

時空カオスの巨視的性質を記述する状態確率密度

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

May 22, 2006

Abstract

近年、大自由度カオス系の巨視的性質を軌道アンサンブルを用いて記述する成果が注目を集めている。軌道アンサンブルを用いる方法は緩和や応答を記述できる利点がある反面、アンサンブル構成に運動方程式の解析を必要とする難点がある。もし軌道アンサンブルでなく状態アンサンブルによる記述が可能ならば、この難点を克服し、ひいては、従来試みられた大自由度カオスの記述につきものであった非線形性と大自由度性の困難を回避することができる。この状態アンサンブルによる大自由度カオスの巨視的性質記述の第一歩として、3つの簡単なモデルにおいて、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。

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大いに発展の余地を残しているといえる。乱流研究を例にとると、いわゆる乱流の統計理論により、速度場の確率分布関数の中心付近の性質が、Navier-Stokes 方程式の練り込み摂動展開から決まる、ということが知られている。もちろん、これ自体は大成果であるが、この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などの点から、著者はこれに満足しない立場をとりたい。

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練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]。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] をもって、非平衡統計力学や、カオス系の統計力学が完成されたという主張がなされることもある。

しかし、これらの軌道アンサンブルによる記述方法は次の困難を持つ：

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評価する際に、重率の評価に比較的長い軌道に沿った量の解析を必要とする。つまり、運動方程式を解くことと同等の解析を必要とする。著者は、その考案から約 20 年経った現在でも軌道アンサンブルによって得られた理論的収穫が fluctuation theorem など少数にとどまるのは、このような軌道アンサンブルの使いづらさによると考えている。

一方、軌道を使わ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るわけではないし、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極めてパワフルであったことを思い出されたい。

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 状態測度

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。

まず、定常状態における状態 X の確率密度を、軌道アンサンブルを使って表現する。写像力学系を $X^{t+1} = M(X^t)$ とすると、時刻 t の確率密度 $\rho(X, t)$ の時間変化は、Perron-Frobenius 方程式により次のように書かれる：

$$\rho(X, t) = |DM^{-1}(X)|\rho(M^{-1}(X), t-1). \quad (1)$$

したがって、十分長い時間 T 経過後の定常状態に緩和した確率密度は

$$\rho(X, T) = \rho(M^{-T+1}(X), 0) \prod_{t=0}^{T-1} |DM^{-1}(M^{-t}(X))|. \quad (2)$$

これは、軌道アンサンブルによる状態確率密度の表現の一つである。右辺を計算するには十分長い時間 T にわたり軌道を追跡する必要がある。

この表現より、状態 X の確率密度にとって、 $|DM^{-1}(X)|$ という量が重要であることが分かる。 $|DM^{-1}(X)|$ は瞬間の軌道拡大率であり、軌道安定性を表している。ここで、我々の目標が巨視的性質の記述であることを思い出されたい。巨視的物理量は多数の法則により、相空間の中で極めて緩慢に変動する関数である。このため、相空間中の $\log |DM^{-1}(X)|$ の等値面上のほとんど全ての点で、巨視的物理量 $A(X)$ の leading term の値は同一の値をとることが分かる。そこで、この等値面をアトラクタを含むように設定すれば、 $A(X)$ の等値面上の等重率平均と、アトラクタ上での平均、すなわち、定常状態での期待値が一致することが強く期待される。したがって、我々の目標である、定常状態の巨視的性質を記述する状態確率測度は、アトラクタを含む $\log |DM^{-1}(X)|$ の等値面上の等重率分布であると推測される。この状態確率測度の表現は、状態密度と安定性の釣り合いを表すとも読める。

使いやすいうように、等重率分布と等価な分布を導入しておく。平衡統計力学のときと、まったく同じ論理により、 $\log |DM^{-1}(X)|$ の等値面上の等重率分布と、次の確率密度による分布は巨視的に全く等価である：

$$\rho_\tau(X) = |DM^{-1}(X)|^\tau / Z_\tau. \quad (3)$$

ここで、 τ は系固有の定数で、 Z_τ は規格化定数である。

アトラクタを含むように等値面を設定するのは簡単である。巨視的物理量の期待値が定常であるように定数 τ を調節すれば良い。具体的には次の式により、 τ を決定する：

$$\int dX \rho_\tau(X) \ln |DM^{-1}(M(X))| / N = \int dX \rho_\tau(X) \ln |DM^{-1}(X)| / N. \quad (4)$$

