# 統計力学の基礎: カオス性と大自由度性の観点から

東京大学大学院 総合文化研究科　　佐々 真一 [1]

## 1　はじめに

「統計力学の基礎」に関する問題が難しい理由は、論点が多岐にわたるからである。ところが、統計力学の研究者の間に論点整理に関して共通了解がないため、具体的に得られた結果の位置付けを間違って主張する文献も多い。例えば、ユニタリーな時間発展をする系の「緩和特性」の数学的特徴づけを行う問題に対して、いくつかの知見が得られている [1]。これらの成果は、科学の健全な発展であるが、「これによって統計力学、熱力学、不可逆性の基礎づけがあたえられた」と宣言するのはおかしい。緩和特性の表現が関数空間の選択に帰着される場合、その関数空間を選べば現実にあう理由を問いたくなる。これは、等重率の原理を仮定すれば現実にあう理由を問いたいという「そもそもの動機」に比べて理解が進んだと言えるのだろうか？ 問題を数学的により難しいものに先送りし、その部分を深く見ずに思考停止するするのは健全ではない。(エルゴードという言葉をもちだして思考停止するのがもっともポピュラーで不健全な例である。)

「統計力学の基礎」に関する論点を納得し、形式的無意味議論に陥ることを避けるためには、具体的な状況を明示的に設定するのがよい。以下では、考えるモデル系を提示し、それにもとづいて問題を考えることからはじめる。その問題のなかから、カオスと自由度性に関わる特定の問題設定を行い、その問題に対する我々を結果をのべる。

## 2　モデル

2次元の箱に閉じ込められた $N$ 個の粒子の運動を記述する古典力学系を考える。ハミルトニアンをつぎのようにかく。

$$H(\Gamma;\alpha)=\sum_{i=1}^{N}\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}+\sum_{i,j}U(|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|)+\sum_{i=1}^{N}V_{\mathrm{ex}}(\mathbf{r}_i;\alpha). \tag{1}$$

ここで、$\Gamma=(\mathbf{r}_1,\cdots\mathbf{r}_N,\mathbf{p}_1\cdots\mathbf{p}_N)$ は、$4N$ 次元ベクトルで、粒子の位置と運動量の組をあらわす。$V_{\mathrm{ex}}(\mathbf{r}_i;\alpha)$ は、粒子を閉じ込める壁ポテンシャルや (重力などの) 外力に関係したと一体ポテンシャルをあらわす。$\alpha$ は外から制御できるパラメータで、具体的には、壁の位置や外力の強さなどを想定すればよい。このとき、運動方程式は標準的な形でかける。

$$\dot{\mathbf{r}}_i \;=\; \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} \tag{2}$$

[1] E-mail: sasa@jiro.c.u-tokyo.ac.jp

$$\dot{\mathbf{p}}_i \;=\; -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i}. \tag{3}$$

時刻 $t=-t_{\rm w}(t_{\rm w}>0)$ で、$M$ 個の初期条件 (相空間の点) $\Gamma_i(-t_{\rm w}), 1\leq i\leq M,$ を仮定する。この相空間の点は、エネルギー $E$ のエネルギー面上でランダムに (ある連続な確率測度にしたがって) 選ばれるとする。 **$t_{\rm w}$ を十分大きくえらぶとき、運動方程式の解できまる時刻 $t=0$ での相空間の点 $(\Gamma_1(0),\cdots,\Gamma_M(0))$ がつくる統計的性質がマイクロカノニカル測度 $\mu_{\rm mc}^E(d\Gamma)$ と次の意味で等価であること**が、数値実験の経験則として成り立つ。

$$\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}A(\Gamma_i(0))\simeq\int\mu_{\rm mc}(d\Gamma)A(\Gamma). \tag{4}$$

ここで、$A(\Gamma)$ は「物理量」である。さらに、大きな $N$ とマクロな物理量 $A$ に対しては、大数の法則により、単一の値 $A(\Gamma_1(0))$ が、マイクロカノニカル測度 $\mu_{\rm mc}^E(d\Gamma)$ による平均値からずれる確率は非常に小さくなる。この理由により、１回の熱力学的な測定が確定値をもつ。

