

可逆セルオートマトンの統計力学と動力学

京都大学総合人間学部 武末真二

1 序

ここでは、簡単なセルオートマトンのモデルを用いて、微視的力学法則と輸送現象の性質との関係について考察を行なう。具体的な現象としては熱輸送を取り扱い、そこでフーリエ則のような拡散的挙動が現われ熱伝導率に対する久保公式が成立するためには、どのような条件が必要であるかということを中心に考える。拡散を示す力学モデルとしては、他に田崎 [1, 2] らによる結合写像系や、蕪木、町田 [3] によるハミルトン力学系の例がある。それらと比較した場合、セルオートマトンは、(i) 時間・空間・状態のすべてが離散的なモデルである、(ii) シミュレーションを行なう場合、ハミルトン系のような大規模な計算を要しない。したがってより詳しい情報を得ることができる、という特徴を持つ。

2 モデル

我々が用いるモデルは、ERCA (Elementary Reversible Cellular Automata) と呼ぶ次のような可逆セルオートマトンの族である。すなわち、ERCA とは、各格子点 i に値 0, 1 を取る変数が 2 個 ($\sigma_i, \hat{\sigma}_i$ と表す) 存在して、それらの時間発展規則が次式で表されるような力学系をいう。

$$\sigma_i^{t+1} = f(\sigma_{i-1}^t, \sigma_i^t, \sigma_{i+1}^t) \oplus \hat{\sigma}_i^t \quad (1)$$

$$\hat{\sigma}_i^{t+1} = \sigma_i^t \quad (2)$$

ここで時刻 t は整数値を取り、 f は 0, 1 の値を取る 3 変数関数である。また $\oplus$ は、 $1 \oplus 1 = 0 \oplus 0 = 0$, $0 \oplus 1 = 1 \oplus 0 = 1$ で定義される排他的論理和と呼ばれる 2 項演算を表す。この系が時間反転対称性を持つことは、式の形から明らかである。また、場合によっては簡便のために $x_i^t = (\sigma_i^t, \hat{\sigma}_i^t)$ とし、式 (1)、(2) をまとめて

$$x_i^{t+1} = g(x_{i-1}^t, x_i^t, x_{i+1}^t) \quad (3)$$

のように表すことにしよう。関数 f を与えれば時間発展則 (ルール) が決まるので、 f の数 $2^3 = 256$ 個の異なるルールが ERCA に属することになる。それぞれのルールを区別するために、関数 f で表されるルールに対して数字

$$\sum_{a=0}^1 \sum_{b=0}^1 \sum_{c=0}^1 f(a, b, c) 2^{4a+2b+c}$$

に「可逆」を表す R をつけて「ルール 26R」などと呼ぶことにする。ルール 0R からルール 255R までの 256 個のルールを、左右反転対称性と 0 と 1 の入れ替えの対称性で分類すると、本質的に異なるルールは 88 個になる。

3 加法的保存量

ERCA の各ルールに対し、次の形の保存量が存在するかどうかを考えよう。

$$F(x_i^{t+1}, x_{i+1}^{t+1}, \dots, x_{i+\alpha}^{t+1}) = F(x_i^t, x_{i+1}^t, \dots, x_{i+\alpha}^t) + J(x_{i-1}^t, \dots, x_{i+\alpha}^t) - J(x_i^t, \dots, x_{i+\alpha+1}^t) \quad (4)$$

ここで α は与えられた自然数とする。上式は連続の式を離散化したものであるから、適当な関数 F 、 J を持ってきたとき、任意の $x_{i-1}^t, x_i^t, \dots, x_{i+\alpha+1}^t$ に対して上式が成立するならば、 F を加法的保存量の密度、 J をその流れを表すものとみなすことができる。さらにこのような保存量が存在する場合、周期境界条件のもとでの和

$$\mathcal{H}_N(\{x_i\}) = \sum_{i=0}^{N-1} F(x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+\alpha})$$

を（統計力学の意味における）ハミルトニアンと考えて、通常の平衡統計力学の議論を行なうことができる。例えば、温度が格子点あたりの平均エネルギー $\phi = \langle F(x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+\alpha}) \rangle_{eq}$ の関数として求められる。