この決定において、軌道の追跡は不要である。 $M(X)$ は写像力学系から直ちに分かるからである。

4 モデル

Sakaguchi の Bernoulli CML [8] を参考にモデルをつくる。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。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¹。

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：

$$\begin{aligned} x_i^{t+1} &= \frac{2}{1 + s_i^t \Delta_i^t} (x_i^t + s_i^t) - s_i^t, \\ \Delta_i^{t+1} &= \tanh(ks_{i+1}^t + F). \end{aligned} \quad (5)$$

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：

$$s_i^t = \begin{cases} +1 & (-1 \leq x_i^t < \Delta_i^t) \\ -1 & (\Delta_i^t \leq x_i^t \leq 1). \end{cases} \quad (6)$$

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. (5) の写像を $X^{t+1} = M(X^t)$ と略記する。

4.1 状態確率測度

上述のモデルに対する、定常状態での記号 s の実現確率 $P(s)$ は、Eq. (3) から簡単な計算をとおして次のように得られる：

$$\begin{aligned} P_\tau(s) &= \sum_{s^1} \sum_{s^2} \dots \sum_{s^{T-1}} \prod_i \left[\frac{1 + s_i \tanh(ks_{i+1}^{T-1} + F)}{2} \right]^\tau / Z_\tau \\ &= \prod_i \left\{ \left[\frac{1 + s_i \tanh(-k + F)}{2} \right]^\tau + \left[\frac{1 + s_i \tanh(k + F)}{2} \right]^\tau \right\} / Z_\tau \end{aligned} \quad (7)$$

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。

4.2 τ の値の決定方法

巨視的な定常性の条件のある巨視的物理量 $A(s)$ について書き下すと、

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle \sum_{s'} A_N(s') T(s \rightarrow s') \rangle_\tau = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle A_N(s) \rangle_\tau. \quad (8)$$

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。ここで、 $T(s \rightarrow s')$ は遷移確率である²。

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. (8)) は、

$$\langle s \rangle_\tau = \langle \tanh(ks + F) \rangle_\tau \quad (9)$$

となる。

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

$$\langle s_i s_{i+1} \rangle_\tau = \langle \tanh(ks_i + F) \tanh(ks_{i+1} + F) \rangle_\tau \quad (10)$$

が得られる。

¹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 。

²その衣式は紙数の都合で割愛する。Eq. (4) に見るように、確率密度 $\rho_\tau(X)$ を使って τ を決定する場合には、遷移確率は必要ない。したがって、遷移確率が得られるかいないかは、本質的でない。

5 結果：状態確率測度, Eq. (7), と τ の決定方法のモデルによるテスト

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 での $\langle E_N \rangle_\tau / N$ 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、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 $\sum s_i, \sum s_i s_{i+1}$ に対する巨視的定常性の式 (Eq. (9), Eq. (10)) が与える τ の値が一致している。

6 Discussion

まず、もっとも気になる、本ノートで提案した状態アンサンブル構成方法の普遍性に言及する。本ノートには Bernoulli CML に関する結果のみ記載したが、変形テント写像の CML、変形パイコネ変換の CML でも同様の検証を行った結果、確率密度 (Eq. (3)) の有効性を数値的に確認している。したがって、まだ Bernoulli CML、変形テント写像の CML、変形パイコネ変換の CML 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必要がある。また、ここでは議論しないが、この状態確率測度の形の普遍性を根拠付けを目下鋭意研究中である。

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と同様、本ノートの枠組みは大自由度カオス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³。

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。

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。お望みとあらば、時間発展も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。また、我々の方法は系の非線形性と大自由度性を全く問題にしないため、揺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の特徴づける、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数値的に確かめた。また、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。

³一方、序論に述べたように、軌道アンサンブルの方法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ないと考えている。