パラメータ $\alpha$ の値が外から変化させられることを外から系への操作だと解釈する。この設定では、操作はパラメータの時間依存性に全て反映される。以下では、$\alpha$ は有限時間間隔 $0\leq t\leq\tau$ だけで時間依存し、かつ、$\alpha(0)=\alpha(\tau)$ をみたすものとする。このような操作は、サイクル操作とよばれる。操作の例として、例えば、壁の位置の変化 (ピストンで動かすことに対応) や外力の強さの変化 ( 2 次元箱を重力に対して傾けることに対応) などを考えることができる。

このとき、数値実験を行えばわかるように、十分大きな $N$ の系に対して次の経験則がある。**操作のプロトコル $\alpha(t)$ をどのように選んでも、系のエネルギーを下げることはできない。** この経験則は、熱力学におけるプランクの原理に相当する。プランクの原理は、孤立系に対してエントロピーを下げることができない、とする熱力学第 2 法則と本質的には等価である。熱力学第 2 法則は、このような操作的不可能性を形式化したものである。

## 3　問

数値実験により、$t=0$ で統計的アンサンブルが実現していることや、プランクの原理が成り立つことを反証するのは容易ではない。(つまり、数値実験を行えば、成り立つようにみえる。) それゆえ、これらの経験則をハミルトン力学系を研究することによって理解しようとするのは自然である。しかしながら、ハミルトン力学系の保測性と可逆性のために、すぐに問題点が浮かび上がって来る。第 1 に、保則性のために、$t=-t_{\rm w}$ で与えた確率測度がマイクロカノニカル測度に時間発展によって収束することはありえない。だから、$t=0$ で統計的アンサンブルができている、と経験的に了承されていることをミクロから理解するのは自明なことではない。第 2 に、可逆性のために、与えられた操作に対して、プランク原理をやぶる軌道が、必ず存在する。それゆえに、プランクの原理をミクロから理解するのは自明なことではない。また、経験的事実が正しいなら、それを実現する系の条件は何だろうか。統計力学で仮定される大自由度性はどう効いてくるのか。カオスに象徴される力学的性質はどう関わるのか。

以上の問いかけに関して、1世紀以上にわたって、理解がゆっくりとすすんできた。例えば、「はじめに」で触れた、ユニタリーな時間発展をする系の緩和特性の数学的表現に関する研究は、第1の問題から (系に関して制限を与えながら) 生じてきたものである。ここでは、各々の問いかけに対する発展の包括的な概説をする余裕がないので、特定の問題にうつっていく。

以下で考えたいのは、熱力学第2法則 (プランク原理) に関して、自由度と力学系的性質が果たす役割である。具体的な考察をすすめるために、**熱的に孤立した小さな系に対する熱力学第2法則の有無**を考える。ここで、熱的に孤立した小さな系とは、有限 (しばしば 小さい数) 自由度ハミルトン系である。(マクロな系の性質を考えたいときには、$N \to \infty$ を最後にとる。) 小さな系では大数の法則が成り立たないので、測定量は大きく揺らぐ。そこで、このような系に対する熱力学第2法則を (もし、あるとしても) 平均値に対する法則として考える。また、$t=0$ における統計的重率に関する問題は分離し、$t=0$ ではマイクロカノニカル測度が実現していることを仮定する。この測度にしたがって、$t=0$ での位相点をきめたときの統計平均を $\langle\ \rangle_{\mathrm{mc}}$ と記す。

