

ある大自由度カオス系の、構成の容易な状態アンサンブル

川崎 光宏 (Mitsuhiro Kawasaki)
新潟大学工学部 (Faculty of Engineering, Niigata Univ.)

April 30, 2005

Abstract

簡単な大自由度カオスのモデルにおいて、その巨視的性質を記述するマイクロ状態のアンサンブルを、自然測度や時間発展に関する情報を参照すること無く容易に構成することができた。方法の普遍性の検討は今後の課題であるが、一般に拡張するにあたり乗り越えがたい障害は現在のところ見当たらない。

1 Introduction

非平衡の凝縮系をはじめ、流体乱流、量子場、生体および生態系、人間の経済活動まで、非線形かつ巨大な自由度を持った興味深い現象は枚挙に暇がない。

これらの系では、基礎方程式あるいは素過程に関する知見にもとづいた理解は未発達である。乱流研究を例にとると、速度場の確率分布関数の中心付近の性質が、Navier-Stokes 方程式の繰り込み摂動展開（乱流の統計理論）から決まる、ということが知られるにとどまる。例えば、乱流の統計理論にもとづき、確率分布関数のテイル部の普遍的性質（間欠性）を理解することはできていない。

乱流の統計理論の成功が限定されているのは、テイル部を支配する強い揺らぎに関しては繰り込み摂動展開が収束せず、また、弱い揺らぎに関しても摂動展開して得られた方程式を解くには結局のところ大規模数値計算に頼らざるを得ないためである。これらの困難の主因は、もとをたどれば非線形性による完結問題に端を発する。したがって、困難は乱流以外の大自由度非線形系に普遍的に共有されるものであるため、大自由度かつ非線形という共通性を持った系（大自由度カオス）を統一した観点から研究することが重要かつ有効となる。

乱流の統計理論以外のアプローチとして、大自由度カオスの巨視的性質を不安定周期軌道 (UPO) により記述する研究 [1, 2] が突破口となり大自由度カオスの巨視的性質を記述する周期軌道のアンサンブルの存在が明らかになった [3]。しかし、このような不安定周期軌道やカオス軌道断片などの軌道アンサンブルによる方法 [4, 5, 6, 7] は次の困難を持つ：

1. 大自由度カオスにおいて多数の UPO を発見するのは、極めて困難である。（もちろん、カオス軌道断片を用いる場合には問題無い。）
2. 軌道アンサンブルによる平均を計算する¹際に、運動方程式の解である軌道についてのみ平均をとる必要がある。大自由度系で、運動方程式を拘束条件とする条件付きの和をとるのは極めて困難である²。

一方、軌道を経由せずに直接に状態アンサンブルを得ることができれば、上記の二つの困難は霧消する。それにより、定常状態への緩和現象を記述する道は閉ざされるが、そもそも軌道アンサンブルの方法でも満足に記述できていないわけではないし、それを補って余りあるメリットがある。平衡状態の分子多体系を記述する平衡統計力学は、平衡状態への緩和を記述できないが、系の熱力学的性質の理解に関してを極めてパワフルであったことを思い出されたい。

¹ $|D^{(u)}M^T(X)|^{-1}$ を軌道の確率測度とし、軌道に関する和 $\sum_{[X]}$ をとる。ここで、 X は状態、 $[X]$ は長さ T の軌道、 M は写像力学系、 $|D^{(u)}M(X)|$ は M のヤコビ行列固有値のうち絶対値が 1 より大きいものの積を意味する。 T は巨視的物理量の緩和時間よりも長く取る必要があり、1 などではいけない。

²著者は、軌道アンサンブルによって得られた理論的収量が、今のところ、fluctuation theorem など少数にとどまるのは、軌道アンサンブルの使いづらさによると考えている。

2 目的

簡単な大自由度カオスのモデルにおいて、定常状態の巨視的性質を記述するマイクロ状態のアンサンブルを構成するのが本ノートの目的である。最終的にはモデルによらない普遍的フレームワークを目指すため、モデルの特徴を極力利用せずに状態アンサンブルの構成を行う。大自由度カオスとして、本ノートでは、散逸系を想定する。本ノートの方法は保存系にも有効だと考えているが、定常状態にある保存系の巨視的性質を記述する状態測度は従来から知られているマイクロ・カノニカル分布で十分である。