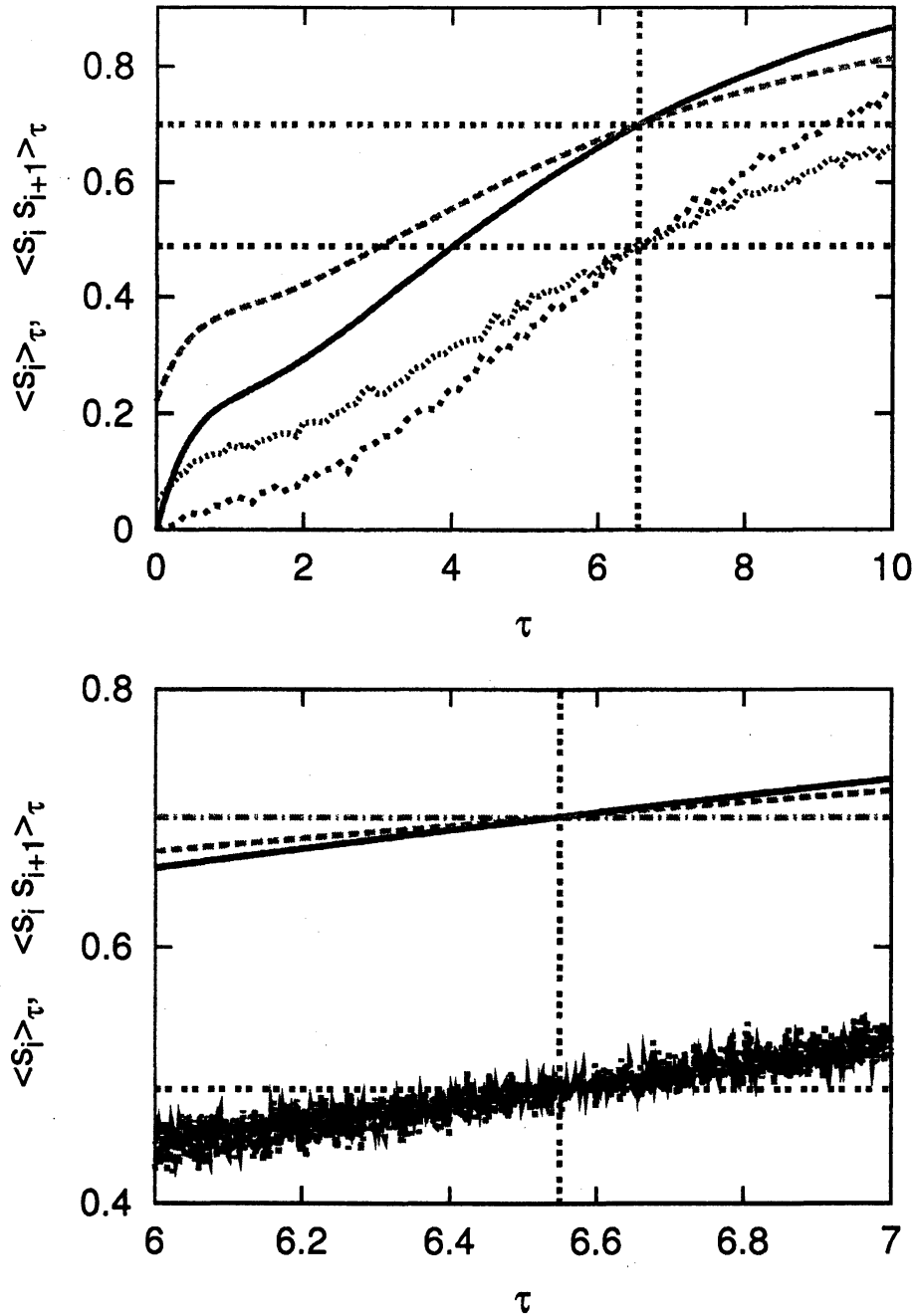


Figure 1: 二つの異なる巨視的物理量 $E_N \equiv \sum_i s_i s_{i+1}$, $M_N \equiv \sum_i s_i$ の期待値を正しく計算できることの確認。 τ を変えて、 $\langle s \rangle_\tau = \langle M_N \rangle_\tau / N$ (実線), $\langle s_i s_{i+1} \rangle_\tau = \langle E_N \rangle_\tau / N$ (大きい点の点線), $\langle \tanh(ks + F) \rangle_\tau$ (破線), $\langle \tanh(ks_i + F) \tanh(ks_{i+1} + F) \rangle_\tau$ (小さい点の点線) の4つの量を計算し、 $\langle s \rangle_\tau = \langle \tanh(ks + F) \rangle_\tau$ (Eq. (9)) の条件から τ を決定した (垂直に伸びる点線)。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 $\langle M_N \rangle / N$ (水平に伸びる点線) に、 $\langle E_N \rangle_\tau / N$ が DNS の $\langle E_N \rangle / N$ (水平に伸びる点線) 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 (小さい点の点線)。 E_N に対する巨視的定常性 (Eq. (10)) が、 M_N に対する巨視的定常性 (Eq. (9)) 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。

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. *Phys. Rev. E*, 72:037202, 2005.
- [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.