 物性研究・電子版 Vol. 4, No. 1, 041203（2015年2月号）

ミクロな基本法則とマクロな基本法則の懸け橋

京都大学大学院理学研究科 佐々真一

概 要

自然現象の背後にある単純な法則を見出し体系化するのが物理学である。現在、その体系は相当整備されているように見える。例えば、舞い落ちる銀杏の葉っぱを見てみよう。複雑によろめいているが、流体力学の方程式と境界条件で記述されるのは多分間違いない。あるいは、原子分子の世界でシュレーデンガー方程式の記述、いやいや、クォークの世界でゲージ場による記述… などもきっと正しい。現象の背後にある法則を求める場合、どこまで後ろにまわるのも自由であり、自分が好きなところで法則を書けばよい。こうしてできあがってきた基本法則群を眺めると、フロンティアは常にあるものの、物理学の牙城は万全なように見える。ところで、ある現象に対して、どの基本法則に拠っていいとしても、それらは同じ現象を記述しているはずである。その事実は説明できるのだろうか？そもそも、基本法則と基本法則を結びつける法則はどうなっているのか？明日の研究にすぐに役立つわけではないが、普段考えないようなことをゆっくり学ぶ機会にしたい。

1 春 素朴な疑問

あまりにも不自然に桜が咲き誇る春。僕は大学２回生になった。この１年間、物理はすごく勉強したが、友人のキヨには知識量も理解の深さも遠く及ばない。キヨは高校時代から量子論や相対論を勉強していたというから、受験勉強だけしていた僕との差は歴然としている。

２回生で何のセミナーをしようか。１回生では、ゴールドスタインの古典力学、砂川の理論電磁気学、ランダウの場の古典論のセミナーをして、物理の体系の整然さを堪能した。次は、いかにも気持ち悪そうな量子力学かな。ディラックあたりで希望者を集めようか。統計力学も気になっているが、もう少し自分で勉強してからの方がいいかもしれない。

自分がしたいセミナーがあると、掲示板にセミナー案内を貼る。友人たちにも声をかけ、ディラックセミナーが立ち上がった。掲示板を見て参加した１回生も混じっていた。その中に少し変わったソラがいた。

ソラは高校時代に先に勉強しているおませなタイプではなかった。自分が疑問に思うことをストレートに表現するだけなのだが、その爽快さが他人とは違っていた。そして、何より、新しいことを勉強する意欲にあふれていた。

ディラックゼミが終わると、いつもダラダラと雑談していた。最近勉強していることで気持ちよく理解できないことを話することが多かった。そこでもキヨの役割は大きく、キヨの講義になってしまうこともしばしばだった。

５月のGWの隙間にあったディラックゼミの後の雑談で、ソラが突然聞いてきた。

「熱い湯に水を足すとぬるま湯になるのも量子力学の結果なんですよね？」

薄々と気にしていたことだが、これは踏み込んではいけない問いに思えた。この問いの延長には、例えば、「自然法則を考える自分

物性研究・電子版 Vol. 4, No. 1, 041203（2015年2月号）

を記述する自然法則は何か」という大学１回生のときに誰かが持ち出す定番の問いがある。これは確かに興味深い問いだが、途方もない。問題の難しさの程度すら分からない。何から勉強すればいいのか分からないので、当面は先延ばしするしかないという類のものだ。

「ぬるま湯になる」のは、そこまで極端ではないが、同じ香りがする。よく知っている現象（ぬるま湯になるとか、自然法則を考える自分がいるとか）を物理の基本法則でかけますか？という問い方をしている点では同じだ。よく知っている現象をわざわざ量子力学で説明する必要はないだろう。量子力学の世界では驚くべき非日常的現象が起こっているのだから、それを理解するのがまず第一だ、という意見が主流だろう。

それでも、１回生に聞かれたので、恰好よく答えてみた。

「せやな。せやけど、記述のレベルがちゃうから、それを示すのは大変やろな。」

「何がどう難しいのですか？」

単純明晰なソラの追撃がきた。僕が何も分かっていないままに知ったかぶりをしたのがばれてしまう。キヨの方を向いて助けを請う。

「なぁ、キヨ..」

キヨは何事もなかったように説明する。

「水と湯をまぜてぬるま湯になる、という変化についての法則は、熱力学第２法則だね。これはマクロな世界に対して現象論として美しく整備されている。熱力学とミクロな力学世界を結ぶのが統計力学。ただ、統計力学は平衡状態に対してのみ有効なので、ぬるま湯になる、という変化は統計力学の守備範囲でない。ぬるま湯になっていく過程は流体力学で記述されるから、流体力学とミクロな力学世界を結ぶことになる。それは勉強不足で知らない。」

キヨが「勉強不足」というとき、キヨの内での絶対評価であることを良く知っている。キヨが勉強した、と宣言する科目についてその理解は完全である。熱力学、統計力学、流体力学はきっと勉強済みなのだろう。僕は、熱力学も統計力学も流体力学もちょうど勉強を始めたばかりで、全然風景が見えないままにのたうっている。でも、お調子ものの僕は、キヨがいったことを自分が最初から分かっていたように続けた。

「せやな。色んな現象を体系的に記述するんが基本法則としたら、基本法則同士の関係を問うことというてええんかな。熱力学や流体力学の基本法則と力学の基本法則を結ぶ問題やから、現象から法則を抜き出す「普通の物理の営み」とはちゃうなぁ。難易度以前に問題のタイプがちゃうわ。」

キヨがいったことを少し言葉を変えていっただけだけど、何となく気持ちが良かった。そうか、そういう問題か、と自分でもそのときに自覚した。ソラはまたまっすぐだった。

「面白いです。熱力学、統計力学、流体力学も勉強します。勉強したらまた聞きますね。」

やばい。ピッチをあげて僕も勉強しよう。熱力学、統計力学、流体力学は本を読んでも中々頭に入ってこない。時間はかかるが、日々勉強だな。

2　秋　怒涛の１週間

2.1　月曜日　パラドクス登場

銀杏並木の風景がすっかり変わる秋。ディラックゼミは順調に進んでいた。セミナー後の雑談で、突然、ソラが聞いてきた。

「半年くらい前に、熱い湯に水を足すとぬるま湯になる話をしたじゃないですか。勉強して考えたら、混乱して分からなくなったので、聞いてもらえますか？」

どうやら、ソラは、解析力学、熱力学、統計力学、流体力学も勉強したらしい。ゼミの様子を見ても一目瞭然だった。素朴な問いをストレートに出すのは変わりないが、発言の雰囲気に「理解している感」が漂っているし、何となくオーラも違う。噂によると、夏休みは物理の勉強漬けだったらしいが、いかにも本当っぽい。いや、多分、真実は逆かもしれない。ソラの様子から、誰かがそういう伝説を作ったのかもしれない。いずれにせよ、変わったのは間違いない。ソラが黒板の前で説明する。

「量子力学はいったん切り離します。水と湯の接触を温度の異なる物質が仕切り壁を介して接触するとします。箱全体は外の世界から孤立化されているとします。熱力学の設定だと、断熱不動壁で囲まれる、ということです。また、分子の運動はハミルトン方程式で記述される、ということです。」

ははは。これ、S先生の統計力学の講義の言い方やな。K大学ではいつ単位をとってもいい。統計力学の講義にはソラを含む数人の1回生が出席している。多くは2回生で履修するし、僕も今年とっている。昨年履修しておけば良かったとも思うが、他のセミナーとかで忙しくて統計力学まで手が回らなかったのだ。

おそらくお互いに了解しているだろうことでも、考える前提条件から丁寧に説明するのが結局問題に素早く到達する。そういうことは、ゼミで学んだ。

「仕切り壁を断熱不動壁とすることで、左右で異なる温度が維持される平衡状態が実現します。透熱不動壁を断熱不動壁のすぐ横にそっと差し込んで、断熱不動壁を抜きます。このとき、熱力学第ゼロ法則により、十分に時間がたてば、左右の部分の温度が等しい状態になります。このとき、熱力学エントロピーは増えるし、時間変化の様子は流体方程式で記述されます。」

うむ。マクロな法則の確認な。そこもシャープに共有しておきたいが、後でいいか。続きを聞こう。

「この時間変化を分子の世界から記述します。左の箱に N 個の粒子が入っているとして、それらの位置と運動量の組で力学状態が記述されるので、

$$\Gamma^{\mathrm{L}} = (\boldsymbol{r}_1^{\mathrm{L}}, \cdots, \boldsymbol{r}_N^{\mathrm{L}}, \boldsymbol{p}_1^{\mathrm{L}}, \cdots, \boldsymbol{p}_N^{\mathrm{L}}) \tag{1}$$

と書きます。右側の箱も同様で、M 個の粒子が入っているとき

$$\Gamma^{\mathrm{R}} = (\boldsymbol{r}_1^{\mathrm{R}}, \cdots, \boldsymbol{r}_M^{\mathrm{R}}, \boldsymbol{p}_1^{\mathrm{R}}, \cdots, \boldsymbol{p}_M^{\mathrm{R}}) \tag{2}$$

と書きます。それぞれの箱のハミルトニアンと相互作用ハミルトンを $H^{\mathrm{L}}(\Gamma^{\mathrm{L}})$, $H^{\mathrm{R}}(\Gamma^{\mathrm{R}})$, $H^{\mathrm{int}}(\Gamma)$ と書きます。全体のハミルトンは

$$H(\Gamma) = H^{\mathrm{L}}(\Gamma^{\mathrm{L}}) + H^{\mathrm{R}}(\Gamma^{\mathrm{R}}) + H^{\mathrm{int}}(\Gamma) \tag{3}$$

になります。簡単のために質量は全て同じで m とします。ハミルトニアンが与えられれば、左側の箱の中の粒子の運動方程式は

$$\begin{aligned} \frac{d\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{L}}}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{r}_i^{\mathrm{L}}} \\ m\frac{d\boldsymbol{r}_i^{\mathrm{L}}}{dt} &= \boldsymbol{p}_i^{\mathrm{L}} \end{aligned} \tag{4}$$

になります。右側の箱の中の粒子の運動方程式も同様です。」

ふむ。ミクロな力学法則の確認な。粒子間の相互作用や粒子と壁との相互作用も全てハミルトニアンで決まると仮定するのは合理的だが、何か今一ピンと来ない。ふむふむ、いっても退屈だし、ちょっと聞いてみる。

「あぁ。ハミルトニアンの具体的な形はどうすんの？」

「それは...」

ソラが聞きたいことにハミルトニアンの形など関係ないのに、横から中断された形になった。そういうところから脱線して楽しくなることもあるが、今のポイントではない。さっと答えて本題に戻りたいところだが、さすがにそういう術はまだ身につけていないようだ。

「２体の短距離相互作用と仮定すればいいよ。その具体的な形は、状況に応じて量子力学にもとづいて近似的に評価されたりするけれど、それはソラが聞きたいことに関係ないんじゃないかな。」

キヨがさっと助け舟を出す。僕の横やりに苛立っている様子もなく、自分の知識を誇っているわけでもなく、当然なことを当然のようにさらっという。そのたびに、僕はキヨの凄さを感じる。「短距離相互作用」って何だろう... と思ったけど、後回しにした。ソラが続ける。

「時刻 0 である力学状態 $\Gamma \in \mathbf{R}^{6(N+M)}$ を与えます。つまり、$N+M$ 個の粒子の位置と運動量の組を与えます。これを初期条件として運動方程式を解きます。時刻 t での力学状態を $\Gamma_t \in \mathbf{R}^{6(N+M)}$ と書いて、Γ と t を与えれば一意に決まります。」