3 モデル

Sakaguchi の Bernoulli CML[8] を参考にモデルをつくる。大自由度カオスの例として、詳細釣り合いの成立しないモデルのほうが、ふさわしいであろう。このため、Sakaguchi のモデルの奇数サイトと偶数サイトを交互に更新するというルールを外す。また、解析的扱いが容易となるように、両隣のサイトと相互作用するのではなく片側のサイトとの相互作用のみ取り入れる³。

これらを考慮したモデルは以下の通りである。格子は N サイトの 1 次元格子とする。格子点 i 上の力学変数は $x_i^t \in [-1, 1]$ と Δ_i^t である。これらの変数の従う写像は次の通りとする：

$$\begin{aligned} x_i^{t+1} &= \frac{2}{1 + s_i^t \Delta_i^t} (x_i^t + s_i^t) - s_i^t, \\ \Delta_i^{t+1} &= \tanh(ks_i^{t+1} + F). \end{aligned} \quad (1)$$

k と F はパラメータである。また、ここで、 s_i^t は、次のように x_i^t , Δ_i^t から決まる 2 値の補助変数である：

$$s_i^t = \begin{cases} +1 & (-1 \leq x_i^t < \Delta_i^t) \\ -1 & (\Delta_i^t \leq x_i^t \leq 1). \end{cases} \quad (2)$$

したがって、 Δ_i^t も 2 値の離散変数である。以下、系の状態 $(x_1, x_2, \dots, x_N, \Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_N)$ を X , Eq. (1) の写像を $X^{t+1} = M(X^t)$ と略記する。

4 定常状態を特徴づける状態確率測度

本ノートでいう巨視的性質とは、多くの自由度にわたる平均で定義される諸量の定常状態期待値と考えることにする。系の詳細の記述はあきらめ、この巨視的性質のみに集中することで、簡潔かつ普遍的な理論的枠組みが得られると期待する。

4.1 notation および設定

以下、カオスの記号力学系の知識を用いる。

- シンボル (記号)

$$s^t \equiv s_1^t, s_2^t, \dots, s_N^t. \quad (3)$$

一般の力学系では、シンボルによる記述が初めから分かっていることは無く、以下の generating partition を与えることにより得られる。

- 記号列：記号の時系列

$$[s] \equiv (s^1, s^2, \dots, s^T). \quad (4)$$

- generating partition $J^{(1)}(s)$: s に対応するマイクロ状態 X の集合。相空間を細かく分割するための大雑把な分割。
- cylinder set: 記号列 $[s] \equiv (s^1, s^2, \dots, s^T)$ を生成する初期状態の集合。次のようにして得られる：

$$J^{(T)}(s) \equiv J^{(1)} \cap M^{-1}(J^{(1)}(s^2)) \cap \dots \cap M^{-T+1}(J^{(1)}(s^T)). \quad (5)$$

- 初期状態の確率測度相空間の体積に関してスムーズなものを考える。以下、 ν_0 と書く。

³状態アンサンブル平均を計算する際の転送行列が 2×2 行列になる。両側相互作用だと 4×4 。

4.2 記号列 (s^1, \dots, s^T) の実現確率

記号列 $[s] \equiv (s^1, \dots, s^T)$ の実現確率は、定義より、その cylinder set 上の初期状態測度 $\nu_0(J^{(T)}([s]))$ である。初期測度がスムーズなため、以下のように評価される：

$$\nu_0(J^{(T)}([s])) \sim |J^{(T)}([s])| \sim |DM^{T-1}(Y)|^{-1}. \quad (6)$$

ここで、 $|\cdot|$ は集合の相空間体積、および、 Y は cylinder set の代表点 $Y \in J^{(T)}([s])$ である。 $X \equiv M^{T-1}(Y) \in J^{(1)}(s^T)$ とすると、

$$\nu_0(J^T([s])) \sim |DM^{T-1}(M^{-T+1}(X))|^{-1}. \quad (7)$$

この表式は、 s から s' への遷移確率 $T(s \rightarrow s')$ が

$$T(s \rightarrow s') = |DM(X)|^{-1} \quad (8)$$

で与えられることも意味する。ここで、 $X \in J^{(2)}((s, s'))$ である。

この記号列の実現確率を用いて、定常状態での記号 s の実現確率 $P(s)$ が得られる。 T を巨視的物理量の緩和時間よりも十分長くとれば、

$$\begin{aligned} P(s) &\equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{s^1} \sum_{s^2} \cdots \sum_{s^{T-1}} \nu_0(J^{(T)}(s)) \\ &\sim \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{s^1} \sum_{s^2} \cdots \sum_{s^{T-1}} \exp[-\sum_{t=0}^{T-1} \log |DM(M^{-t}(X))|]. \end{aligned} \quad (9)$$