このような関数 F と J が存在するかどうかはルールによって、また α の値によっても異なる。さらに、このような保存量が存在したとしても、 $\mathcal{H}_N$ のみならず $F(x_i, \dots, x_{i+\alpha})$ 自身が不変量になる（つまり J が恒等的に 0 になる）場合には、統計力学の議論が成り立たないことはいうまでもない。そこで、 $\alpha = 1$ の加法的保存量が存在するが、 F 自身が保存するような量は（ $\alpha = 2, 3$ においても）持たないルールを書き出してみると表 1 の 7 個が得られる [4]。また各ルールに対し、 $\alpha = 2, 3$ でそれぞれ何個の保存量が新たに出現するかを求めてみると、表 1 の右の欄のようになる。以下では主として $\alpha = 1$ の保存量に対する統計力学を考え、 $\alpha > 1$ の量はそれに対する影響という形で考慮することにする。

ルール	$\alpha = 1$ 加法的保存量	$\alpha = 2, 3$ 加法的保存量
26R	A	なし
77R	C	2, 0
90R	A, D	2, 4
91R	B, D	1, 0
94R	D	なし
95R	D	1, 2
123R	B, D	なし

表 1：加法的保存量。「 $\alpha = 2, 3$ 保存量」の欄は $\alpha = 2$ および 3 で新たに出現する保存量の個数。

「 $\alpha = 1$ 保存量」の欄の A, B, C, D は保存量の種類を表し、それぞれに対する $F(\sigma, \hat{\sigma}, \nu, \hat{\nu})$ は、

$$A: (\hat{\sigma} - \nu)^2 + (\sigma - \hat{\nu})^2$$

$$B: 1 + \sigma\hat{\sigma} + \nu\hat{\nu} - [1 - 2(1 - \sigma)(1 - \hat{\nu})][1 - 2(1 - \hat{\sigma})(1 - \nu)]$$

$$C: \sigma\hat{\nu}(1 - 2\hat{\sigma} - \nu) - \hat{\sigma}\nu(1 - 2\sigma - 2\hat{\nu})$$

$$D: (\hat{\sigma} - \nu)^2 - (\sigma - \hat{\nu})^2$$

4 熱伝導

我々はセルオートマトンに温度を導入できたので、系の両端に異なる温度の熱浴を取付けることによって、エネルギー輸送すなわち熱伝導を引き起こすことが可能になる。

熱浴は両端の変数を確率的に更新することによって表すことができる。具体的には、 N 個の格子点からなる系に対し、熱浴を表す格子点 0 と $N+1$ を加え、格子点 1 から N までの変数を式 (1), (2) に従って状態更新した後、格子点 0 と $N+1$ の変数は、条件付き確率

$$\mu_L(x_0|x_1) = \mathcal{N}_L \exp[-\beta_L F(x_0, x_1)] \quad (5)$$

$$\mu_R(x_{N+1}|x_N) = \mathcal{N}_R \exp[-\beta_R F(x_N, x_{N+1})] \quad (6)$$

に従って状態を選ぶものとする。ただしここで F は、表 1 のルールに対し $\alpha = 1$ の加法的保存量密度を 1 個選んだもので、それ以外の保存量は無視している。また、 β_L, β_R はそれぞれ左端、右端の熱浴の逆温度を表し、 $\mathcal{N}_L, \mathcal{N}_R$ は規格化定数である。

このとき、系全体の状態が $\{x_i\} = (x_0, x_1, \dots, x_N, x_{N+1})$ から $\{x'_i\} = (x'_0, x'_1, \dots, x'_N, x'_{N+1})$ に遷移する確率は、

$$P(\{x'_i\}|\{x_i\}) = \mu_L(x'_0|x'_1) \mu_R(x'_{N+1}|x'_N) \prod_{i=1}^N \delta(x'_i, g(x_{i-1}, x_i, x_{i+1})) \quad (7)$$

($\delta(x, y)$ はクロネッカーのデルタ: $\delta(x, y) = 1$ for $x = y$, $\delta(x, y) = 0$ for $x \neq y$) であり、分布関数 $\rho(\{x_i\})$ の時間発展演算子 T_* は P を用いて

$$T_* \rho(\{x_i\}) = \sum_{\{x'_i\}} P(\{x_i\}|\{x'_i\}) \rho(\{x'_i\}) \quad (8)$$

