるから、両者は等しい KS エントロピーを持つ³⁰⁾。他方 $(\bar{G}, B^t)$ の KS エントロピーは $(\bar{G}, B)$ のそれの $|t|$ 倍であるから³⁰⁾、結局 (G, B) と $(\bar{G}, B)$ の KS エントロピーは一致するのである。

§6. 結語

多重パイこね変換において、i) 拡散に対応する現象論的な減衰モードが密度分布関数の発展演算子の固有ベクトルとして得られ、それがフラクタルな特異関数に関する Stieltjes 積分により表示できること及び ii) 特異測度を用いることにより空間的に一樣な非平衡定常状態が厳密に構成でき、特に Fick の法則に従うものが安定であることを示した。つまり多重パイこね変換では、不可逆過程の現象論的法則が、可逆な力学法則と矛盾することなく定式化できるのである。この場合、フラクタルな特異関数が重要な役割を担っている。

まず分布関数の時間発展については、系がカオス的なため軌道のダイナミックスが不規則的であるにもかかわらず、分布は拡散プロセスに従って滑らかに（指数的に）減衰するだけである。この軌道の不規則性が減衰モードのフラクタル性に反映されていると考えることができる。

また定常状態については、一つのセルに注目すると変換によって縮む方向に圧縮された両隣のセルの一部が流入するので、すべてのセル内の分布が同一でないかぎり、分布は縮む方向に細かく変動するようになる。つまり、均一なセル上分布を持たない非平衡定常状態では必ずセル内分布は特異的になる。

以上の考察から、一般にもカオスの保存系における不可逆過程／非平衡状態の記述に特異関数が重要な役割を演じていると期待される。

謝辞

本研究への支援および有益なコメントを頂いた基礎化学研究所の福井謙一所長、龍谷大学の山口昌哉教授、Solvay 研究所 (Brussels) の Prof. I. Prigogine、Dr. I. Antoniou、Dr. Z. Suchanecki に感謝します。またこの研究は、文部省の科学研究補助金、国際学術研究、ベルギー国 National Fund for Scientific Research (F.N.R.S. Belgium)、Communauté Française (ARC contract No 93/98-166) から助成を受けています。

参考文献

- [1] e.g., M. Toda, R. Kubo and N. Saito, *Statistical Physics I*, Solid-State Sciences **30**, Springer, Berlin (1983);
R. Kubo, M. Toda and N. Hashitsume, *Statistical Physics II*, Solid-State Sciences **31**, Springer, Berlin (1985);
J. Lebowitz and H. Spohn, *J. Stat. Phys.* **19** (1978) 633;
H. Spohn, *Rev. Mod. Phys.* **53** (1980) 569;
L.A. Bunimovich and Y.G. Sinai, *Commun. Math. Phys.* **78** (1980) 479.
- [2] P. Gaspard and G. Nicolis, *Phys. Rev. Lett.* **65** (1990) 1693;
P. Gaspard and F. Baras, in *Microscopic Simulations of Complex Hydrodynamic Phenomena*, ed. M. Maréchal and B.L. Holian (Plenum, New York, 1992) p.301; P. Gaspard and F. Baras (unpublished)
J.R. Dorfman and P. Gaspard, *Phys. Rev.* **51** (1995) 28.
- [3] S. Grossman and H. Fujisaka, *Phys. Rev. A* **26** (1982) 1779.
- [4] S. Thomaé, "Chaos-induced diffusion", in *Statics and Dynamics of Nonlinear Systems*, G. Benedek et al., Eds. (Springer, Berlin, 1983) 204.
- [5] H.H. Hasegawa and D.J. Driebe, *Phys. Lett. A* **168** (1992) 18.
- [6] P. Gaspard, *Phys. Lett. A* **168** (1992) 13.
- [7] S. Tasaki, I. Antoniou and Z. Suchanecki, *Phys. Lett. A* **179** (1993) 97.
- [8] P. Gaspard, *J. Stat. Phys.* **68** (1992) 673.
- [9] P. Gaspard, *Chaos* **3** (1993) 427.
- [10] H.H. Hasegawa and D.J. Driebe, *Phys. Rev. E* **50** (1994) 1781.
- [11] S. Tasaki, A. Hakmi and I. Antoniou, to appear.
- [12] M. Pollicott, *Invent. Math.* **81** (1985) 413; *Invent. Math.* **85** (1986) 147.

- [13] D. Ruelle, *Phys. Rev. Lett.* **56** (1986) 405; *J. Stat. Phys.* **44** (1986) 281.
- [14] I. Prigogine, *Non-equilibrium statistical mechanics*, Wiley, New York, 1962.
- [15] I. Prigogine, C. George, F. Henin and L. Rosenfeld, *Chemica Scripta* **4** (1973) 5.
- [16] T. Petrosky and I. Prigogine, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **90** (1993) 9393.
- [17] I. Prigogine, *Vistas in Astronomy* **37** (1993) 7 および引用文献。
- [18] I. Prigogine, 「バリテイ」 **10** (1995) No.1 p.6 ; No.2 p.32 および引用文献。
- [19] G. de Rham, *Rend. Sem. Mat. Torino* **16** (1957) 101.
- [20] M. Hata and M. Yamaguti, *Japan J. Appl. Math.* **1** (1984) 183.
- [21] M. Hata, in *Patterns and Waves* eds. T. Nishida, M. Mimura and H. Fujii, Studies in mathematics and its Application, Kinokuniya & Northholland, 1986, p.259.
- [22] E. Hewitt and K. Stromberg, *Real and Abstract Analysis*, Springer-Verlag, New York, 1975.
- [23] P. Billingsley, *Ergodic Theory and Information*, Wiley, New York, 1965.
- [24] S. Tasaki, I. Antoniou and Z. Suchanecki, *Chaos, Solitons and Fractals* **4** (1994) 227.
- [25] D. Ornstein, *Science* **243** (1989) 182.
- [26] T. Takagi, *Proc. of Physico-Mathematical Society of Japan, ser.II*, **1** (1903) 176.
- [27] J.-P. Eckmann and D. Ruelle, *Rev. Mod. Phys.* **57** (1985) 617.
- [28] Y. Oono and Y. Takahashi, *Prog. Theor. Phys.* **63** (1980) 1804;
Y. Takahashi and Y. Oono, *Prog. Theor. Phys.* **71** (1984) 851.
- [29] S. Tasaki, Z. Suchanecki and I. Antoniou, *Phys. Lett.A* **179** (1993) 103.
- [30] Ya. G. Sinai, *Introduction to Ergodic Theory*, Princeton Univ. Press, Princeton, 1972.
- [31] S. Tasaki and P. Gaspard, *Towards the Harnessing of Chaos*, Ed. M. Yamaguti, Elsevier, Amsterdam, 1994, p.273.
- [32] S. Tasaki and P. Gaspard, "Fick's Law and Fractality of Nonequilibrium Stationary States in a Reversible Multibaker Map", 1995, submitted to *J. Stat. Phys.*.
- [33] S. Tasaki, "Spectral Properties of the Frobenius-Perron Operator of the Multibaker Transformation", Proc. of International Conference on Dynamical Systems and Chaos, ed. K. Shiraiwa et al., May, 1994, Tokyo.