この段階では、 $P(s)$ を評価するためには軌道に関する和、すなわち、軌道アンサンブルが必要である。したがって、Eq. (9) は、まだ、本ノートのターゲットである軌道アンサンブルを経由せずに構成できる状態アンサンブルではない。そこで、指数関数の肩の量に関する考察を行う。 $\log |DM(M^{-t}(X))|$ を X に相関する部分と相関しない部分に分割する：

$$\begin{aligned} \log |DM(M^{-t}(X))| &\equiv h(M^{-t}(X)) \\ &\simeq \langle h(M^{-t}(X)) \rangle + c(t)[h(X) - \langle h(X) \rangle]. \end{aligned} \quad (10)$$

ここで、相関しない部分は $P(s)$ に定数の寄与をするだけなので無視した。また、 $\langle \cdot \rangle$ は X の定常状態測度（自然測度）に関する期待値であり、 $c(t)$ は次の 2 時間相関関数である：

$$c(t) \equiv \frac{\langle [h(X) - \langle h(X) \rangle][h(M^{-t}(X)) - \langle h(M^{-t}(X)) \rangle] \rangle}{\langle [h(X) - \langle h(X) \rangle]^2 \rangle}. \quad (11)$$

したがって、

$$\sum_{t=0}^{T-1} \log |DM^{-t}(X)| \simeq \log |DM(X)| + \sum_{t=0}^{T-1} c(t) + X \text{ に相関しない項}. \quad (12)$$

X に相関しない項は $P(s)$ に関して定数の寄与をするだけなので、 $\tau \equiv \sum_{t=0}^{\infty} c(t)$ というパラメータにより、

$$P(s) \sim \sum_{s^1} \sum_{s^2} \cdots \sum_{s^{T-1}} \exp[-\tau \log |DM(X)|]. \quad (13)$$

特に、モデル、Eq.(1)、では、状態確率測度 $P_\tau(s) \equiv P(s)$ は、

$$\begin{aligned} P_\tau(s) &= \sum_{s^1} \sum_{s^2} \cdots \sum_{s^{T-1}} \prod_i \left[\frac{1 + s_i \tanh(ks^{T-1}{}_{i+1} + F)}{2} \right]^\tau / Z_\tau \\ &= \prod_i \left\{ \left[\frac{1 + s_i \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 + s_i \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\} / Z_\tau \end{aligned} \quad (14)$$

となる。この測度は、 τ を除き、時間発展を参照せずに s の実現確率を与えるものになっている。この確率測度と、次節 (Sec. 4.3) で述べる「相関時間」 τ の値の決定方法が、本ノートの main claims である。

4.3 τ の値の決定方法

τ はその定義から系に固有の値をとる量である。この相関時間は当然ながら動的な量であり、評価には軌道アンサンブルを解析する必要がでてくるかのように思われる。しかし、軌道アンサンブルを用いずに状態アンサンブルを構成するためには、長時間にわたる時間発展を解析せずに τ の値を決定したい。

そこで、Eq. (14) の確率測度が、遷移確率が Eq. (8) で与えられる確率過程に対し、巨視的にみて定常状態になっているという要請から τ の値を決定する。巨視的な定常性の条件を、ある巨視的物理量 $A(s)$ について書き下すと、

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{s'} A_N(s') \sum_s T(s \rightarrow s') P_\tau(s) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{s'} A_N(s') P_\tau(s'). \quad (15)$$

τ 以外は既知の量であるため、この式から τ の値を決定することができる。確率測度、Eq. (14)、と、この τ の決定方法が本ノートの main claims である。

Eq. (15) の左辺は、巨視的物理量 $\sum_{s'} A_N(s') T(s \rightarrow s')$ の $P_\tau(s)$ による期待値と解釈できる。したがって、Eq. (15) の条件は、 $\sum_{s'} A_N(s') T(s \rightarrow s')$ と $A_N(s)$ という異なる二つの巨視的物理量の $P_\tau(s)$ による期待値が一致するときの τ の値が我々の求める τ の値であると読める；