と表される。

この境界条件の下ではどういうことが起こるだろうか。 $\beta_L = \beta_R = \beta$ の場合には、ギブス分布 $\rho_{eq}(\{x_i\}) = \mathcal{N}_{eq} \exp[-\beta \sum_{i=0}^N F(x_i, x_{i+1})]$ ($\mathcal{N}_{eq}$ は規格化定数) が定常分布となる、すなわち $T_* \rho_{eq} = \rho_{eq}$ であることを厳密に示すことができる。したがって、この境界条件は確かに熱浴を表しているといえる。 $\beta_L \neq \beta_R$ の場合、任意の初期分布 ρ に対して $t \rightarrow \infty$ で $T_*^t \rho \rightarrow \rho_{ss}$ となることを仮定すれば、定常分布 ρ_{ss} は、

$$\rho_{ss} = \rho + \sum_{t=0}^{\infty} T_*^t (T_* - 1) \rho \quad (9)$$

と表される。ここで ρ の代わりに局所平衡分布

$$\rho_{le}(\{x_i\}) = \mathcal{N}_{le} \prod_{i=0}^N \exp[-\beta_i F(x_i, x_{i+1})] \quad (10)$$

($\mathcal{N}_{le}$ は規格化定数) を代入し、 $j = N^{-1} \sum_{i=1}^N J(x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$ の ρ_{ss} に関する平均を求め、温度勾配に関して展開して 1 次まで取ると、熱流が温度勾配に比例するフーリエの法則

$$\langle j \rangle_{ss} = -\kappa \nabla T \quad (11)$$

と、熱伝導率 κ に関する久保公式

$$\kappa = \frac{1}{NT^2} \sum_{t=0}^{\infty} \langle \mathcal{J}(0) \mathcal{J}(t) \rangle_{eq} \left(1 - \frac{\delta_{t0}}{2} \right) \quad (12)$$

(ここで、 $\mathcal{J}(t) = \sum_i J(x_{i-1}^t, x_i^t, x_{i+1}^t)$ 、 $\langle \rangle_{eq}$ は平衡状態での平均を表す) が得られる。また、右辺の和の中で、時刻 $t=0$ の項が局所平衡分布からの寄与を表し、時刻 $t>0$ の項が局所平衡からのずれが寄与する部分を表す。

しかし、このような温度勾配に関する展開が許されるかどうかはまさに問題となる点であり、このことは時間発展のルールに大いに依存する。この点に関する一般的な理論は存在しない。したがって、実際にどのような振る舞いを示すかは、シミュレーションに頼ることになる。

5 シミュレーション

シミュレーションは、表1の7個のルールとそれぞれの $\alpha=1$ 加法的保存量に対し、式(1)、(2)、(5)、(6) で与えられる時間発展を実行することによって行なった。まず問題となるのは、局所的な温度をどのように定義するかであるが、ここでは以下の方法にしたがう。 $\alpha=1$ 保存量は最近接相互作用のエネルギーを表すので、ボンドがエネルギーを担う。そこでボンド $(i, i+1)$ における温度 $T_i = \beta_i^{-1}$ を、ボンド $(i, i+1)$ でのエネルギーの時間平均 $\phi_i = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T F(x_i^t, x_{i+1}^t)$ から、エネルギーと温度に関する平衡の関係式を用いて決めるものとする。

フーリエの法則 (11) の成立・不成立を見るにはいろいろな測定が考えられるが、ここで行なったのは、(i) 大域的な温度勾配が形成されるかどうか、またそのサイズ依存性はどのようなになるか。(ii) 温度勾配が形成される場合、ある大きさの系で両端の温度をいろいろ変えて測定したとき、式 (11) は確かに成立しているか。(iii) 式 (11) が成り立つならば $N\langle j \rangle_{ss}$ は両端の温度だけで決まり、系の大きさ N に依存しない量になるはずだが、 N が大きいときにそのようなになっているか。(iv) 熱伝導率に対する久保公式 (12) は成立するか。(v) 局所平衡はどれくらい良く成り立っているか、の以上5項目である。(i) から (iv) までは順に厳しいテストになっている [5]。

測定 (v) について少し解説しよう。一般に、ある分布の別の分布からのずれは Kullback-Leibler 情報量、あるいは相対エントロピーと呼ばれる量によって定量化することができる。例えば、定常分布 $\rho_{ss}(\{x_i\})$ と局所平衡分布 $\rho_{le}(\{x_i\})$ の相対エントロピーは

$$S(\rho_{ss}|\rho_{le}) = \sum_{\{x_i\}} \rho_{ss}(\{x_i\}) \log \left(\frac{\rho_{ss}(\{x_i\})}{\rho_{le}(\{x_i\})} \right) \quad (13)$$