うむ。抽象的な言い方だが、これは力学で慣れている。計算機プログラムを書いて粒子の運動を追跡することを想像すれば視覚的にも分かる。補足した方がいいような気がして声に出した。

「あぁ。運動方程式の解ちゅうのは「動画」やな。プログラム書いて初期条件を入力すると、出力される動画はひとつに決まると。」

ソラが続ける。

「そうですね。それはイメージしやすいですね。それで、ですよ。時刻 0 から時刻 t までの解 $\Gamma_s\ (0 \le s \le t)$ があったとき、その解を逆回ししますね。Γ に対して運動量の符号を反対にしたのを $\Gamma^\dagger$ と書きます。粒子が反対向きに運動していくから、速度が反対になって時間を逆にトレースするから、$\Gamma^\dagger_{t-s}\ (0 \le s \le t)$ が逆回しの様子を示しています。数学的には、s の関数を $\Gamma^\dagger_{t-s}$ として定義しただけですが、$s=0$ のとき時刻 t の力学状態で運動量の符号を反転した $\Gamma^\dagger_t$ になってて、$s=t$ では時刻 0 の力学状態の運動量の符号を反転したものになっています。途中の時刻でもちょうど反対になっています。動画だと思うとまさに逆再生ですね。」

「ところが、です。この逆回しも運動方程式の解になっているのですよ。$\Gamma^\dagger_{t-s}$ が運動方程式を満たすのですよ。」

ソラが黒板に式を書いて確認する。確かにそうだ。逆回しも運動方程式の解になっている。

「あぁ....！熱い湯に水を足してぬるま湯になる解があるなら、それを逆再生したぬるま湯が熱い湯と水に分かれる解もある、ちゅうことか。これは見たことないし、マクロな法則の熱力学や流体力学と矛盾する..。　」

僕が先走っていってしまった。

「そうなんです。それが私が聞きたかったことなんです。おかしくないですか。」

ソラが質問をやっと言い終えたら、キヨがぽつりと

「可逆性のパラドックス」

とつぶやいた。

「１９世紀から議論されているパラドックスというのは読んだことがある。でも、それを解決する考え方は分からない。」

キヨが分からない、というからには大変だ。キヨは決して知ったかぶりはしない。豊富な知識はあるが、単なる物知りとは違う。理解していることと理解していないことを自分の中で区別がついている。理解していないことを表面的に喋ったりはしない。

「あぁ。要するにや、ソラの質問はこんな感じか。水と湯を混ぜるとぬるま湯になる、ちゅう現象は、マクロな世界の基本法則で完全に記述される。その一方で、水を構成する分子の運動方程式で記述すると、自然現象通りの解とその逆回しの解の両方がある。現実

には、片方の解しか見えないないのはどうしてか？」

質問の内容を少しだけ言い換えてみた。ミクロな法則とマクロな法則が矛盾しているわけではない。現実は一つである。分子の世界の解には現実に観測されないのも含んでいるだけだ。しかし、どういうことだろう。全然分からない。

その日の夜、布団に入って奇妙な気分になった。僕たちは生まれて、やがて死ぬ。他人と話をする。これは当たり前のことだ。当たり前のことを不思議に思ったりはしない。量子力学や相対論が描く非日常的な世界に比べてあまりにも慣れ親しんでいる。でも、僕たちの人生自身、宇宙の歴史のひとコマに過ぎない。僕たちが生まれて死ぬ歴史が運動方程式の解としてあるなら、それを逆戻ししたのも解になっているのかもしれない。水と湯だけでない。これは大変なことではないか。興奮して寝付けない。

2.2 火曜日　具体的な問

あくる日の夕方。セミナーはないが、構内をブラブラしていると、ソラ、そして、キヨに会った。不思議なもので、話をしたいと思っていると、ちゃんと会えるようだ。空いている教室にいって、雑談を始めた。

「あぁ。可逆性のパラドクスをもうちょっと具体的に分かりたい。」

と切り出した。午後に図書室にいって、いくつかの本を手にとってみたが、全然ピンとこなかった。ボルツマンの話がどうのこうの、H関数がどうのこうの.. という解説ばかりで、想像していた話と違っていた。少なくとも自分の知りたい話とは違う。昨日の話だと非常に一般的な問題のように思えるのだが。

「ええと。どこから疑えばええ？力学世界の可逆性が素朴すぎて実際は対称でないとか。素粒子の世界では成り立っていない、ちゅう話もどこかで見たことあるし。」

キヨがすぐに冷静に応答する。

「それは関係ないだろうね。分子の運動が古典力学からずれていても、それはごくごく僅かだろうし、その寄与が実際に確かにみえる不可逆な現象につながるのは不自然じゃないかな。それに、可逆な古典力学が不可逆な現象を記述するのは数値実験でも確かめることができるはずだ。」

前半は何をいっているのかよくは分からなかったが、後半は納得した。

「せやな。ほな、実際に数値実験すること考えよか。最初に、異なる温度の物質を断熱壁で仕切って平衡状態をつくるところから。ええと、あれ、断熱壁って何だっけ？」

断熱壁は断熱壁で、そこやあそこにある。日常会話でも出てくるが、実は科学としてきちんと定義されている概念を正しく理解するのは却って難しい。つい分かっていると勘違いしてしまうから。しかし、これは熱力学で勉強したことを思い出せばよい。「あるものが何かというのは、実験によってその判定が可能となる手続きが与えられていること」と強調されていた。それに従うと、断熱壁とは、異なる温度差を維持できる理想的な壁のことだった。力学世界でこの状況を表現するなら、仕切り壁の両側でエネルギーのやりとりを禁止する壁をデザインすればよい。キヨがすぐにきちんと説明する。

「粒子にとって壁は１体ポテンシャルとして表現できるから、理想的な設定をしたいなら、真空中でそれぞれの箱に相当する１体ポテンシャルで粒子を閉じ込めて、単に二つの箱を相互作用長より離しておけばいいだろう。独立な二つの孤立系をただ並べただけといってもいい。そして、統計力学に従って、平衡状態にある力学状態は、確率で作ればよい。

今の場合、

$$P_0(\Gamma) = e^{\beta^{\mathrm{L}}(F^{\mathrm{L}}(\beta^{\mathrm{L}})-H^{\mathrm{L}}(\Gamma^{\mathrm{L}}))+\beta^{\mathrm{R}}(F^{\mathrm{R}}(\beta^{\mathrm{R}})-H^{\mathrm{R}}(\Gamma^{\mathrm{R}}))} \tag{5}$$

という確率密度に従って、時刻 0 での Γ を選ぶと、左右の逆温度が $\beta^{\mathrm{L}}, \beta^{\mathrm{R}}$ となる平衡状態になっている。」

キヨが黒板に確率密度の式を書く。

「せやな。これで運動方程式の初期条件 Γ を選べばええ。断熱仕切り壁から透熱仕切り壁にさっと入れ替える、ちゅうのは、箱をくっつけるんでええんやない。$t > 0$ では、異なる箱の間の粒子間に相互作用の入った運動方程式を解くと。例えば、数値実験やと、初期条件をつくる部分と相互作用の入った運動方程式を解く部分を別々に用意すればええ。」

僕は相互作用する 3 個の粒子を 2 次元の箱に閉じ込めた場合の運動方程式を数値的に解いたことがある。動画を作って楽しんだだけだが。ソラが続ける。

「イメージがわきますね。異なる箱の粒子が相互作用しているから、エネルギーのやりとりがあって、段々、温度が等しい平衡状態に向かうのですね。「温度」という概念は力学では定義されていないですが、エネルギー配分の状態数が最大になる平衡状態に向かう、といえばいいでしょうか。数値実験でそうなっていることを確かめることはできそうですよね。それで、十分に時間がたった時刻 t の力学状態を Γ_t と書くと、昨日の議論を繰り返して、その逆回しも解になることが分かります。そうすると、確かに、温度が一様な平衡状態から出発して、元に戻る様子を記述する運動方程式の解はありますよ。これが、可逆性のパラドクスで....」

説明を聞くと僕は混乱した。

「あぁ。時間がたった後の平衡状態ってどういう意味？初期条件が独立な二つの系の平衡状態にあるのは統計力学の仮説によって認めるとしても、接触して十分時間がたったあとで平衡状態にある、っちゅうのは、何やろ。」

言葉の定義にこだわるのは理解力の悪いせいでもあるが、理解していないままに議論すると気持ち悪い。

「統計力学の基本仮説とは、等重率の原理ですよね？Γ_t が平衡状態にあるとは、Γ_t が示す熱力学的性質が等重率の原理によってサンプルされた力学状態の示す熱力学的性質と同じ、ということで....」

これは難しい。確か田崎さんの教科書でそういうことが議論されていたけれど、完全にすっきりしなかった。S 先生の講義でも説明があったけれど、ふわっとした感じが残った。

「あぁ。それな。式書いて分かるんか？Γ_t は初期条件と時間発展則によって決まるから、それが示す熱力学的性質は原理的には決まってる。せやけど、力学の初期条件は確率で選ばれるから、Γ_t も確率的に定まるんで....」

こうなるとキヨの出番だ。

「統計力学では、大数の法則が決定的な役割を果たす。巨視的な熱力学量の値はほとんど確実に期待値をとる、と考える。力学状態の選択は確率的だが、どれが選ばれても大概の場合は大丈夫ということを前提にしている。今の場合、運動方程式の時間変化が関わっているから、自明ではないけれど、大数の法則がずっと成立する、と仮定するのはそんなに変ではないように思う。だから、どんな Γ_t を見ても、ほとんど確実に熱力学的性質を再現して、平衡状態にあるといってもいいと思う。証明はともかく。」

なるほど。すっきりすることで、さらに混乱が増してきた。

「あぁ。せやったら、パラドックスあるやんか。気持ち悪う。何か、十分時間がたったあとの平衡状態と最初に用意する平衡状態が同じ気がせんのやけど。あ、でも、ええと、運動方程式の時間発展の結果で平衡状態に緩和

することは...、数値実験だと良さそうなのか。式書いて示したいが...。」

混乱して何を喋っているのか自分でも分からない。ともかく、問題を具体的に理解したい、という今日の目標は達成できた気がする。

「でも、面白くないですか。式を書いてみます！」

ソラが元気にいう。こりゃいかん。僕もやりたい。

「俺も書いてみるわ。」

とりあえず宣言した。キヨは黙って黒板を見ている。先を見通しているような雰囲気は漂っているが、黙っているうちはパスが通っていないのだろう。僕はこのまま黒板見ても進展する気はしない。具体的な設定は分かったので、家に帰って、ゆっくりと式で書いてみよう。

2.3 火曜日の夜 — Γ_t の分布

４畳半の部屋に小さい炬燵机がある。それが僕の勉強机だ。夕方の話をゆっくりと紙に書いていく。まず、Γ を確率分布 $P_0(\Gamma)$ に従って選ぶ。これは問題ない。統計力学と違って、$P_0(\Gamma)$ は左側と右側で温度が違っている。問題は Γ_t だ。紙に $\Gamma \to \Gamma_t$ と書く。運動方程式の解として決まる、というのがきついよな。数値実験で様子が分かるとしても、式としては何もわからない。うーんんと天井を眺める。僕は寝っ転がるのが好きなので、手が止まるとすぐ横になる。「待てよ。そもそも Γ だってどんな様子になっているのか分からないじゃないか。$P_0(\Gamma)$ という分布は統計力学でなんとなく分かっているけれど、その確率分布から選ばれた力学状態そのものについては知らない。じゃ、Γ_t でなくて Γ_t の分布はどうなっている？これは良い問いに思えた。