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle \sum_{s'} A_N(s') T(s \rightarrow s') \rangle_\tau = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle A_N(s) \rangle_\tau. \quad (16)$$

$A_N(s)$ を $A(s) = \sum_i A^{(1)}(s_i)$ のように書ける量に選べば、モデル (Eq.(1)) の場合、Eq. (15) の左辺は次のような巨視的物理量の期待値である：

$$\begin{aligned} & \sum_{s'} A_N(s') T(s \rightarrow s') \\ &= \sum_{s'} \sum_i A^{(1)}(s'_i) T(s \rightarrow s') \\ &= \sum_i \sum_{s'} A^{(1)}(s'_i) T(s \rightarrow s') \\ &= \sum_i \sum_{s'} A^{(1)}(s'_i) \prod_j \frac{1 + s'_j \tanh(ks_{j+1} + F)}{2} \\ &= \sum_i \left[\sum_{s'_i} A^{(1)}(s'_i) \frac{1 + s'_i \tanh(ks_{i+1} + F)}{2} \right] \left[\prod_{j(\neq i)} \sum_{s'_j} \frac{1 + s'_j \tanh(ks_{j+1} + F)}{2} \right] \\ &= \sum_i \left[A^{(-1)}(-1) \frac{1 - \tanh(ks_{i+1} + F)}{2} + A^{(1)}(1) \frac{1 + \tanh(ks_{i+1} + F)}{2} \right] \\ & \quad \times \prod_{j(\neq i)} \left[\frac{1 - \tanh(ks_{j+1} + F)}{2} + \frac{1 + \tanh(ks_{j+1} + F)}{2} \right] \\ &= \sum_i \left[A^{(1)}(-1) \frac{1 - \tanh(ks_{i+1} + F)}{2} + A^{(1)}(1) \frac{1 + \tanh(ks_{i+1} + F)}{2} \right] \\ &= \sum_i \frac{A^{(1)}(-1) + A^{(1)}(1)}{2} + \sum_i \frac{A^{(1)}(1) - A^{(1)}(-1)}{2} \tanh(ks_{i+1} + F) \\ &= N \frac{A^{(1)}(-1) + A^{(1)}(1)}{2} + \frac{A^{(1)}(1) - A^{(1)}(-1)}{2} \sum_i \tanh(ks_{i+1} + F). \end{aligned} \quad (17)$$

特に、 $A^{(1)}(s) = s$ と選ぶと、

$$\sum_{s'} A_N(s') T(s \rightarrow s') = \sum_i \tanh(ks_{i+1} + F). \quad (18)$$

したがって、 $A_N(\{s\}) = \sum_i s_i$ のとき、 τ を決定する条件式 (Eq. (15)) は、

$$\langle s \rangle_\tau = \langle \tanh(ks + F) \rangle_\tau \quad (19)$$

となる。

$A_N(s) \equiv \sum_i s_i s_{i+1}$ と選ぶと、同様にして、

$$\langle s_i s_{i+1} \rangle_\tau = \langle \tanh(ks_i + F) \tanh(ks_{i+1} + F) \rangle_\tau \quad (20)$$

が得られる。なお、 τ は局所軌道拡大率の2時間相関関数 $c(t)$ から定義される相関関数であるため、 $A_N(s)$ の選択によらず系固有の値をとる。

Eq. (19) のもう一つの意味を指摘しておく。Eq. (19) は、 τ を決定する条件式であるとともに、その τ では任意の巨視的物理量 $A_N(s)$ に対し $\lim_{N \rightarrow \infty} \langle A_N \rangle_\tau / N = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle A_N \rangle_{n.i.m.} / N$ が成立するため、異なる物理量期待値間の関係式

$$\langle s \rangle_{n.i.m.} = \langle \tanh(ks + F) \rangle_{n.i.m.} \quad (21)$$

でもある。ここで $\langle \cdot \rangle_{n.i.m.}$ は自然測度に関する期待値を意味する。

5 結果：状態確率測度, Eq. (14), と τ の決定方法, Eq. (15), のモデルによるテスト

まず、 τ の値を決定しなければならない。そのため、 $\langle s \rangle$ と $\langle \tanh(ks + F) \rangle$ の表式を得る。付録の Eq. (28) から、

$$\begin{aligned} & \langle s \rangle_\tau \\ &= \left\{ - \left[\frac{1 - \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau - \left[\frac{1 - \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 + \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 + \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\} \\ & / \left\{ \left[\frac{1 - \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 - \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 + \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 + \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\}, \\ & \langle \tanh(ks + F) \rangle_\tau \\ &= \left\{ \left(\left[\frac{1 - \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 - \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right) \tanh(-k + F) \right. \\ & \quad \left. + \left(\left[\frac{1 + \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 + \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right) \tanh(k + F) \right\} \\ & / \left\{ \left[\frac{1 - \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 - \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 + \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 + \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\} \quad (22) \end{aligned}$$