で与えられる。しかし、この量自身をシミュレーションによって求めることは困難なので、まず次式で定義される局所的な相対エントロピーを考える。

$$S_i = \sum_{x_i, x_{i+1}} p_i^{ex}(x_i, x_{i+1}) \log \left(\frac{p_i^{ex}(x_i, x_{i+1})}{p_i^{le}(x_i, x_{i+1})} \right) \quad (14)$$

ここで、 p_i^{ex} は数値的に求めたボンド $(i, i+1)$ での定常確率分布、 p_i^{le} は数値的に得た局所温度 $T_i = \beta^{-1}$ に対応するボンド $(i, i+1)$ の局所平衡分布 $p_i^{le}(x_i, x_{i+1}) = \mathcal{N}_i \exp[-\beta_i F(x_i, x_{i+1})]$ ($\mathcal{N}_i$ は規格化定数) である。この局所的な相対エントロピーの和

$$S_{tot} = \sum_{i=0}^N S_i \quad (15)$$

を式 (13) の代わりに用いる。式 (15) は ρ_{ss} 、 ρ_{le} が共に積分布であるならば式 (13) に一致する。また、上で説明した局所温度の決め方は、 S_{tot} を最小化するような $\{\beta_i\}$ を選んでいくことと同じになり、この意味でも相対エントロピーによって局所平衡からのずれを定量化するのは自然である。

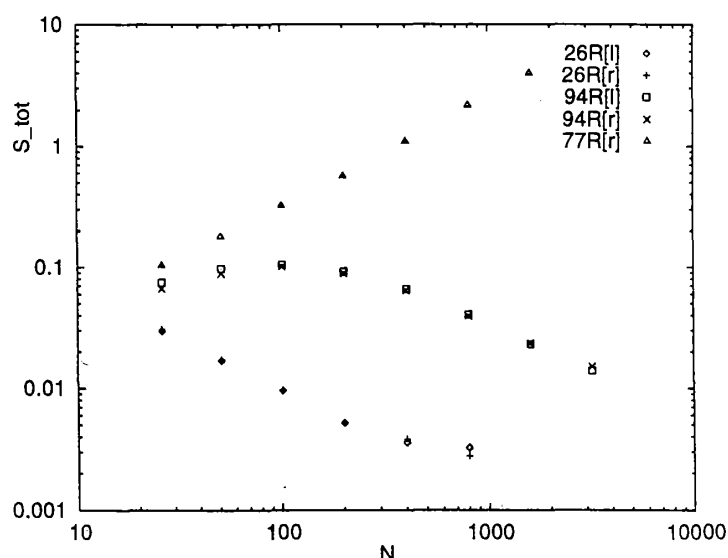


図1：相対エントロピーのサイズ依存性。[] 内の記号は境界での温度の違いを表す。
l は $\beta_L = 0.8$ 、 $\beta_R = 1.25$ 、r は $\beta_L = 1.25$ 、 $\beta_R = 0.8$ の場合。

代表的な3個のルールに対する測定結果は図1のようになった。これからわかるように、ルール26Rと94Rでは系を大きくしていったときに S_{tot} は減少して0に向かうのに対し、ルール77Rでは最終的に N に比例して増大する。すなわち、ルール77Rでは局所的にも定常分布と局所平衡分布との間にずれがあり、系を大きくしてもそれが残るのに対して、26Rと94Rではそのずれはどんどん小さくなっていく。実は後者の2個のルールはフーリエ則が成立するルールであるのに対し、77Rは(ii)までの測定ではフーリエ則の結果と一致するが、(iii)以下の測定ではフーリエ則と合わない結果を示す。このように、フーリエ則の成立・不成立と局所平衡の成立・不成立とは密接な関係を持っている。

測定(i)-(v)の結果から得られたルールごとの振る舞いをまとめると次のようになる。

26R, 94R: 大域的な温度勾配を形成し、熱流は系が大きいときフーリエ則に従い、熱伝導率は久保公式による値と一致する。定常分布は系を大きくすると局所平衡分布に近づく。