その分布を $P_t(\Gamma_t)$ と書こう。与えられた設定で時刻 t での力学状態 Γ の分布関数とみるなら $P_t(\Gamma)$ と書いても良い。関数の引数だからな。ようするに、初期分布にしたがって初期の力学状態をたくさん用意してそれらをそれぞれ時間発展して力学状態の頻度を見たのが P_t だ。Γ_t は P_t にしたがってサンプルされた典型的な力学状態と考えればいいだろう。そうすると時間が十分にたってある平衡状態になるとは、ある β があって、

$$P_t(\Gamma) \to e^{\beta(F(\beta)-H(\Gamma))} \tag{6}$$

ということだろうか？これは式で書けているから、YES or NO がはっきりしている。

$P_0(\Gamma)$ は最初に与えた分布で、それにもとづいて時刻 t の分布を求めればいいのか。分布に対する微分方程式を作って解けばいいのかな。まずは微分方程式を作ってみるか。みるか。みるか。てとら。ゆーり。あ、いかん。ひとりでやっていると変なこと喋ってしまう。

微分方程式の鉄則で $P_{t+\Delta t}$ を P_t と関係づければいい。うーん。また寝っ転がる。うーんん。うたた寝をして、目が覚めたら何となく分かった。時刻 t の力学状態と時刻 $t+\Delta t$ の力学状態は運動方程式でつながっていて、その分布の関係だから、

$$P_{t+\Delta t}(\Gamma_{\Delta t}) = P_t(\Gamma) \tag{7}$$

か？あ、いかん。ヤコビアン忘れている。

$$P_{t+\Delta t}(\Gamma_{\Delta t})d\Gamma_{\Delta t} = P_t(\Gamma)d\Gamma \tag{8}$$

だから、

$$P_{t+\Delta t}(\Gamma) = P_t(\Gamma_{-\Delta t})\left|\frac{\partial\Gamma_{-\Delta t}}{\partial\Gamma}\right| \tag{9}$$

かな。運動方程式を

$$\frac{d\Gamma_t}{dt} = \Phi(\Gamma_t) \tag{10}$$

と書いておくと、$O((\Delta t)^2)$ の寄与を無視して、

$$P_{t+\Delta t}(\Gamma) = P_t(\Gamma - \Delta t\Phi(\Gamma))\left|\frac{\partial\Gamma_{-\Delta t}}{\partial\Gamma}\right| \tag{11}$$

物性研究・電子版 Vol. 4, No. 1, 041203〈2015年2月号〉

及び、行列 A に対して、$\det A = \exp \mathrm{Tr} \log A$ を思い出して、

$$\left|\frac{\partial \Gamma_{-\Delta t}}{\partial \Gamma}\right| = 1 - \frac{\partial \Phi}{\partial \Gamma}\Delta t \tag{12}$$

となるから、

$$\begin{aligned} & P_{t+\Delta t}(\Gamma) - P_t(\Gamma) \\ = \; & -P_t(\Gamma)\frac{\partial \Phi}{\partial \Gamma}\Delta t \\ & -\Phi(\Gamma)\frac{\partial}{\partial \Gamma}P_t(\Gamma)\Delta t \\ & +O((\Delta t)^2). \end{aligned} \tag{13}$$

を得る。すると、Γ の関数 $\varphi(\Gamma)$ に作用する演算子 $\mathcal{L}$ を

$$\mathcal{L}\varphi = -\frac{\partial}{\partial \Gamma}\left(\Phi(\Gamma)\varphi(\Gamma)\right) \tag{14}$$

と定義して、

$$\partial_t P_t(\Gamma) = \mathcal{L}P_t(\Gamma) \tag{15}$$

という線形の微分方程式を導くことができる。めでたい...か？うーん。だからどうした？

線形の微分方程式だから演算子 $\mathcal{L}$ の性質が全てか。量子力学と似ているけど、これエルミートでないし、作用する空間は「確率分布のあつまり」なので、量子力学とは随分違いそうだ。その数学的な性質は今の僕には手も足もでない。どうしようもない問題なのか。それにこのあたりでウロウロしていると大数の法則との関係とか全くわからんなぁ。明日.....キヨに聞こう。

2.4 水曜日前半　平衡化 I

次の日の朝。目が覚めると、自動的に昨夜のことを反芻していた。Γ_t でなくて、P_t を考えるのは悪くない。でもその微分方程式を考えるのは多分違う。方程式でなくて P_t を考えることができるのか...。

今日も、ソラ、そして、キヨに会った。空いている教室にいって、雑談を始めた。僕が口火を切った。

「ええと、初期分布 P から選んだ Γ の時間発展 Γ_t が従う分布 P_t を考えて、それが統計力学の平衡分布になるかどうか、ちゅうんが最初の問題やろな。それを議論するために P_t に対する時間発展方程式を出したんで、まずそれから。」

昨夜に導いた方程式を黒板で説明する。

キヨは全て自明かのように、淡々と応える。

「Liouville 方程式だね。でも、それだけだと余りにも一般的で何も分からないと思う。」

名前があるのか。そして、全くその通りなんだが...。

「あぁ、いや、その通りで、線形方程式だから、演算子の性質が全てやし、この演算子は量子力学で馴染みつつあるのとも全然違うし、途方もないオーラが漂っていて、何か考える糸口あるんか？」

何とか息も絶え絶えつないだ感じがした。

「もう少しいけるよ。」

キヨが黒板の前に立つ。

「ハミルトンの運動方程式だと

$$\frac{\partial \Phi(\Gamma)}{\partial \Gamma} = 0 \tag{16}$$

が成り立つよね。相空間上のベクトル場の発散ね。」

ふむ。確かに。キヨが続ける。

「だから、Φ は Γ 微分の外に出してもよい。

$$\partial_t P_t(\Gamma) = -\Phi(\Gamma)\frac{\partial}{\partial \Gamma}P_t(\Gamma) \tag{17}$$

これはつまり

$$\frac{dP_t(\Gamma_t)}{dt} = 0 \tag{18}$$

だよね。」

「おぉ。代入したら確かに成り立つわ。それに、これはあれや、流体力学で出てきたLagrange微分…。」

「そう。これから

$$P_t(\Gamma_t) = P_0(\Gamma) \tag{19}$$

が分かる。勿論、$P_t(\Gamma) = P_0(\Gamma_{-t})$ と書いてもよい。ここで、定義からいつでも成り立つ式

$$P_t(\Gamma_t) d\Gamma_t = P_0(\Gamma) d\Gamma \tag{20}$$

と比べると、

$$\left|\frac{\partial \Gamma_t}{\partial \Gamma}\right| = 1 \tag{21}$$

ということを意味している。Liouvilleの定理だね。解析力学でやったよね。」

「あぁ、すっかり忘れてた。やった。やった。ええと、時間発展が正準変換で書けることから分かることやったっけ。」

「そう。正準変換を持ち出す証明でなくても、ハミルトン方程式から直接導くこともできる。分布を使った今の議論も別証明になっているとは思うけど。」

そうか。解析力学のそのあたりは、色々な表現をその場その場でおっかけている感じで、今一全体を把握してないんだよな。

ソラは黙っているが、自分のノートを見て確認しているようだ。Liouvilleの定理がそこにあるのは間違いない。どうやら、それに到達しなかったのは僕だけだったようだ。

「そして、P から始まる P_t の時間発展で平衡分布に到達するかどうかだけなら、Liouvilleの定理だけで議論できる。実は、平衡分布にいかないことがすぐに分かる。」

なんだと〜！そこまでいっているのか。そして、それに引き続くソラの言葉に、僕は衝撃を受けた。

「私に説明させてください。」

ソラが黒板の前に出る。えっ。

「一般に相空間の確率分布 $Q(\Gamma)$ に対して、シャノンエントロピー $S(Q)$ を

$$S(Q) \equiv -\int d\Gamma Q(\Gamma) \log Q(\Gamma) \tag{22}$$

で定義します。このとき、

$$\begin{aligned} S(P_t) &= -\int d\Gamma_t P_t(\Gamma_t) \log P_t(\Gamma_t) \\ &= -\int d\Gamma P_0(\Gamma) \log P_t(\Gamma_t) \\ &= -\int d\Gamma P_0(\Gamma) \log P_0(\Gamma) \\ &= S(P) \end{aligned} \tag{23}$$

です。1行目から2行目は P_t の定義から、2行目から3行目で $P_t(\Gamma_t) = P_0(\Gamma)$ を使いました。つまり、$S(P_t)$ は時間 t に依存しません。」

「おお。確かに成り立ってる。綺麗やな。」

「ところで、Q に平衡分布を代入すると、$S(Q)$ は熱力学エントロピーと一致するので、$S(P)$ は異なる温度の系が断熱壁で接する平衡状態の熱力学エントロピーです。そして、もし P_t が平衡分布になるなら、$S(P_t)$ もその平衡状態の熱力学エントロピーになります。$S(P_t) = S(P)$ ということは、最初と最後の熱力学エントロピーが一致することになります。熱接触での平衡状態間遷移では、熱力学エントロピーは絶対に増えるはずです。従って、P_t は決して平衡分布にならない、ということが分かります。」

これは極めて大事なことのような気がする。あれ待てよ。今、喋ったのはソラだよな。ついこの前まで、僕が教えていた気がするのだが、あっという間に前にでたのか..。あ、いや、それはともかく、何だって..。

「ええと、例えばや、相互作用する頻度が非常に小さい系、つまり、理想気体に近い気体の場合やと…左と右でエネルギー交換がランダムにおこると、全エネルギーが一定で左右の区別がなくなるから、最終的な温度は最初の温度の相加平均や。そうすると、熱力学

エントロピーは確実に増えているはずやから、矛盾する.. ちゅうことか。」

今日の僕には思いもしなかった展開だ。つまり、P_t は時間がたっても平衡分布にいかないにも関わらず、系は平衡状態に向かうと考えてもいいわけ？

「あぁ、わけが分からんようになってきた。平衡状態って何やった？これ昨日も確認したんやったな。えええと、系が平衡状態にあるとは、目前にある力学状態、今の場合 Γ_t、の示す熱力学的性質が、等重率の原理に従ってサンプルされた力学状態の示す熱力学的性質と同じ...。」

昨日の話をもう一度声に出す。声に出すのは悪いことじゃない。キヨが静かに補足する。

「orthodic アンサンブル。熱力学と矛盾しない正当なアンサンブルの族、という考え方をボルツマンが考えていた、ということを Gallavotti の統計力学の教科書に書いてあった。ミクロカノニカルやカノニカルなどは、その例に過ぎない。今の場合、十分に時間がたったときの分布 P_t も熱力学と矛盾しないし、同じ熱力学を再現する何かのカノニカル分布と等価なのだろうけど、決して、カノニカル分布そのものではない。」

Gallavotti の統計力学の教科書?しかし、キヨは良く知っているなぁ。ともかく、昨日の会話のイメージを思い出してきた。昨日の夕方は、可逆性のパラドクスについてゆっくり考えていて、P_t が平衡分布とは違う気分でいたのに、昨夜、紙に式を書いているうちにその気分を忘れて平衡分布になることが目標になってしまっていた。昨日の気分と目前の式が統合されてきた。

「あぁ、そうか。そうか。P_t が平衡分布に向かわへんからこそ、可逆性と矛盾せんのか?例えば、時刻 t まで時間発展して、そこで速度を反転して得られる力学状態の確率密度を $P_t^\dagger$ と書くと、十分時間がたったとき、$P_t^\dagger$ でサンプルされた状態は、平衡状態と考えてええやろうけど、そこから時間を t だけ進ませると、異なる温度の平衡状態に戻る。P_t が平衡分布だとすると矛盾するけど、そうでない、と分かったんやから、パラドックスは消えた... と思えばええんか？」