これらの一致 (Eq. (19)) から τ の値が決まる。

巨視的物理量の自然確率測度による期待値を正しく得ることができるか否かのテストとして、 $E_N \equiv \sum_i s_i s_{i+1}$ の期待値を計算してみる。つまり、 $\langle s \rangle_\tau = \langle \tanh(ks + F) \rangle_\tau$ から決まる τ で $\langle E_N \rangle_\tau / N$ が、自然確率測度による期待値の近似である直接数値シミュレーション (DNS) による長時間平均 $\langle E_N \rangle / N$ と、良い精度で一致することを確かめる。DNS は $N = 1024, k = 1.0, F = 0.5$ の条件で行った。結果は、Fig. 1 に表示されている。 $\langle s \rangle_\tau$ と $\langle \tanh(ks + F) \rangle_\tau$ が一致する τ で、 $\langle E_N \rangle_\tau / N$ と DNS の結果 $\langle E_N \rangle / N$ が精度良く一致しているのが分かる。また、グラフには $M_N \equiv \sum_i s_i$ の DNS による結果 $\langle M_N \rangle / N$ も表示した。 $\langle s \rangle_\tau$ と $\langle \tanh(ks + F) \rangle_\tau$ が一致する τ で、 $\langle s \rangle_\tau = \langle M_N \rangle_\tau / N$ が $\langle M_N \rangle / N$ に一致している。以上のように、極めて簡単に構成できる単一の確率測度により、二つの異なる巨視的物理量の期待値が正しく計算されることが確かめられた。

また、図から分かる通り、複数の巨視的物理量 $\sum_i s_i, \sum_i s_i s_{i+1}$ に対する巨視的定常性の式 (Eq. (19), Eq. (20)) が与える τ の値が一致している。

6 Discussion

本ノートで提案した状態アンサンブル構成方法の一般性を論ずる。まだ、Bernoulli CML のみで有効性を確認したにすぎないので、一般性は不明である。より多くのモデルで有効性の証拠を積み上げる