77R: 系が小さいときは大域的な温度勾配が形成されるが、熱流はフーリエ則には従わず、温度勾配ではなく両端の熱浴の温度差に比例して変化する。局所平衡からのずれが局所的にも残る。

91R, 123R: 境界付近で温度勾配が見られるが、内部に向かって指数関数に近い形で急速に勾配は消滅する。熱流は熱浴の温度差に比例。

95R, 90R: ほぼ完全に平らな温度分布を示し、温度勾配は誤差の範囲内で0。(90Rでは0であることを証明できる。) 熱流は熱浴の温度差に比例。

以上4種類に分類したが、ルール26R、94Rとその他のルールの間には明確なギャップがあるが、それ以外は単に定量的な差である可能性もあることを注意しておく。前者を拡散的挙動、後者を弾道的挙動と呼ぶことにしよう。

6 ボルツマン型方程式による保存量の制御

前節の結果と表1を対照してみると、ルール26Rと94Rという、加法的保存量を1個しか持たないルールだけがフーリエ則を満たしているということに気づく。そこで、他の保存量が存在することによる効果を取り除くことを考えてみよう。これは、ボルツマン型の方程式を考えることにより行なうことができる。

まずボルツマン型の方程式を導く。格子点 i から $i+\gamma$ までの $\gamma+1$ 個の格子点上の変数の確率分布を $P_i(x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+\gamma})$ とし、力学変数ではなくこの分布関数の時間発展を考えると、リウヴィル方程式(8)からのデカップリングにより、 $i=1, 2, \dots, N-\gamma$ に対しては

$$P_i^{t+1}(x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+\gamma}) = \sum_{x'_{i-1}, \dots, x'_{i+\gamma+1}} \frac{P_{i-1}^t(x'_{i-1}, \dots, x'_{i+\gamma-1}) P_i^t(x'_i, \dots, x'_{i+\gamma}) P_{i+1}^t(x'_{i+1}, \dots, x'_{i+\gamma+1})}{\sum_a P_{i-1}^t(a, x'_i, \dots, x'_{i+\gamma-1}) \sum_b P_{i+1}^t(x'_{i+1}, \dots, x'_{i+\gamma}, b)} \times \prod_{j=i}^{i+\gamma} \delta(x_j, g(x'_{j-1}, x'_j, x'_{j+1})) \quad (16)$$

境界すなわち $i=0, N+1-\gamma$ に対しては

$$P_0^{t+1}(x_0, x_1, \dots, x_\gamma) = \mu_L(x_0|x_1) \sum_b P_1^{t+1}(x_1, \dots, x_\gamma, b) \quad (17)$$

$$P_{N+1-\gamma}^{t+1}(x_{N+1-\gamma}, \dots, x_{N+1}) = \mu_R(x_{N+1}|x_N) \sum_a P_{N-\gamma}^{t+1}(a, x_{N+1-\gamma}, \dots, x_N) \quad (18)$$

という近似式を導くことができる。これがボルツマン型方程式である。

この近似は確率としての一貫性を保ち、 $\alpha \leq \gamma$ の加法的保存量に対する連続の式(4)を期待値の形で満足する。そこで $\gamma=1$ および2の場合について、初期条件を(一貫性を壊さないように)

$$P_i^0(x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+\gamma}) = 4^{-\gamma-1} \quad (19)$$