浮かれた僕の発言をキヨが冷静に戒める。

「十分時間がたったとき P_t からサンプルした状態が本当に平衡状態になっているかどうか、まだ分かっていない。つまり、高温物質と低温物質を接触させたら、エネルギーは高温から低温に流れる、という熱力学第２法則を力学の立場からどのように理解するのか、さらには、高温と低温と接触した場合に十分に時間がたつと温度が等しい状態になる、という熱力学第０法則を力学の立場からどう理解するのか。仕事をして云々を考えない今の問題では、第０法則が理解できれば第２法則の側面は含まれている。だから、当面、熱力学第０法則を力学から理解しないといけない。」

「あぁ。確かに、ちょっと先走りすぎやな。十分時間がたった後の P_t がどんなもんか、ちゅうのが大事やな。$S(P_t) = S(P)$ でありながら、熱力学法則とは矛盾せん... と。」

力学の理解が深まるにつれ、熱力学がますます不思議になるわけか。結局、P_t が分からないとどうにもならない気がする。

「ふーん。結局、Liouville 方程式を解いて、P_t を議論するしかないんやないの？」

なんとなく挑発的な調子になった。Liouville の定理で分かったことはあるけど、それだけじゃダメだろう、というキヨとソラの結果に対する対抗心のようなものがあった。そこで皆が沈黙した。今日はここまでかな...。

2.5　水曜日後半　平衡化 II

休憩して自動販売機でお茶を買ってきた。淀んでしまったときは、気分を変えるのがいい。相対論における同時刻の定義についてひとしきり話をしてひと区切りがついたとき、ソラがぼそっといった。

「温度の時間変化を追跡できないでしょうか。」

は？温度の時間変化？何をいい始めた？僕は脊髄反射で

「はぁ？温度って平衡状態を特徴づける量やから、時間変化する力学状態では定義されへんやろ？」

と答えてしまった。キヨがソラの問いをきちんとフォローした。

「それはそうだけど、例えば、流体方程式だって、温度は時空間変化するよね。それは、流体記述における時空の各点では熱力学が成立すると考える、という局所平衡の仮定からきている。同じように、右側の箱と左側の箱がそれぞれ十分に熱力学が成立するような状況があってもいいと思う。具体的には、左右の粒子の相互作用頻度がすごく小さい場合とかだと、それぞれの箱では熱力学が成立しつつ、その温度が時間変化している記述、というのはありえると思う。このときの P_t を具体的に見ると、可逆性のパラドクスの核心が分かる気がする。」

なるほど。確かに。説得力がある。何となくいっていることは分かる。でも同意するのは悔しいので、とりあえずネガティブな方からいってみた。

「せやけど、具体的にはどうするの？P_t の時間変化は難しくて分からへんのに、温度の時間変化なんてどうやって議論すんの？」

これにはソラがすぐに素直な案を出した。

「時間依存する温度を力学から決めたらどうでしょうか？例えば、1自由度あたりの運動エネルギーから決めるとか。」

温度の問題は最近考えたので、負けじと反対する。

「いやいやいや。平衡状態のときは、それが温度になることは統計力学から分かるけど、それやと、平衡分布からサンプルしたのと全然違う変な配置でも温度が定義されてしまうやろ。運動エネルギーは運動エネルギーであって、無条件でそれを敢えて温度と言い換える意味はないやろ。あくまで、平衡状態の場合には、温度が運動エネルギーと関係づいた、と考えるべきやな。」

そういったところで何のプラスにもならない一般的な注釈だが、とりあえず口に出した。生産的でないコメントにキヨがうまく継いでくれた。

「平衡分布の場合には、統計力学に従って、明確に温度が定義されるのはいいよね。平衡分布からずれる場合でも、そのずれが小さいときは、平衡分布の温度を拡張して使うと考えればいいんじゃないかな。今の場合、左右のそれぞれの箱では平衡分布に近いと思っていいんじゃないかな。」

ほう、と思ったが、疲れていたのか、全てにいちゃもんをつけたい気分になっていた。

「せやけど、近いって何や？何に比べてどれくらい近いん？本当に近いん？」

分布の近さの定義を問うようなまたしても一般的な注釈を声に出してしまった。もはややけくそに近いかもしれない。しかし、定義は何にせよ、近い、というのは主張なのだから YES or NO がはっきりする。だから、それを問うのは悪くない。それに「小さい」というときは、比べるものがちゃんとあって、必要に応じてその小ささの程度を指定できるときに使う。揚げ足取りのようだが、そんなに酷い問いではない。そして相変わらずキヨは

完璧だ。

「まじめにいえば、近いというのは、それぞれの箱での平衡分布と真の分布の差、例えば、各相空間点での分布の差の絶対値の相空間全体での積分とか、が1よりずっと小さいということだろうけど、まぁ、小さい無次元パラメータ ϵ があって、分布がそれで展開できればいいんだと思う。今の問題だと、無次元化した逆温度差

$$\epsilon \equiv \frac{\beta^{\mathrm{L}} - \beta^{\mathrm{R}}}{\bar{\beta}} \tag{24}$$

を小さいとするのでよいと思う。無次元化するための参照温度 $\bar{\beta}$ は何でもいいだろうけど、見た目が綺麗な

$$\bar{\beta} \equiv \frac{\beta^{\mathrm{L}} + \beta^{\mathrm{R}}}{2} \tag{25}$$

と定義すれはいいだろう。例えば、20 ℃と 40 ℃の物体を接触させる場合だと、$\epsilon = 0.066$ になるから小さいと思える。それで、このパラメータで分布 P_t を展開できるかどうか、つまり、

$$P_t(\Gamma) = P_t^{(0)}(\Gamma) + \epsilon P_t^{(1)}(\Gamma) + \cdots \tag{26}$$

と書いて、$P_t^{(0)}$ として左右の箱で温度が異なる平衡分布をとれればいいんじゃないかな。」

摂動論って、量子力学でちょこっとやったくらいで、具体的に計算した経験があまりない。大変そうなイメージがあって、しかも、全然面白そうでない。でもまぁ、いっていることは分かる。分かるが...色々と腑に落ちない。

「せやけど、$P_t^{(0)}$ としてそういうのが選べたとして、温度の時間変化はどうやって決まるの?マクロな法則をカンニングするのは反則やろ。ミクロな立場で微妙な問題を考えるんやから、そこをカンニングしたら意味ないし...。うーん。それにその ϵ で展開するなら $P_t^{(0)}$ としては逆温度 $\bar{\beta}$ の平衡分布でええんちゃうの?あれ、何がしたかったんや？分布を求めたいんか、時間変化する温度を求めたいんか。うん、あぁ、セルフコンシステントに決めればええんか？」

喋りながら、僕が全く分かっていないことは分かってきた。分かっていないことが分かると、なんか誇らしげになって得意気な表情になる。悪い癖だが。突然、ソラが入り込んできた。

「あのぅ。関係ないかもしれないですが、力学演習で調和振動子の摂動問題をやったんですよ。２変数の微分方程式の摂動解を構成する話で凄く面白かったです。ポアンカレーやボゴリューボフたちが開発した特異摂動法と呼ばれる方法らしいんですが、それ、今の話に関係ないですか？」

何。特異摂動だと..。その言葉は聞いたことはあるが、何物なのか全く知らない。ソラは果てしなく進化している。

「例えば、調和振動子に散逸と非線形性が摂動的に加わった van der Pol 方程式を考えるとしますね、調和振動子の解を未摂動解として摂動展開すると、補正項が時間とともに発散するんですよ。それで、そういうのが出ないように摂動展開を組み直すんです。特に、ボゴリューボフたちの方法だと未摂動状態の振幅が時間依存するようになり、その時間発展方程式とその変形した未摂動状態からの小さなずれを同時に系統的に計算できるのですよ。ね、似ていると思いません？」

僕は血の気が引いた。

「あああ。似ている..て、同じやないか。いや、落ち着け。落ち着いてないのは俺か。$P_t^{(0)}$ として逆温度 $\bar{\beta}$ の平衡分布をとったら、$P_t^{(1)}$ が時間とともに発散する、ちゅうことか?$P_t^{(0)}$ として時間依存する温度をいれると、その時間変化とずれ $P_t^{(1)}$ の両方がちゃんと求まるんか？ほんまか。全然分からんが、そのボゴリューボフの方法とやらを勉強せなあかん。」

僕が浮かれていてもキヨはやっぱり冷静だ。

「そうか、特異摂動か...。結果として同じことかもしれないけれど、特異摂動とかいわなくても、未摂動状態のそれぞれの箱の温度は、それぞれの箱のエネルギーから逆算して決めればいいだろうし、摂動分は $P_t(\Gamma) = P_0(\Gamma_{-t})$ からちゃんと決まると思うけどね。」

なるほどそれはそれで何となく分かる気がする。式を具体的に書いてみよう。それにどっちにしろ特異摂動も勉強しよう。

2.6 水曜日の夜　相互作用の扱い

自分の部屋に帰って、まず特異摂動の勉強をした。文献をざっと見て、最初の簡単な例題については、計算を追った。ソラが話してた非線形振動の扱い方も式の上では分かった。しかし、腑に落ちた感じは全くしないので、理解しているとはいえず、特異摂動を今日考えるのは無理だ。それはそれでおいといて、まずは、キヨが最後にいった方針で進んでみよう。

設定での初期分布は

$$P_0(\Gamma) = e^{\beta^{\mathrm{L}}(F^{\mathrm{L}}(\beta^{\mathrm{L}})-H^{\mathrm{L}}(\Gamma^{\mathrm{L}}))+\beta^{\mathrm{R}}(F^{\mathrm{R}}(\beta^{\mathrm{R}})-H^{\mathrm{R}}(\Gamma^{\mathrm{R}}))} \tag{27}$$

だった。Liouville の定理より、時間 t での分布 $P_t(\Gamma)$ が $P_t(\Gamma) = P_0(\Gamma_{-t})$ と書けることは分かっている。参照とする分布 $P^{(0)}$ として、時間に依存する温度 $\beta_t^{\mathrm{L}}, \beta_t^{\mathrm{R}}$ を使って

$$P_t^{(0)}(\Gamma) = e^{\beta_t^{\mathrm{L}}(F^{\mathrm{L}}(\beta_t^{\mathrm{L}})-H^{\mathrm{L}}(\Gamma^{\mathrm{L}}))+\beta_t^{\mathrm{R}}(F^{\mathrm{R}}(\beta_t^{\mathrm{R}})-H^{\mathrm{R}}(\Gamma^{\mathrm{R}}))} \tag{28}$$

を考えるのかな。

あっと、左右の箱の粒子の相互作用 $H^{\mathrm{int}}(\Gamma)$ がある。その寄与は接触面近くだけしかなく、典型的な配置ではバルクのエネルギーに比べて圧倒的に小さいので、無視っていい。これは平衡統計力学で繰り返し使う論法だ。でも、これがあってこそエネルギーを交換するのだから、無視はまずいな。それに、箱のエネルギーの変化については

$$\frac{dH^{\mathrm{L}}(\Gamma_t)}{dt} + \frac{dH^{\mathrm{R}}(\Gamma_t)}{dt} \neq 0 \tag{29}$$

だから、右から左へ流れるエネルギーの変化率を考えるときも相互作用の寄与がないと綺麗にならないなぁ。箱のエネルギーの定義から問題なのか...。

漠然と分かった気になっていることでも、きちんと式に書いて確実に確認しないと、実際は見えていないことがよくある。おそらくそれぞれの箱のエネルギーの定義は、知りたい問題の全体からすれば小さいことだろう。しかし、こういう細部を考えることができないと、知りたいことには絶対に届かない。それは分かっているが、疲れているのかそのまま寝てしまった。