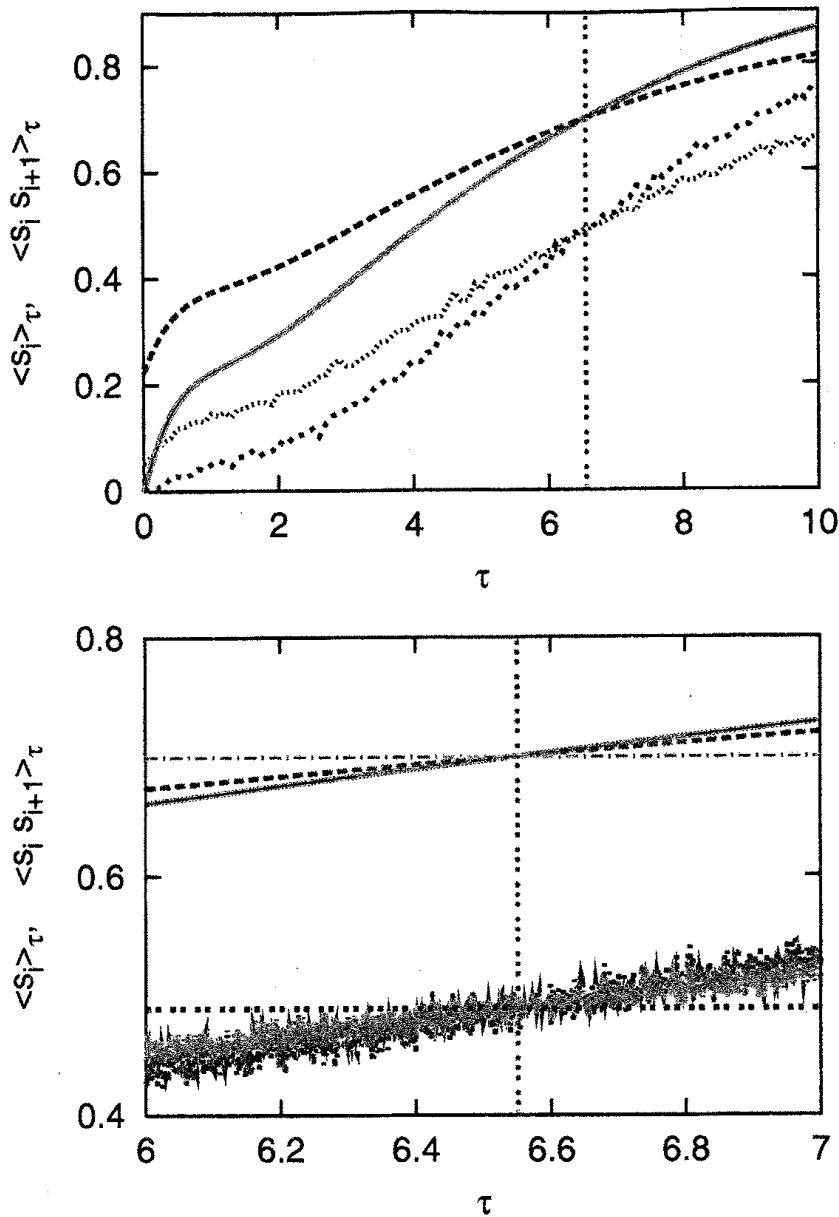


Figure 1: 二つの異なる巨視的物理量 $E_N \equiv \sum_i s_i s_{i+1}$, $M_N \equiv \sum_i s_i$ の期待値を正しく計算できることの確認。 τ を変えて、 $\langle s \rangle_\tau = \langle M_N \rangle_\tau / N$ (赤の実線), $\langle s_i s_{i+1} \rangle_\tau = \langle E_N \rangle_\tau / N$ (青の点線), $\langle \tanh(ks + F) \rangle_\tau$ (緑の破線) を計算し、 $\langle s \rangle_\tau = \langle \tanh(ks + F) \rangle_\tau$ (Eq. (19)) の条件から τ を決定した (赤の破線)。この τ での $\langle s \rangle_\tau = \langle M_N \rangle_\tau / N$ が DNS による長時間平均 $\langle M_N \rangle / N$ (水色の破線) に、 $\langle E_N \rangle_\tau / N$ が DNS の $\langle E_N \rangle / N$ (黒の破線) に、良い精度で一致しているのが分かる。また、巨視的定常性により決まる τ の値が巨視的物理量の選択に依らないことを確認するため、 $\langle \tanh(ks_i + F) \tanh(ks_{i+1} + F) \rangle_\tau$ を示した (ピンク色の点線)。 E_N に対する巨視的定常性 (Eq. (20)) が、 M_N に対する巨視的定常性 (Eq. (19)) と同じ τ で成立しているのが確認できる。下の図は、上の図の拡大図。なお、モデル・パラメータは $k = 1.0$, $F = 0.5$ とし、DNS は $N = 1024$ で行った。 $\langle s \rangle_\tau$, $\langle \tanh(ks + F) \rangle_\tau$ は解析的に計算したが、 $\langle E_N \rangle_\tau / N$ は Monte Carlo シミュレーションにより計算した。

必要がある。ただし、 τ の決定方法は巨視的な定常性のみを用いているため一般に有効であろう。一方、状態測度の表式 (Eq. (14)) を導く際に、expanding map 固有の性質を用いた。しかし、expanding map ではない双曲力学系に関する同様の議論が可能である。また、より一般の非双曲系に関する、巨視的性質に関する限り、非双曲性は無視して双曲系として扱って良いと期待される (“chaotic hypothesis” と呼ばれる [9]) ので、今のところ (2005年4月現在)、本ノートで提案した状態アンサンブル構成方法は一般的に拡張可能であると信じている。

以下、この方法が普遍的に有効だと仮定して、その意義を考える。捕らぬ狸の皮算用であるが、研究のモチベーションを明確にすることができる。

まず、本ノートの枠組みと平衡統計力学を比較してみる。平衡統計力学が平衡状態の特徴づけに成功したのと同様、本ノートの枠組みは大自由度カオスである Eq. (1) のモデルの定常状態を確率測度の露な形を与えて記述している。また、期待値の計算過程で、平衡統計力学に比べて増えたタスクは、 $|DM(X)|$ の評価と τ の決定のみである。他は、系の空間次元と相互作用のレンジが同じなら、同程度の計算量で巨視的物理量の期待値を計算できる。したがって、本ノートで提案した枠組みは、大自由度カオスの統計力学と呼ぶべき資格を備えていると言える。