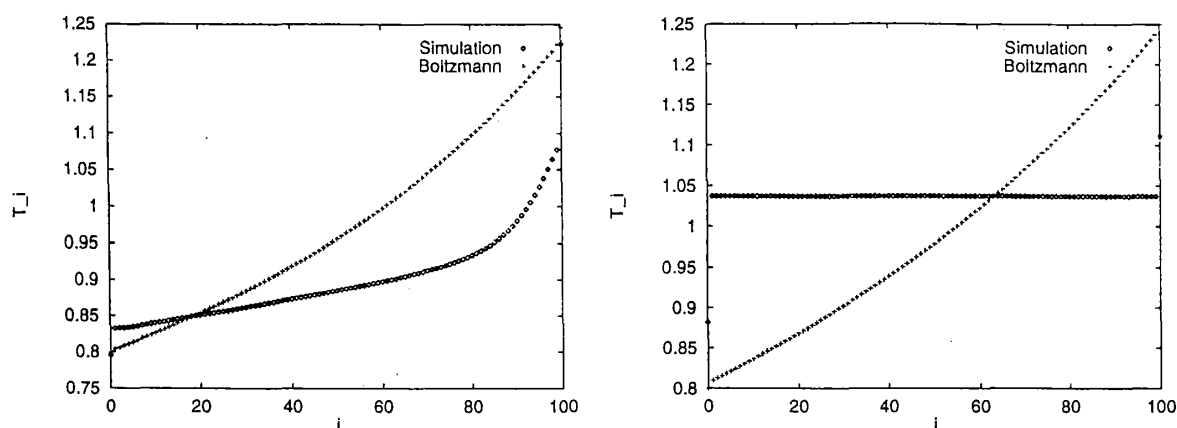


図2: $\gamma = 1$ ボルツマン型近似とシミュレーションにおける温度勾配の比較。左が77R、右が95R。

と選び、収束するまで式 (16-18) を繰り返すことにより、この近似に対する定常分布を数値的に求めた。

その結果 $\gamma = 1$ では、ルール 77R と 95R に図2のような滑らかな大域的溫度勾配ができるという変化が見られたが、それ以外のルールについてはあまり大きな変化は見られなかった。また $\gamma = 2$ では、ルール 95R は平らな溫度分布に戻り、77R も分布の形が多少違うものの、系の大きさとともに溫度勾配が消えていき弾道的挙動になるという、シミュレーションと同じような結果を示すようになった。これは $\gamma = 1$ のボルツマン型近似では $\alpha \geq 2$ の加法的保存量が有効でなくなるので、ルール 77R と 95R に関しては保存量が1個だけになり、ルール 26R や 94R と同じ条件になるからだと解釈できる。

同様の結論が次のルール混合の実験によっても支持される。あるルール X による時間発展の中で、20 回に1回別のルール Y によって状態を更新させるものとしよう。この時間発展においては、ルール X とルール Y とが共通に持っている保存量だけが保存され、それ以外の量は保存量でなくなってしまう。例えば、ルール 90R にルール 91R を混ぜてやると、表1の量 D は保存されるが、量 A や B は保存されなくなる。このような計算機実験を行なうと、例えば表2の量 D を保存するルールどうしの混合では、ルール 91R と 123R を混合したときのみ溫度勾配は形成されず、それ以外の場合は大域的に溫度勾配が形成されるという結果が得られた。また、溫度勾配が形成される場合に熱流のサイズ依存性を見てみると、フーリエ則が成立していることも確認された。ルール 91R と 123R の場合には、2個の保存量 B, D を共有しているが、他の組み合わせでは量 D だけが保存量となるので、この実験でも保存量が1個のときにフーリエ則が成立するという結果が得られたことになる。

7 まとめ

これまでの結果は次のようにまとめることができる。すなわち、ERCA においてフーリエの法則が成立するのは保存量が1個だけの場合に限る。加法的保存量が2個以上存在する場合には、一方が他方の量の拡散的振る舞いに対し障害として働く。別の言い方をすれ

ば、保存量が1個の場合には、フーリエの法則のような拡散的挙動がかなり普遍的に成り立つということになる。

しかし、この段階ではまだ、数値実験の結果のまとめとしてそういうことがいえるというだけであり、では他の保存量はどのようにしてフーリエ則に対する障害として働くのか、保存量が1個の場合のフーリエ則の不変性の起源は何か、という新たな疑問が生ずる。実際、定常状態ではなく、緩和の様子を調べてみると、定常状態では弾道的でありながら拡散に近い緩和の振る舞いを示す場合も存在する。ここで得られた知見に対する一般性の確認や理論的裏付けは今後の問題である。

参考文献

- [1] 田崎秀一、「多重パイコね変換における非平衡状態とフラクタル測度」(本報告集)
- [2] S. Tasaki and P. Gaspard, "Fick's Law and Fractality of Nonequilibrium Stationary States in a Reversible Multibaker Map," submitted to J. Stat. Phys.
- [3] H. Kaburaki and M. Machida, "Thermal conductivity in one-dimensional lattices of Fermi-Pasta-Ulam type," Phys. Lett. **A181** (1993) 85-90.
- [4] T. Hattori and S. Takesue, "Additive Conserved Quantities in Discrete-Time Lattice Dynamical Systems," Physica D **49** (1991) 295.
- [5] S. Takesue, "Fourier's Law and the Green-Kubo Formula in a Cellular-Automaton Model," Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 252.