ところで、$t=0$ でカノニカル測度が実現していることを仮定した場合、自由度に関わらずプランクの原理が成り立つことは既に証明されている [2]。 これより、$\langle W \rangle_{\mathrm{mc}} + o(N) \geq 0$ を示すことができる [3]。この結果は、小さい系では、プランクの原理が成り立たないことを意味し、具体例も構成された [4]。しかし、以上のことから、「熱的に孤立した小さな系に対する熱力学第2法則」はない、と宣言するのは早計である。熱力学第2法則には、エントロピー表現 (エントロピー非減少則) があったことを思い出そう。マクロな系では、プランクの原理とエントロピー非減少則は等価であるが、小さな系では何もわからない。そもそも小さな系におけるエントロピー概念は、色々な提案はあるものの、確立したものがあるわけではない。そこで、**小さな熱的孤立系において、どんな操作に対しても非負の値をとるエントロピー生成という物理量があるかどうか？**を問う。当然、このエントロピー生成は、マクロ極限では、エントロピー変化 $\Delta S$ と一致しているはずである。

## 4　結果と議論

我々がその存在を期待しているエントロピー生成を $I$ と記す。どんな操作に対しても $\langle I \rangle_{\mathrm{mc}}$ が非負の値になる量 (初期位相点の関数)$I$ を見出したい。そんな量が簡単にみつかるとは思えないが、熱浴と接触している系の場合には、いくつかの知見が得られているのでそれを参考にする。熱浴接触系の統計平均を $\langle\ \rangle_{\mathrm{bath}}$ と記すと、外がする仕事

$$W = \int_0^\tau dt \dot{\alpha} \frac{\partial H(\Gamma(t), \alpha(t))}{\partial \alpha}. \tag{5}$$

に対して

$$\left\langle \mathrm{e}^{-\beta W} \right\rangle_{\mathrm{bath}} = 1 \tag{6}$$

が成り立つ [5]。これは Jarzynski 等式とよばれ、これに Jensen 不等式を適用すると、ケルビンの原理 $\langle W \rangle_{\mathrm{bath}} \geq 0$ が導出される。また、$W$ が 値 $a$ をとる確率密度を $\Pi_w(a)$ とすると、等式

$$\log \Pi_w(a) - \log \Pi_w(-a) = a \tag{7}$$

が成り立つ [6]。これは揺らぎの定理とよばれ、これから Jarzyski 等式を導出できる。

熱浴接触系におけるケルビンの原理が (7) からもとまるなら、我々が欲しい量 $I$ も (7) の拡張である

$$\log \Pi_I(a) - \log \Pi_I(-a) = a \tag{8}$$

をみたすようにきめればいいことにきづく。ここで、$I$ が 値 $a$ をとる確率密度を $\Pi_I(a)$ と記した。実際、(8) をみたす $I$ を提案し [7]、数値実験でたしかめた [8]。この物理量 $I$ を構成するには、(双曲的) カオス力学系における不安定多様体の概念を非定常系に拡張し、それにもとづいたリアプノフ解析を行う。ただし、数学的に完全な証明はわからない。マクロ極限で $I$ はエントロピー変化 $\Delta S$ と一致していることが期待されるが、直接の検証はまだである [9]。一般的な系でプランクの原理が破れることと (双曲的) カオス力学系においてエントロピー生成が存在することの関係もまだ明らかになっていない。例えば、カオス系に限定するなら、小さい熱的孤立系でプランクの原理が成り立つのかもしれない。

## 参考文献


[1] 例えば、P. Gaspard, *Chaos, Scattering and Statistical Mechanics*, (Cambridge, 1998).

[2] A. Lenard, J. Stat. Phys. **59**, 575, (1978).

[3] H. Tasaki, cond-mat/0009206

[4] K. Sato, J. Phys. Soc. Japan, **71**, 1065, (2002).

[5] C. Jarzynski, Phys. Rev. Lett. **78**, 2690, (1997). および これを引用している論文。

[6] D. J. Evans, E. G. D. Cohen, and G. P. Morris, Phys. Rev. Lett. **71**, 2401 (1993). およびこれを引用している論文。

[7] S. Sasa and T. S. Komatsu, Prog. Theor. Phys. **103**, 1, (2000).

[8] S. Sasa, nlin.CD/0006042 (量の定義等が分かりにくいので近年のうちに改定版をつくる予定。)

[9] 間接的な証拠は、S. Sasa and T. S. Komatsu, Phys. Rev. Lett. **82**, 912, (1999). と [7] の議論にある。