付録に見るように、期待値の計算は平衡統計力学のそれと同様であるため、平衡統計力学で開発された手法、クラスタ展開、繰り込み群、メトロポリス法によるモンテカルロ・シミュレーションなどの全てを利用することができる。

一方、本枠組みに特有で評価の難しいのは $|DM(X)|$ である。大自由度系では固有値解析は困難だろう。ただ、これに関しては、巨大行列の固有値解析に関する膨大な蓄積が利用できるであろう。また、ハミルトニアン of 厳密な形が複雑であったり、分配関数の形式的表式が書いても評価が難しいのは平衡統計力学でも同様であった。カノニカル分布の線形応答理論における利用のように、形式的表現だけでも、普遍的関係式の議論に用いることなど有用な利用法があるだろう。

次に、軌道アンサンブルの方法と比較してみる。軌道アンサンブルの方法では、比較的長い (巨視的物理量の緩和時間よりも長い) 解軌道という、運動方程式を積分して得られるものを含んでいる。一方、本ノートの方法は状態のみを含むため、運動方程式の積分の必要が無い。そのため、長時間にわたる緩和現象をとらえることは放棄せざるをえないが、定常状態の期待値計算は桁違いに容易になった。時間発展も、遷移確率 (Eq. (8)) を用いることで数ステップの間なら (軌道アンサンブルの方法に比べ) 極めて容易に解析可能である。例えば、Kolmogorov-Sinai entropy のように巨視的物理量の変化速度として定義される量も計算可能である。このようなメリットにより、軌道アンサンブルのもたらしたものと異なる豊かな実りをもたらすのではないかと期待している。例えば、(詳細釣り合いの成立しない) 大自由度カオスにおける、揺動散逸定理を論ずることができるだろう。実際、既に本ノート内でも、物理量間の関係式 (Eq. (21)) を導くことができている。また、我々の方法は系の非線形性を全く問題にしないため、摂動論などの従来の方法では難しかった乱流の速度揺らぎ指数の評価などが射程内に入ってくるだろう。

7 Conclusion

本ノートを要約する。簡単な大自由度カオスモデルの定常状態を特徴づける、極めて容易に構成できる状態確率測度を得た。それを用いて、複数の巨視的物理量の期待値を計算できることを確かめた。また、方法の一般的拡張可能性、軌道アンサンブルの方法に対する advantage と今後の展望に簡単に触れた。

A 巨視的物理量の期待値の計算

この付録では、巨視的物理量の確率測度

$$P_\tau(s) = \sum_{s'} |DM(X)|^{-\tau} / Z_\tau \quad (23)$$

による期待値を計算する。ここで、 $X \in J^{(2)}(s', s)$ であり、 Z_τ は規格化の定数である。計算するのは、ある巨視的物理量 $A_N(s)$ の期待値とする。分配関数 $Z_{\tau,a}$ を次のように定義する：

$$Z_{\tau,a} \equiv \sum_s \sum_{s'} |D^{(u)}M(X)|^{-\tau} \exp(aA_N(s)). \quad (24)$$

この分配関数から次のようにして期待値 $\langle A_N \rangle_\tau$ が得られる：

$$\begin{aligned}
 \langle A_N \rangle_\tau &= \sum_s \sum_{s'} A_N(s) |D^{(u)} M(X)|^{-\tau} / Z_\tau \\
 &= \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{Z_{\tau,a}} \frac{\partial}{\partial a} \sum_{\{s\}} \sum_{\{s'\}} |D^{(u)} M(X)|^{-\tau} \exp(a A_N(\{s\})) \\
 &= \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{Z_{\tau,a}} \frac{\partial Z_{\tau,a}}{\partial a} \\
 &= \lim_{a \rightarrow 0} \frac{\partial \ln Z_{\tau,a}}{\partial a} \tag{25}
 \end{aligned}$$