2.7 木曜日昼　落とし穴

次の日の昼休み、キヨとすれちがった。すれちがいざまに、

「あぁ。昨日の話やけど、相互作用エネルギーどうやんの？」

と聞いた。

「半分づつ入れておいたら綺麗になるよ。」

へぇ、そうなのか。さすがにキヨは計算すすめているようだ。

「じゃ、16:30 にいつもの部屋で。」

キヨは講義に向かったが、僕は図書室でノートを広げて計算を続けた。

$$\begin{aligned}\tilde{H}^{\mathrm{L}}(\Gamma) &\equiv H^{\mathrm{L}}(\Gamma^{\mathrm{L}}) + \frac{1}{2}H^{\mathrm{int}}(\Gamma) \\ \tilde{H}^{\mathrm{R}}(\Gamma) &\equiv H^{\mathrm{R}}(\Gamma^{\mathrm{R}}) + \frac{1}{2}H^{\mathrm{int}}(\Gamma)\end{aligned} \tag{30}$$

を定義するのか。なるほど、そうすると、

$$\frac{d\tilde{H}^{\mathrm{L}}(\Gamma_t)}{dt} = J(\Gamma_t) \tag{31}$$

によって、左箱のエネルギー増加率 J を定義する。$\tilde{H}^{\mathrm{L}}+\tilde{H}^{\mathrm{R}}$ は時間に依存しないので、

$$\frac{d\tilde{H}^{\mathrm{R}}(\Gamma_t)}{dt}=-J(\Gamma_t) \tag{32}$$

が成り立つから、J は右箱のエネルギーの減少率にもなっており、まさしく、J は右箱から左箱へのエネルギー移動率と考えてよい。

具体的に計算しておこう。左右の粒子の相互作用ポテンシャルが $V^{\mathrm{int}}(|\boldsymbol{r}_i^{\mathrm{L}}-\boldsymbol{r}_j^{\mathrm{R}}|)$ で表されているとすると

$$J=-\sum_{ij}\frac{\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{L}}+\boldsymbol{p}_j^{\mathrm{R}}}{2m}\frac{\partial V^{\mathrm{int}}(|\boldsymbol{r}_i^{\mathrm{L}}-\boldsymbol{r}_j^{\mathrm{R}}|)}{\partial \boldsymbol{r}_i^{\mathrm{L}}} \tag{33}$$

となった。当然だが、相互作用だけで決まっている。何となくエネルギー移動っぽい式になっているからいいのだろう。

それで、それぞれの箱で別の温度が定義されている状態に対応する分布 $P_t^{(0)}$ は、

$$P_t^{(0)}(\Gamma)=e^{-\Psi(\beta_t^{\mathrm{L}},\beta_t^{\mathrm{R}})-[\beta_t^{\mathrm{L}}\tilde{H}^{\mathrm{L}}(\Gamma)+\beta_t^{\mathrm{R}}\tilde{H}^{\mathrm{R}}(\Gamma)]} \tag{34}$$

かな。統計力学のように、規格化因子の定数を指数関数の肩にまとめてひとつの定数として書くのがいいような気がする。Ψ は平衡状態 $\beta^{\mathrm{L}}=\beta^{\mathrm{R}}$ だと熱力学関数になる。確か久保演習書に名前があった。

$P_t^{(0)}$ の t 依存性は、$\beta_t\equiv(\beta_t^{\mathrm{L}},\beta_t^{\mathrm{R}})$ のみを通じて入るので、$P_t^{(0)}$ を $P_{\beta_t}^{\mathrm{LC}}$ と書いておくのが便利にみえる。それぞれの箱でカノニカル分布だから、局所カノニカル分布という名前をつけて、そこから記号LCをつけた。昨日、キヨがいっていたのは、β_t^{L}、β_t^{R} をそれぞれの箱の期待値から決めればいい、ということで、つまりは、局所カノニカル分布によるエネルギー期待値が正しい期待値となるように、β_t を決めるということか。式で書こう。$P_{\beta_t}^{\mathrm{LC}}$ による期待値を $\langle\ \rangle_{\beta_t}^{\mathrm{LC}}$, P_t による期待値を $\langle\ \rangle_t$ と書くと、

$$\langle\tilde{H}^{\mathrm{L}}\rangle_t = \langle\tilde{H}^{\mathrm{L}}\rangle_{\beta_t}^{\mathrm{LC}}, \tag{35}$$

$$\langle\tilde{H}^{\mathrm{R}}\rangle_t = \langle\tilde{H}^{\mathrm{R}}\rangle_{\beta_t}^{\mathrm{LC}} \tag{36}$$

が時間に依存する温度の決定条件になる。確かにこれは「温度」の条件として変でない気がする。エネルギー期待値

$$E_t^{\mathrm{L}} \equiv \langle\tilde{H}^{\mathrm{L}}\rangle_t, \tag{37}$$

$$E_t^{\mathrm{R}} \equiv \langle\tilde{H}^{\mathrm{R}}\rangle_t \tag{38}$$

を見るときは、その温度のカノニカル分布で見ているのと同じだ。本当にちゃんと定義できているのか、つまり、エネルギー期待値を指定したとき、その決定条件を使ってそれぞれの箱の温度が一意に決まるのか、というのは気になる。

まぁでも、それはおいといて、先にすすもう。エネルギー配分と温度の組が１：１に対応するなら、温度の時間変化はエネルギーの時間変化で決まる。エネルギー移動率の期待値 $I_t\equiv\langle J\rangle_t$ が分かればいい。念のため式を書いておくと

$$\frac{dE_t^{\mathrm{L}}}{dt}=I_t \tag{39}$$

だ。真の分布は局所カノニカル分布に近いと考えているので、$P_{\beta_t}^{\mathrm{LC}}$ による期待値を考えればよい気がする。つまり、

$$I_t^{(0)}\equiv\int d\Gamma P_{\beta_t}^{\mathrm{LC}}(\Gamma)J(\Gamma) \tag{40}$$

とすると、これは β_t が決まれば決まる。この依存性を求めれば β_t の時間発展が具体的に分かる。

おぉ。なんか無茶調子いい。大体、こうやってトントン拍子で進むときは大きな落とし穴が待っている。だから油断するなよ、と表面的には思いながらも、内心では、もう答えが見えた気がしていた。16:30 に間に合う。あとは何とかして $I_t^{(0)}$ を計算するだけ。といっても、こんなの計算できるのかな。$J(\Gamma)$ の具体的な表式を見てもすぐに積分できる感じがしない。一般論では無理か..。ここまでかな....。

図書室でうたた寝をしていた。計算がいきづまると、すぐにうたた寝をしてしまう。おかしな夢を見た気がするけれど、それが何だった

か思い出せない。でも、目が覚めたとき、Liouville の定理、というフレーズが浮かんだ。何気なしに Liouville の定理 $d\Gamma_t = d\Gamma$ を書いていると見えた。それを使うと、

$$\frac{d}{dt}\int d\Gamma P_\beta^{\mathrm{LC}}(\Gamma_t)\bigg|_{t=0} = 0 \tag{41}$$

が成り立つ。ってことは、任意の β について

$$(\beta^{\mathrm{L}} - \beta^{\mathrm{R}})\int d\Gamma P_\beta^{\mathrm{LC}}(\Gamma)J(\Gamma) = 0 \tag{42}$$

となる。つまり、$I_t^{(0)} = 0$ じゃないか！

そうか、これが落とし穴か。話がうますぎると思ったんだ。何度も計算や論旨をチェックしたが、計算や設定は間違っていない。そもそも、分布の主要部分 $P_t^{(0)}$ しか使わないなら、$P_t(\Gamma)$ の時間発展の形、$P_t(\Gamma) = P_0(\Gamma_{-t})$ を使わずに温度の時間発展が求まることになるのだから、何かがおかしい。しかし、局所カノニカル分布で高温と低温を用意しているのに、エネルギーが流れない... とはな。局所カノニカル分布からのずれがエネルギー変化を決めているのか。そういえば、昨日、僕は「セルフコンシステントに決めるのか」と勢いで喋ってしまったが、そういう話ではない、ということかな。ソラのいうように特異摂動を考えないといけないのかもしれない。キヨはどうするのだろうか。

2.8 木曜日夕方　結果

16:30 になった。いつもの部屋に、ソラ、キヨ、そして僕が集まった。いつもの部屋といっても、今週だけずっと使っているだけだ。この 3 日は 3 週間くらいに感じる。この話は春からずっとやっているような錯覚に陥るが、密に話したのは今週だけだ。

僕が図書室で理解した話をする。少なくともキヨにはお見通しだと思っていたが、予想外にも

「なるほど。それは綺麗な話だね。知らなかった。」

とキヨが答えた。その計算はしていなかったらしい。ソラは

「私もそこまで計算できていませんでした。それに付け加えるコメントが一つと質問が一つあります。」

といいながら、黒板に向かう。

「コメントは、与えられたエネルギー配分に対して、温度の組が一意に決まることについてです。」

え、その議論をやったのか。ソラが続ける。

「局所カノニカル分布は統計力学と同じ形式だから、

$$E_t^{\mathrm{L}} = -\frac{\partial\Psi(\beta_t^{\mathrm{L}},\beta_t^{\mathrm{R}})}{\partial\beta_t^{\mathrm{L}}} \tag{43}$$

$$E_t^{\mathrm{R}} = -\frac{\partial\Psi(\beta_t^{\mathrm{L}},\beta_t^{\mathrm{R}})}{\partial\beta_t^{\mathrm{R}}} \tag{44}$$

は分かりますよね。それで、二つの箱のエネルギーに対する「エントロピーのようなもの」をルジャンドル変換で

$$S(E^{\mathrm{L}},E^{\mathrm{R}}) \equiv \inf_\beta[\Psi(\beta^{\mathrm{L}},\beta^{\mathrm{R}}) + E^{\mathrm{L}}\beta^{\mathrm{L}} + E^{\mathrm{R}}\beta^{\mathrm{R}}] \tag{45}$$

と定義すると

$$\beta_t^{\mathrm{L}} = \frac{\partial S(E_t^{\mathrm{L}},E_t^{\mathrm{R}})}{\partial E_t^{\mathrm{L}}} \tag{46}$$

$$\beta_t^{\mathrm{R}} = \frac{\partial S(E_t^{\mathrm{L}},E_t^{\mathrm{R}})}{\partial E_t^{\mathrm{R}}} \tag{47}$$

となりますよね。エントロピーのようなもの S は、H^{int} がなければそれぞれの箱の熱力学エントロピーの単なる足し算です。巨視的な系だとこの相互作用の影響はおそらく無視できると思います。いずれにしても、$S(E^{\mathrm{L}},E^{\mathrm{R}})$ の関数形はダイナミクスと関係なく、与えられたハミルトニアンに対して統計力学の計算で決まるということが大事です。そして、それぞれの箱のエネルギー期待値が分かれば、温度が分かることになります。」

