統計力学における エルゴード問題

２０２３年１０月１０日

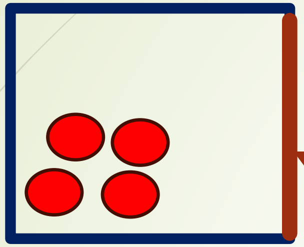
佐々真一

そもそもの問題：例

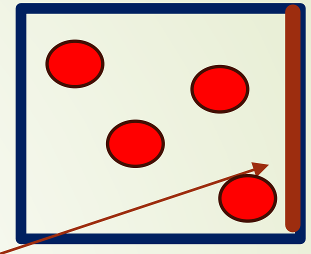
孤立古典系
（理想化）

例：左下にかたまっている

$t = 0$



十分に時間がたつ



$t \gg \tau_0$

緩和時間

平衡状態

右壁に働く
圧力 $p(\Gamma)$
（具体的な関数形は講義参照）

$\Gamma = (\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N, \boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_N)$

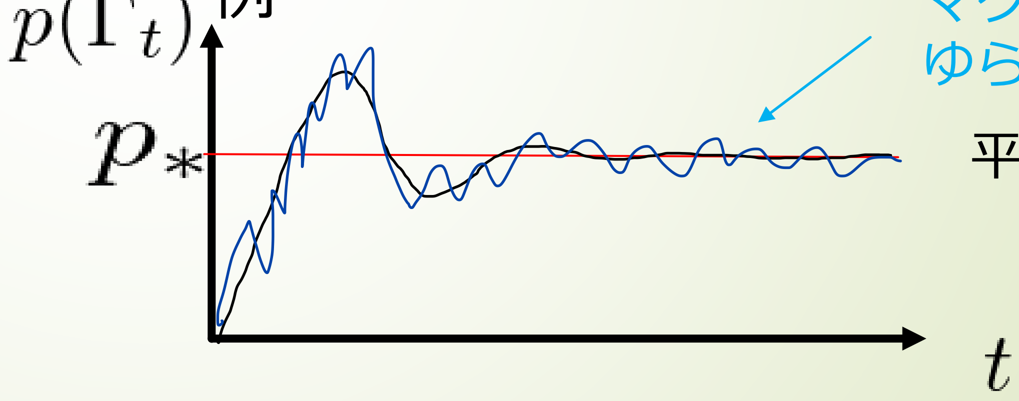
ハミルトン系 $H(\Gamma; V, N)$

時間発展 $\Gamma_0 \mapsto \Gamma_t$

エネルギー保存

$H(\Gamma; V, N) = E$

例



マクロ系では
ゆらぎが小さい

平衡状態での値

問：平衡値 p_* を $H(\Gamma; V, N)$ から運動方程式を解かずに決めよ

等重率の原理

ミクロカノニカル分布 $$\rho^{\mathrm{mc}}_{EVN}(\Gamma) = \frac{\delta(E - H(\Gamma; V, N))}{\Sigma(E, V, N)}$$

圧力の期待値 $$\langle p \rangle^{\mathrm{mc}}_{EVN} = \int d\Gamma p(\Gamma) \rho^{\mathrm{mc}}_{EVN}(\Gamma)$$

力学から定まる圧力の平衡値を高次元空間の積分で決める

基本仮設

$$\boxed{p_* = \langle p \rangle^{\mathrm{mc}}_{EVN}}$$

熱力学極限

$$N \to \infty, \quad V \to \infty, \quad E \to \infty$$

$$N/V \ \text{fixed}, \quad E/V \ \text{fixed}$$

例：体積Vの箱に閉じ込められた相互作用が無視できるN個の質点：

積分 $$\langle p \rangle^{\mathrm{mc}}_{EVN} = \frac{2E}{3V}$$ ⇒ 測定量の予言 $$p_* = \frac{2E}{3V}$$

典型性

ミクロカノニカル分布に従ってΓを選ぶと、圧力$p(\Gamma)$の値はマクロな系では、ほぼ確実に p_* である。

$$\forall\epsilon > 0 \quad \int d\Gamma \chi(|p(\Gamma) - p_*| \geq \epsilon)\rho^{\mathrm{mc}}_{EVN}(\Gamma) \to 0$$