CML モデル, Eq. (1), の場合に、分配関数を評価し期待値を計算する。まず、 $A(s) = \sum_i A^{(1)}(s_i)$ の場合、

$$\begin{aligned}
 Z_{\tau,a} &= \sum_s \sum_{s'} \prod_i \left[\frac{1 + s_i \tanh(ks'_{i+1} + F)}{2} \right]^\tau \exp(a A^{(1)}(s_i)) \\
 &= \sum_s \prod_i \left\{ \left[\frac{1 + s_i \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 + s_i \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\} \exp(a A^{(1)}(s_i)) \\
 &= \left(\left\{ \left[\frac{1 - \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 - \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\} \exp(a A^{(1)}(-1)) \right. \\
 &\quad \left. + \left\{ \left[\frac{1 + \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 + \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\} \exp(a A^{(1)}(1)) \right)^N. \tag{26}
 \end{aligned}$$

これを用いて、

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial Z_{\tau,a}}{\partial a} &= N \left(\left\{ \left[\frac{1 - \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 - \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\} \exp(a A^{(1)}(-1)) \right. \\
 &\quad \left. + \left\{ \left[\frac{1 + \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 + \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\} \exp(a A^{(1)}(1)) \right)^{N-1} \\
 &\quad \times \left(\left\{ \left[\frac{1 - \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 - \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\} \exp(a A^{(1)}(-1)) A^{(1)}(-1) \right. \\
 &\quad \left. + \left\{ \left[\frac{1 + \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 + \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\} \exp(a A^{(1)}(1)) A^{(1)}(1) \right). \tag{27}
 \end{aligned}$$

これで、期待値が次のように得られる：

$$\begin{aligned}
 \langle A(s) \rangle_\tau &= \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{Z_{\tau,a}} \frac{\partial Z_{\tau,a}}{\partial a} \\
 &= N \left(\left\{ \left[\frac{1 - \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 - \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\} A^{(1)}(-1) \right. \\
 &\quad \left. + \left\{ \left[\frac{1 + \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 + \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\} A^{(1)}(1) \right) \\
 &\quad / \left(\left\{ \left[\frac{1 - \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 - \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\} \right. \\
 &\quad \left. + \left\{ \left[\frac{1 + \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 + \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\} \right). \tag{28}
 \end{aligned}$$

次に $A(s) = \sum_i A^{(2)}(s_i, s_{i+1})$ のような巨視的物理量の期待値計算を論ずる。分配関数は、

$$\begin{aligned}
 Z_{\tau,a} &= \sum_s \sum_{s'} \prod_i \left[\frac{1 + s_i \tanh(ks'_{i+1} + F)}{2} \right]^\tau \exp(a A^{(2)}(s_i, s_{i+1})) \\
 &= \sum_{\{s\}} \prod_i \left\{ \left[\frac{1 + s_i \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 + s_i \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\} \exp(a A^{(2)}(s_i, s_{i+1})). \tag{29}
 \end{aligned}$$

transfer matrix を

$$t_{s_i, s_{i+1}} = \left\{ \left[\frac{1 + s_i \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 + s_i \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\} \exp(aA^{(2)}(s_i, s_{i+1})) \quad (30)$$

と定義する。周期境界条件を課すと、分配関数は、

$$\begin{aligned} Z_{\tau, a} &= \sum_s \prod_i t_{s_i, s_{i+1}} \\ &= \text{Tr} t^N \end{aligned} \quad (31)$$

として評価される。この transfer matrix は、 2×2 の非対称行列である。trace のみが必要であるため、 t の最大固有値のみ計算すれば良い。 t の固有値の表式が複雑すぎるので、解析計算はここで打ち切る。

References

- [1] G. Kawahara and S. Kida. *J. Fluid Mech.*, 449:291, 2001.
- [2] S. Kato and M. Yamada. *Phys. Rev. E*, 68:025302(R), 2003.
- [3] M. Kawasaki and S. Sasa. preprint: nlin.CD/0408013.
- [4] D. J. Evans, E. G. D. Cohen, and G. P. Morris. *Phys. Rev. Lett.*, 71:2401, 1993.
- [5] G. Gallavotti and E. G. D. Cohen. *Phys. Rev. Lett.*, 74:2694, 1995.
- [6] C. Maes. *J. Stat. Phys.*, 95:367, 1999.
- [7] G. E. Crooks. *Phys. Rev. E*, 61:2361, 2000.
- [8] H. Sakaguchi. *Prog. Theor. Phys.*, 80:7, 1988.
- [9] G. Gallavotti. *Phys. Rev. Lett.*, 77:4334, 1996.