おぉ、凄く綺麗じゃないか。いわれてみればもっともだ。何で僕はそこにいかなかったのだろう。条件なしでいけてるようにも見えるが、つい聞いてみた。

「ええと、そこで仮定された条件は....」

こういうのはキヨが即答する。

「Ψ の凸性。ルジャンドル変換を使っているから。統計力学だと短距離相互作用の場合には大丈夫らしいというのは読んだことはあるけれど、勉強しきれてない。」

あ、短距離相互作用.. また出てきた。何やろ、と思ったが、止めなかった。ソラが続ける。

「そうですね。そうすると、Ψ の凸性が成り立つことを仮定します。いずれにしても、これは形式的なコメントですが、別のことで混乱しています。私も $P_t^{(0)}$ の選択で色々迷って、相互作用分を半分入れるのが綺麗かなとも思ったのですが、そのときには、$P_0^{(0)}(\Gamma) \neq P_0(\Gamma)$ ですよね。$t=0$ では二つの箱は切り離されて平衡分布にあるという設定だったから、相互作用分がないのですよね。昨日書いた

$$P_t(\Gamma) = P_t^{(0)}(\Gamma) + \epsilon P_t^{(1)}(\Gamma) + \cdots \tag{48}$$

という展開では、この初期条件のずれはどこに入るのでしょうか？そこを混乱して、先に進めなくなったのです。」

おぉ〜。僕は気が付いてなかった。そこはスルーして、浮かれたままで先を計算していた。いつものように理解しないままに口走る。

「ええと、どうすれば...。あれ、$P_t^{(0)}(\Gamma)$ は初期条件と一致するように選んだ方がええんか。けど、そうするとさっき示した一般的な式は成り立たんようになるし、色々と複雑になる。$P_t^{(0)}(\Gamma)$ としては、やはり、相互作用が半分づつ入る局所カノニカルの方がええ...。」

そうか、喋りながら方針が見えた気がする。黒板の前にでて説明する。

「よし、相互作用も摂動や。$H^{\rm int}$ は接触面近くの寄与しかないんで、バルクの寄与を持つ $H^{\rm L}$, $H^{\rm R}$ とは典型的な値は全然違うやろ。この小ささを表現するために、$H^{\rm int}$ の前に無次元の小さなパラメータ δ をおいて摂動的に扱うようにすれば、形式的には議論できる。δって何かっていわれたら、ちゃんと答えられへんけどな。それで、$P_t(\Gamma)$ を

$$P_t(\Gamma) = P_t^{(0)}(\Gamma) + \tilde{Q}_t(\Gamma) + \tilde{P}_t(\Gamma) \tag{49}$$

と書いといて、参照する分布 $P_t^{(0)}(\Gamma)$、今の場合、局所カノニカル分布で、初期分布のずれから決まる分 $\tilde{Q}_t(\Gamma)$ とその他のずれ $\tilde{P}_t(\Gamma)$ に分けたらえんちゃうの。それでエネルギー変化率の期待値 I_t を

$$I_t = I_t^{(00)} + \delta I_t^{(10)} + \epsilon I_t^{(01)} + \cdots \tag{50}$$

と展開して、つまり、$\delta^n \epsilon^k I_t^{(nk)}$ の和として書くんやろな。さっき示したのが $I_t^{(00)} = 0$ で、何かの極限で最も主要な項を取り出せばええんやけど、嫌やなぁ。そんな計算できる気せんな。」

ついにキヨが立ち上がった。

「全部つながった気がする。昨夜、$P_t(\Gamma) = P_0(\Gamma_{-t})$ の使い方を考えていたんだ。それを併せると、多分、最後までいく。」

黒板の前の役者がキヨに交代する。

「まず、局所カノニカル分布からのずれをあらわすために

$$P_t(\Gamma) = e^{-\Psi(\beta_t^{\rm L},\beta_t^{\rm R}) - [\beta_t^{\rm L}\tilde{H}^{\rm L}(\Gamma) + \beta_t^{\rm R}\tilde{H}^{\rm R}(\Gamma)] + \Sigma_t(\Gamma)} \tag{51}$$

とおく。ずれを Σ_t によって表したとも考えれるし、論理的には Σ_t の定義といってもよい。ところで、$P_t(\Gamma) = P_0(\Gamma_{-t})$ だから、Σ_t は具体的に書ける。全部書き出すね。単なる移項だけど、式で書くと長い。

$$\begin{aligned}\Sigma_t &= \delta\bar{\beta} H^{\rm int}(\Gamma_{-t}) + B \\ &\quad + \Psi(\beta_t^{\rm L},\beta_t^{\rm R}) - \Psi(\beta^{\rm L},\beta^{\rm R}) \\ &\quad + \beta_t^{\rm L}\tilde{H}^{\rm L}(\Gamma) - \beta^{\rm L}\tilde{H}^{\rm L}(\Gamma_{-t}) \\ &\quad + \beta_t^{\rm R}\tilde{H}^{\rm R}(\Gamma) - \beta^{\rm R}\tilde{H}^{\rm R}(\Gamma_{-t})\end{aligned} \tag{52}$$

ここで、B は

$$B = \Psi(\beta^{\mathrm{L}}, \beta^{\mathrm{R}}) + \beta^{\mathrm{L}} F^{\mathrm{L}}(\beta^{\mathrm{L}}) + \beta^{\mathrm{R}} F^{\mathrm{R}}(\beta^{\mathrm{R}}) \tag{53}$$

という定数で、Σ_t の 1 行目が初期分布と局所カノニカル分布の差に由来している。相互作用がない $\delta = 0$ だと分布が時間変化しないのだから、$\delta = 0$ のときは $\Sigma = 0$ に注意して、Σ_t の形を見ると、

$$\Sigma_t = O(\delta) + O(\delta\epsilon) \tag{54}$$

とオーダー評価できる。これは、つまり、Σ_t を摂動的に扱かってよいということをいっている。それで、$P_t = P^{\mathrm{LC}}_{\beta_t} e^{\Sigma_t}$ を Σ_t について展開すると

$$\begin{aligned} I_t &= \langle J\Sigma_t \rangle^{\mathrm{LC}}_{\beta_t} + O(\epsilon^2\delta^2, \delta^3) \\ &= O(\delta^2, \epsilon\delta^2) \end{aligned} \tag{55}$$

が主要項になっていることが分かる。ここで、君の結果 $\langle J \rangle^{\mathrm{LC}}_{\beta_t} = 0$ と

$$\partial_s \tilde{H}^{\mathrm{L}}(\Gamma_{s-t}) = J(\Gamma_{s-t}) = O(\delta) \tag{56}$$

を使った。」

ふむ。Σ_t がごちゃごちゃしているが、論旨は明快に見える。局所カノニカル分布からのずれを小さいと考える、というのはまさに昨日期待していたことだ。そして、キヨのウルトラ C が炸裂した。

「ところで、この Σ_t の 2 行目から 4 行目は、

$$\int_0^t ds \sigma_s \tag{57}$$

と書くことができる。σ_s は、微分して積分して端の値の寄与として、Σ_t の 2 行目から 4 行目になるように

$$\sigma_s = \partial_s[\Psi(\beta_s) + \beta^{\mathrm{L}}_s \tilde{H}^{\mathrm{L}}(\Gamma_{s-t}) + \beta^{\mathrm{R}}_s \tilde{H}^{\mathrm{R}}(\Gamma_{s-t})] \tag{58}$$

となる。微分を実行するといくつかの項がでるけど、$O(I_t) \simeq O(\partial_s\beta_s)$ だから、$\partial_s\beta_s$ からくる項は主要項からはずれるし、左の箱のエネルギー増加は右の箱のエネルギー増加と符号が反対で大きさが同じだったことを思い出すと、

$$\sigma_s = (\beta^{\mathrm{L}}_s - \beta^{\mathrm{R}}_s) J(\Gamma_{s-t}) + O(\epsilon\delta^2, \delta^2) \tag{59}$$

になるね。」

おぉ〜。まるで魔法のようだ。何と鮮やかな。摂動といっても、単なるオーダー評価しか使っていない。摂動という言葉からイメージするような激しい計算は何一つ使っていない。Σ_t は一見複雑に見えたが、何のことはない、最初からそこに向かっていたのか。凄い。凄い。キヨが続ける。

「分布の局所カノニカルからのずれのうち、$\tilde{Q}_t(\Gamma)$ は Σ_t の第一項から、その他のずれ $\tilde{P}_t(\Gamma)$ は σ_s の積分からくる。そして、I_t の主要項も分かる。

$$\delta^2 I^{(20)}_t = -\delta \langle \bar{\beta} H^{\mathrm{int}}(\Gamma_{-t}) J(\Gamma) \rangle^{\mathrm{LC}}_{\beta_t}. \tag{60}$$

と

$$\delta^2 \epsilon I^{(21)}_t = \int_0^t ds (\beta^{\mathrm{L}}_s - \beta^{\mathrm{R}}_s) \langle J(\Gamma_{s-t}) J(\Gamma) \rangle^{\mathrm{LC}}_{\beta_t}. \tag{61}$$

かな。しかし、$I^{(20)}_t$ は t が H^{int} と J の相関時間より大きくなると 0 に近づくから効かない。残る主要項は $I^{(21)}_t$ だけだと思う。」

僕は終わったつもりだったが、ソラが素朴な問いを発してきた。

「この主要項だけが重要ってどうやったら分かるのでしょうか？単に $\epsilon \to 0$ や $\delta \to 0$ だとこの項自身もゼロに近づくので...。」

あれれ、確かに。

「その小ささに合わせて時間を長くとるのだろね。温度差の減衰率 τ^{-1}_{rel} に対して、

$$\frac{\epsilon}{\tau_{\mathrm{rel}}} = \frac{d\beta}{dE}\frac{dE}{dt} \tag{62}$$

だから、dE/dt は $O(\epsilon\tau^{-1}_{\mathrm{rel}})$ になる。上の式と比べると、$\tau_{\mathrm{rel}} = O(\delta^{-2})$ だから、$\tau = \delta^2 t$ を一定に保ったまま $\delta \to 0, \epsilon \to 0, t \to \infty$ を考えればいいと思う。」

なるほど、なるほど、至極もっとも。しかし、びしっとこない。

「あぁ。ええと、ちゃんと式で書けるんか?」

既に細部に入っているが、キヨは動じない。

「スケールされた変数を導入しようか。エネルギーとか温度とかの時間変化は非常にゆっくりしていて、τ でみないと追跡できないわけだから、そのような「ゆっくりした時間尺度」で逆温度差の時間変化をみる。つまり、

$$\Delta_\tau \equiv \beta_t^{\mathrm{L}} - \beta_t^{\mathrm{R}} \tag{63}$$

とおく。$\bar{\beta}_\tau^* = \bar{\beta}_t$ も導入しよう。さらに、$J = O(\delta)$ だったので、$J^* = J/\delta$ と定義しよう。そうすると、エネルギー変化率の相関時間が ϵ に関係ないだろうことに注意して、先の極限で残るのは、

$$\frac{d\Delta_\tau}{d\tau} = \left.\frac{d\bar{\beta}}{dE^L}\right|_{E_\tau^{\mathrm{L}*}} \kappa(\bar{\beta}_\tau^*)\Delta_\tau \tag{64}$$

とかけて、

$$\kappa(\beta) = \int_{-\infty}^{0} ds \langle J^*(\Gamma_{-s})J^*(\Gamma)\rangle_\beta^{\mathrm{C}} \tag{65}$$

となる。この期待値 $\langle\ \rangle_\beta^{\mathrm{C}}$ は逆温度 β でのカノニカル分布での期待値ね。熱容量が正だから $\partial\beta/\partial E < 0$ で、κ は時間積分の分散でかけるから正になる。だから、逆温度差 Δ はゼロに近づく。」

今度こそ本当だ。間違いない。湯と水を接触するとぬるま湯になる、というあたり前の現象をミクロなハミルトン力学系の世界から導出することができた。κ が本当に有限になるかどうか、また、その具体例も知りたいが、今日はこれでいい気がした。興奮しきっているし、ひとつの山場は完全に超えた。

2.9 金曜日 次の問題へ

今日も 16:30 にいつもの部屋に 3 人が集まった。何となく 3 人とも穏やかだ。静かに僕が口火を切る。

「ええと。もともと、ソラが春に「熱い湯に水を足すとぬるま湯になるのも量子力学の結果じゃないか」といい出したのが最初やったな。量子力学でやらんと終われへんな。」

キヨが静かにいう。

「初期状態として異なる温度のカノニカル分布に対応する密度行列を用意して、量子力学の時間発展を考えれば同じだよ。Liouville の定理がユリタリー性に変わるだけ。エネルギー変化の期待値を考えるときに、演算子が交換しないことに注意しないといけないけれど、それはそんなに難しくない。全くパラレルに議論できる。」

キヨがこれまでの話の量子版を完全に講義した。なるほど、これは明快だ。量子性がどこでどのように効いてくるのかも分かる。それで終わりか...。あと残っているのは、可逆性のパラドクスかな。

「あぁ。可逆性のパラドクスって結局何やったんだろ。時間依存する温度は確かに平衡状態に向かっている。その一方、分布は平衡分布に向かっていない。例えば、$P_t^\dagger(\Gamma)$ から力学状態を選べば、典型的には元に戻る。これは、P_t と $P_t^\dagger$ が異なる、ということを主張している。P_t からサンプルして得られる状態から出発する振る舞いと $P_t^\dagger$ からサンプルして得られる状態から出発する振る舞いが異なっているのは何も不思議なことではない。その意味で、パラドックスはないのかもしれないが、何か気持ち悪いな。その気持ち悪さの起源は何だろう。」

ソラが答える。

「具体的には、

$$P_t(\Gamma) = P_{\beta_t}^{\mathrm{LC}}(\Gamma)e^{\Sigma_t(\Gamma)} \tag{66}$$

だったので、時間反転非対称性 $\Sigma_t(\Gamma^\dagger) \neq \Sigma_t(\Gamma)$ が全てですよね。この関数はそれまでの温度変化の履歴から決まっていて、時間反

転対称でないことは具体的に確認できますね。面白いことに、Σ_t は熱力学量の期待値に寄与せず、温度変化には主たる寄与をもたらすのですよね。しかも、昨日の設定だと、P_t と $P_t^\dagger$ はどちらもある局所カノニカル分布 $P_{\beta_t}^{\mathrm{LC}}$ からは同じように近いのに、その後の時間変化は全く異なるのですね。もっといえば、その後の時間変化を見るときには、P_t を $P_{\beta_t}^{\mathrm{LC}}$ に置き換えても大きな影響がない、というか、温度の時間変化は同じなのに、$P_t^\dagger$ のその後の振る舞いは大きく異なっているのだから、その意味では局所カノニカル分布 $P_{\beta_t}^{\mathrm{LC}}$ に近いとはいえない。この辺りの奇妙な事実が気持ち悪さの大元ではないですか。」

確かに、何か気持ち悪さの起源に近いところにいるが、まだふわっとしている。キヨが続ける。

「そもそも初期条件として、それぞれの箱でカノニカル分布を仮定したよね。実際は、色々な歴史があってその状態があるのだから、厳密にカノニカル分布になっているはずはない。カノニカル分布でよい、と考えてよいのは、その仮定にもとづく統計力学の計算が数々の実験と一致するからだと、統計力学では考える。本当は、カノニカル分布からずれているはずだが、そのずれは関係ない... と。今回の話は、統計力学からもう一歩踏み込んで、時間変化までを整合性の条件として考えたとき、どのような統計分布が代表的なものとして考えていいのか、ということを問うているんだと思う。それにはまだ答えきれていない。」

なるほど。僕が自分の言葉でいう。

「ふー。つまりやな、観測されるマクロな現象と矛盾のない初期条件はあるが、それ自身が時間反転対称性を破っていると。その初期条件は熱力学との整合性だけでは決まらない。その後に引き続いておこるダイナミクスと整合するように選ばないといけない。可逆な力学と不可逆な現象を整合させているのは初期条件であり、それを別の何かから理解するのは途方もない。そういうことかな。続く... と。」

ため息をついた。

「何か凄いですね。景色が変わりました。本当に面白いです。」

しばらくの沈黙の後、僕が話題を変えた。

「あぁ。それはそれで考えるとして、ついでに色々出来るんちゃうの。例えば、流体方程式をミクロな力学から出せたら面白いやろ。速度場があるから複雑やろうけど、やってみるわ。」

僕がつぶやくと、ソラが続いた。

「私は、特異摂動との関係が気になるので、考えます。昨日の計算は特異摂動としても定式化できるはずだと思うんですよ。」

キヨもつられた。

「昨日の話は、エネルギー期待値の時間変化で徹したけれど、それは大数の法則を前提にして、一回きりのイベントの結果を期待値で見ていると考えたのだった。実際はそのまわりでずれているのだけど、それがどうなっているか調べてみるよ。」

このキヨがやりたいことは、よく理解できなかった。数学的な評価のことをいっているのか、それとも大数の法則に関連した極限分布、中心極限定理のようなこと、を念頭に置いているのか。もう疲れて問う気力はなかった。

3 冬 エピローグ

クリスマスの頃。ソラ、キヨ、僕が順番に発表する機会をもった。

ソラは、van der Pol 方程式を例題にして、特異摂動の分かりやすいレビューをして、特異摂動を使って、熱接触における温度の時間変化を記述する方程式をハミルトン力学から再導出した。キヨの用意した設定が特異摂動

では、ゼロモードの分離条件に対応するのを見るのは驚きだった。素朴な摂動における永年項の除去という立場から自然にキヨの設定に到達する。イリノイ大学の大野らが開発したくりこみ群方程式の言葉での解説も加えた。

キヨは、熱接触の例題で、ゆらぎながら時間発展する方程式について説明した。１９６０年代の森らの射影演算子の話を解説し、この例題でその対応を再構成した。キヨの導出方法では、射影演算子という考え方を最初から持ち出さず、むしろ、知りたいことにまっすぐ向かっている。ソラの特異摂動の話と併せて、これらの計算技巧の全貌は明らかになった。

僕は、熱接触の例題を一般化して、流体方程式をハミルトン力学から導出した。マクロな運動量の熱力学や統計力学での扱い方を整理して、局所共動座標系をうまく使うのが新たなポイントだった。これで流体方程式の位置づけも気持ちよくなった。

「冬休みにレポートを書いて、S 先生に見てもらいませんか？」

ソラが提案した。そうだな、折角色々と理解したことだし、気分的にも盛り上がる。

「そういえば、S 先生、第 59 回物性若手夏の学校で講義したらしい。講義ノートが読めるという噂を聞いたけど。。」

さっとソラが検索する。

「この講義ノート面白いですよ。」

「あまりにも不自然に桜が咲き誇る春。....
「この講義ノート面白いですよ。」

「あまりにも不自然に....」」」.....

解説

本文の物語風記事は、第 59 回物性若手夏の学校 (2014) の講義ノートとして書かれている。私は、ミクロな世界の基本法則とマクロな世界の基本法則をつなぐ、ということに対して強い興味を持っていて、その興味をそのまま講義の題名にした。講義ノートでは、その典型的な例として、いわゆる「時間の矢」問題をとりあげた。大学１，２回生くらいで一度は話題にのぼる問題だし、問題設定に高度な専門的知識はいらないので、説明しやすいと考えたからである。ただ、水と湯をまぜるとぬるま湯になる、という至極当たり前の現象に対して、敢えてミクロな力学世界から考えると不思議に思えてくる、という一回ひねった不思議さを議論するので、問題意識が共有されない場合も多い。そこで、大学１，２回生時代の気分に戻って、問いに素直に向かっていく様を伝える形式の解説がいい気がした。それが物語風にした一つの理由である。また、この物語は、登場人物の設定や話の構成などについて、[結城浩、「数学ガール」（ソフトバンククリエイティブ）] を大きく参考にしている。（物語の中で無断登場もしている。）

物語風といっても、内容は、物性若手夏の学校にふさわしく最先端の知見が紹介されている。木曜日のソラ、キヨ、僕がそれぞれ持ち寄ってくる関係式３つを組み合わせることで、ミクロな可逆ダイナミクスからマクロな不可逆ダイナミクスを導出することができる、というコンセプトは、2014 年に出版された論文 [S. Sasa, Phys. Rev. Lett. **112** 100602 (2014); arXiv:1306.4880] のハイライトである。この論文では、流体方程式をハミルトン系から導く議論を展開している。この３つの関係式を組み合わせることで一気に見通しがよくなることが分かったのは 2013 年 5 月のことである。流体方程式の場合には、運動量の扱いや局所共動座標系の扱いなどさらに技巧的な部分が必要になるので、より簡単な例題でこの論文の本

質を伝えることを目指した。

物語では金曜日にキヨが解説したことになっている量子力学からの導出は、実は、この講義ノートを書きながら平行してすすめた。量子力学にもとづく流体方程式の導出は複雑そうなので誰かにまかせようと思っていたが、熱接触の場合だと量子力学でも簡単に議論できるはずだと思って手を動かしてみた。この講義ノートの最後に殴り書きノートを添付している。ただ、量子系の場合には、形式的な表現ではピンとこないので、具体例を解析して学ぶ必要があるだろう。

さらに、例題が簡単になっている分だけ、特異摂動との関係も見やすくなっている。実は、流体方程式導出においても、特異摂動と同じ構造があることは意識していたのだが、複雑なので完全な整理はできてなかった。今回はこの講義ノートを準備しながら、レポート用紙上では特異摂動との関係は概ね明快になった。その部分もソラに金曜日に喋らそうと思っていた時期もあったのだが、分量的日程的に無理だった。何かの機会に公表したい。夏の学校の講義では、その解説にも触れようかと思っている。

特異摂動との関係については、少し思い入れがある。文献 [蔵本由紀, 物性研究 **49**(3), 299-326 (1987) ; NII 論文 ID(NAID):110006466699 (http://ci.nii.ac.jp/naid/110006466699)] にあるように、私が大学院生のとき、蔵本さんによる、ミクロダイナミクスからマクロダイナミクスを得る系統的な方法についての連続講義があった。この講義は刺激的で、それまで断片的な知識でしかなかった考えや計算方法が系統的に理解できた気がした。８０年代後半は、そのような計算方法を使って、既知のものを少しアレンジするような論文がたくさん出版されていた。私は、その方法に興味を持ちつつも単純な応用をすることを面白いと思えなかった。そこで、むしろ、誰もが知っている流体方程式をミクロ力学から導出することを目標にした。流体方程式のミクロからの基礎には学部生のときから興味を持っていたのでちょうどよかったが、全くできなかった。レベルが違う問題だと思ってあきらめた。今や、流体方程式を導出し、特異摂動の言葉でも理解できそうになったのは、そのときの宿題を終えた気分になって大変うれしい。

キヨが最後に話している射影演算子法との関係についても触れておきたい。射影演算子法は、非平衡統計力学の金字塔の一つであるが、何をやっているのかが分からないまま今日まで至っている。演算子の自明な恒等式は勿論分かるが、それを使って何を計算したことになっているのかがはっきりしない。本文でとりあげた例題に対して射影演算子の関係を議論することで、射影演算子の恒等式の意義について理解を深めれると思っている。

本文の導出では、平衡からの距離 ϵ と相互作用 δ の両方で展開している。初期条件を相互作用を含むぴったり局所平衡から出発すると δ に関する展開はいらない。流体方程式導出の論文はその形になっている。相互作用に関する展開をするなら ϵ は小さくなくてもいいと思った時期もあったのだが、これは非常に微妙な問題があって、形式的にはいいように見えるのだが丁寧に分析すると、まずい点があった。このあたりのうまくいくとかいかないとかのボーダーはまだよく見えていない。

この講義ノート草稿に対して、武末真二さん、伊丹将人さん、水口毅さん、高橋惇さんには３点以上の間違いを指摘していただきました。また、田崎晴明さんと結城浩さんには、twitter 上で強く励ましていただきました。これらの方々、および、間違いを指摘くださった多くの方と励ましを送ってくださった多くの方に感謝します。

2014 年 5 月 7 日 (改訂 5 月 11 日,5 月 18 日; 最終版 5 月 19 日)

物性研究・電子版 Vol. 4, No. 1, 041203（2015年2月号）

Relaxation dynamics of weakly interacting two quantum systems

2014/05/06 Shin-ichi Sasa

Question

We consider a quantum system consisting of two subsystems whose Hamiltonians are given by H_1 and H_2. We assume that $[H_1, H_2] = 0$ and that the two subsystems interact through the interaction Hamiltonian $\delta H_{\rm int}$, where δ is a dimensionless constant. The total Hamiltonian is written as

$$H = H_1 + H_2 + \delta H_{\rm int}. \tag{S1}$$

The initial state of the system is described by the density matrix ρ. For simplicity of later arguments, we study the case that ρ is given by the local canonical state

$$\rho^{\rm LC}_{\boldsymbol{\beta}^0} = e^{-\Psi(\boldsymbol{\beta}^0) - \boldsymbol{\beta}^0 \boldsymbol{H} - \bar{\beta}^0 \delta H_{\rm int}}, \tag{S2}$$

where $\boldsymbol{\beta}^0 = (\beta_1^0, \beta_2^0)$, $\boldsymbol{\beta}^0 \boldsymbol{H} = \sum_{k=1}^2 \beta_k^0 H_k$, and $\bar{\beta}^0 \equiv (\beta_1^0 + \beta_2^0)/2$. β_k^0 represents the temperature of the k-th subsystem.

Let $U(t) = e^{-iHt}$ be the time evolution operator. (The Planck constant $\hbar$ is set to unity.) With the definition of modified Hamiltonians

$$\tilde{H}_k \equiv H_k + \frac{1}{2}\delta H_{\rm int}, \tag{S3}$$

we study the time evolution of

$$E_k(t) \equiv {\rm Tr}[U(t)\rho^{\rm LC}_{\boldsymbol{\beta}^0} U^\dagger(t) \tilde{H}_k]. \tag{S4}$$

It should be noted that

$$E_1(t) + E_2(t) = E_1(0) + E_2(0). \tag{S5}$$

We then have

$$\frac{dE_k(t)}{dt} = {\rm Tr}[U(t)\rho^{\rm LC}_{\boldsymbol{\beta}^0} U^\dagger(t) J_k] \tag{S6}$$

with

$$J_k = i[H, \tilde{H}_k]. \tag{S7}$$

In this note, we derive a (well-known) formula describing the energy exchange rate dE_1/dt under the condition that (i) the system is near equilibrium

$$0 \le \epsilon \equiv \frac{\beta_1^0 - \beta_2^0}{\bar{\beta}^0} \ll 1 \tag{S8}$$

and (ii) the coupling is week

$$0 \le \delta \ll 1. \tag{S9}$$

 物性研究・電子版 Vol. 4, No. 1, 041203（2015年2月号）

Derivation

First, we introduce the time dependent parameter $\boldsymbol{\beta}(t)$ such that

$$\mathrm{Tr}[U(t)\rho^{\mathrm{LC}}_{\boldsymbol{\beta}^0}U^\dagger(t)\tilde{H}_k] = \mathrm{Tr}[\rho^{\mathrm{LC}}_{\boldsymbol{\beta}(t)}\tilde{H}_k], \tag{S10}$$

which is written as

$$E_k(t) = -\frac{\partial\Psi(\boldsymbol{\beta}(t))}{\partial\beta_k(t)}. \tag{S11}$$

Here, by defining

$$S(\boldsymbol{E}) \equiv \inf_{\boldsymbol{\beta}}[\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{E} + \Psi(\boldsymbol{\beta})], \tag{S12}$$

we also obtain

$$\beta_k(t) = \frac{\partial S(\boldsymbol{E}(t))}{\partial E_k(t)}, \tag{S13}$$

which provides $\beta_k(t)$ for a given $\boldsymbol{E}(t)$. It is natural to define $\bar{\beta}(t) \equiv (\beta_1(t) + \beta_2(t))/2$.

Next, we define the operator $\Phi(t)$ by

$$U(t)\rho^{\mathrm{LC}}_{\boldsymbol{\beta}^0}U^\dagger(t) = e^{\Phi(t)}. \tag{S14}$$

We then confirm that

$$\Phi(t) = U(t)\Phi(0)U^\dagger(t) \tag{S15}$$

with

$$\Phi(0) = -\Psi(\boldsymbol{\beta}^0) - \boldsymbol{\beta}^0\tilde{\boldsymbol{H}}. \tag{S16}$$

Now, we express $\Phi(t)$ as

$$\Phi(t) = -\Psi(\boldsymbol{\beta}(t)) - \boldsymbol{\beta}(t)\tilde{\boldsymbol{H}} + \Sigma(t), \tag{S17}$$

which, precisely speaking, provides the definition of $\Sigma(t)$. Namely,

$$\begin{aligned} \Sigma(t) &= \Psi(\boldsymbol{\beta}(t)) + \boldsymbol{\beta}(t)\tilde{\boldsymbol{H}} - \Psi(\boldsymbol{\beta}^0) - \boldsymbol{\beta}^0 U(t)\tilde{\boldsymbol{H}}U^\dagger(t), && \text{(S18)} \\ &= \int_0^t ds\sigma(s) && \text{(S19)} \end{aligned}$$

with

$$\begin{aligned} \sigma(s) &= \partial_s[\Psi(\boldsymbol{\beta}(s)) + \boldsymbol{\beta}(s)U(t-s)\tilde{\boldsymbol{H}}U^\dagger(t-s))] && \text{(S20)} \\ &= (\partial_s\boldsymbol{\beta}(s))[U(t-s)\tilde{\boldsymbol{H}}U^\dagger(t-s) - \boldsymbol{E}(s)] \\ &\quad +[\beta_1(s) - \beta_2(s)]U(t-s)J_1U^\dagger(t-s). && \text{(S21)} \end{aligned}$$

Since

$$|\Sigma(t)| \le |\Psi(\boldsymbol{\beta}(t)) - \Psi(\boldsymbol{\beta}^0)| + |\boldsymbol{\beta}(t)\tilde{\boldsymbol{H}} - \boldsymbol{\beta}^0 U(t)\tilde{\boldsymbol{H}}U^\dagger(t)|, \tag{S22}$$

it is expected that $|\Sigma(t)| = O(\epsilon)$ for all t. (It is not a proof.) We thus obtain

$$\begin{aligned} \frac{dE_1(t)}{dt} &= \mathrm{Tr}[U(t)\rho^{\mathrm{LC}}_{\boldsymbol{\beta}^0}U^\dagger(t)J_1] \\ &= \mathrm{Tr}[e^{-\Psi(\boldsymbol{\beta}(t)) - \boldsymbol{\beta}(t)\tilde{\boldsymbol{H}} + \Sigma(t)}J_1] \\ &= \mathrm{Tr}[\rho^{\mathrm{LC}}_{\boldsymbol{\beta}(t)}J_1] \\ &\quad + \int_0^t ds\int_0^1 du\mathrm{Tr}[\rho^{\mathrm{LC}}_{\boldsymbol{\beta}(t)}e^{u\boldsymbol{\beta}(t)\tilde{\boldsymbol{H}}}\sigma(s)e^{-u\boldsymbol{\beta}(t)\tilde{\boldsymbol{H}}}J_1] + O(\epsilon^2). && \text{(S23)} \end{aligned}$$

We then notice

$$\mathrm{Tr}[\rho^{\mathrm{LC}}_{\boldsymbol{\beta}(t)} J_1] = 0, \tag{S24}$$

which is obtained from $\mathrm{Tr}[U(t)\rho^{\mathrm{LC}}_{\boldsymbol{\beta}} U^\dagger(t)] = 1$ for any t and any $\boldsymbol{\beta}$.

Now we consider the condition $0 \le \delta \ll 1$. By recalling (S21) and $|J_1| = O(\delta)$, we find that $dE_1/dt = O(\epsilon\delta^2)$, and $\partial_s \boldsymbol{\beta}(s) = O(\epsilon\delta^2)$. By using this estimation and noting $J_1 + J_2 = 0$, we obtain

$$\begin{aligned} \frac{dE_1(t)}{dt} &= \int_0^t ds[\beta_1(s) - \beta_2(s)] \int_0^1 du \mathrm{Tr}[\rho^{\mathrm{LC}}_{\boldsymbol{\beta}(t)} e^{u\boldsymbol{\beta}(t)\tilde{\boldsymbol{H}}} U(t-s) J_1 U^\dagger(t-s) e^{-u\boldsymbol{\beta}(t)\tilde{\boldsymbol{H}}} J_1] \\ &\quad + O(\epsilon^2) + O(\epsilon\delta^3) &\text{(S25)} \\ &= \int_{-t}^0 ds[\beta_1(t+s) - \beta_2(t+s)] \int_0^1 du \mathrm{Tr}[\rho^{\mathrm{C}}_{\bar{\beta}} U(-s+iu\bar{\beta}) J_1 U^\dagger(-s+iu\bar{\beta}) J_1] \\ &\quad + O(\epsilon^2) + O(\epsilon\delta^3), &\text{(S26)} \end{aligned}$$

where $\rho^{\mathrm{C}}_{\bar{\beta}}$ denotes the canonical density matrix.

At the last step, by introducing the scaled time

$$\tau \equiv \delta^2 t, \tag{S27}$$

defining the scaled variables $E_1^*(\tau) \equiv E_1(t)$, $\beta_k^*(\tau) \equiv \beta_k(t)$, and $J^* = J/\delta$, we consider the time evolution of

$$\Delta(\tau) \equiv \beta_1^*(\tau) - \beta_2^*(\tau) \tag{S28}$$

in the limit $t \to \infty$, $\epsilon \to 0$, and $\delta \to 0$ with fixed τ. With some assumptions, we then obtain

$$\frac{d\Delta(\tau)}{d\tau} = \left.\frac{d\bar{\beta}}{dE_1}\right|_{E_1^*(\tau)} \kappa(\bar{\beta}^*(\tau))\Delta(\tau) \tag{S29}$$

with

$$\kappa(\beta) = \int_0^1 du \int_{-\infty}^0 ds \mathrm{Tr}[\rho^{\mathrm{C}}_{\beta} U(-s+iu\beta) J_1^* U^\dagger(-s+iu\beta) J_1^*], \tag{S30}$$

where $\rho^{\mathrm{C}}_{\beta}$ is the canonical density matrix.

The choice of the initial state seems very special. A more natural one is

$$\rho = e^{\sum_k \beta_k^0 [F(\beta_k^0) - H_k]}, \tag{S31}$$

which represents the situation that two independent equilibrium states with different temperatures are prepared. In this case, we rewrite

$$\rho = e^{\Phi(0) + \bar{\beta}^0 \delta H_{\mathrm{int}} + B}, \tag{S32}$$

where $B = \sum_k \beta_k^0 [F(\beta_k^0) + \Psi(\boldsymbol{\beta}^0)] = O(\delta)$. It is easy to modify the above argument. The final result is the same as (S29).