大数の法則

熱力学極限

特性関数

$$\chi(\cdot) = \begin{cases} 1 & (\cdot \text{ is true}) \\ 0 & (\cdot \text{ is false}) \end{cases}$$

✓ 平衡状態において熱力学量の値が確定する。

✓ 一般に、物理量が局所量の和で表現される場合、大数の法則の成立が期待される。

ここまでは
エルゴード性は
関係ありません

問：ミクロカノニカル分布の根拠

時刻 t の圧力

$p(\Gamma_t)$ ：時間発展 $\Gamma_0 \mapsto \Gamma_t$ の結果で決まる

- マクロな系で十分時間がたったあとで

$$p(\Gamma_t) \sim \int d\Gamma p(\Gamma) \rho^{\mathrm{mc}}_{EVN}(\Gamma) \quad \bigstar$$ が成り立つのかどうか？

（「大体」等しいの意。この正確な表現のひとつはPage 8 参照）

- Page 2 例のように、圧力が平衡値 p_* に緩和する場合

$$\lim_{\tau\to\infty} \frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt p(\Gamma_t) = p_*$$ が成り立つので

$$\lim_{\tau\to\infty} \frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt p(\Gamma_t) = \int d\Gamma p(\Gamma) \rho^{\mathrm{mc}}_{EVN}(\Gamma) \quad \text{☆}$$

が成り立てば、ミクロカノニカル分布を使う根拠を与える。

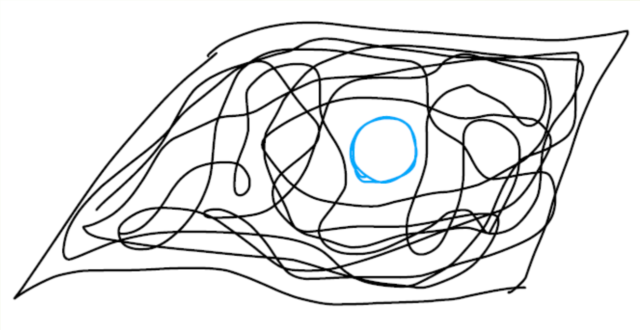
エルゴード性　（力学系の性質）

エネルギー面 $X \equiv \{\Gamma \in \mathbb{R}^{6N} | H(\Gamma; V, N) = E\}$ の部分集合 A に対して、その時間発展 $A_t \equiv \{\Gamma_t | \Gamma_0 \in A\}$ が不変、すなわち、 $\forall t,\ A_t = A$ が成り立つとせよ。このとき、A はエネルギー面全体、もしくは、Aの(6N-1)次元体積が 0 である。

（$|A| = \int d\Gamma \chi(\Gamma \in A) \rho^{\mathrm{mc}}_{EVN}(\Gamma)$ が 0 または 1 ということと等価）

ざっくりいうと、「運動方程式の解がつくる相空間の軌道（解軌道）はエネルギー面をくまなくまわる」あるいは「解軌道はエネルギー面をほぼ覆う」

エネルギー面上の解軌道（射影）



エルゴード性の破れの様子
「穴」があいている

カオス！（複雑な時系列）

結果

- ✓ 考えているハミルトン系がエルゴード性を満たすならば、エネルギー面内ほとんど全ての初期条件 Γ_0 に対して、Page 6 ☆が成り立つ。

  (成り立たない初期条件全体の集合の(6N-1)次元体積が０)

- ✓ 考えているハミルトン系がエルゴード性を満たすならば十分時間がたった後のマクロな系で期待される　Page 6 ★ の正確な表現

$$\lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\int_0^{\tau} dt\chi(|p(\Gamma_t)-p_*)|\geq\epsilon) = \int d\Gamma\chi(|p(\Gamma)-p_*)|\geq\epsilon)p^{\mathrm{mc}}_{EV\,N}(\Gamma)\to 0$$

エルゴード性を満たす　　熱力学極限

がエネルギー面内ほとんど全ての初期条件 Γ_0 に対して成り立つ。

エルゴード性の位置づけ

これらの結果により

「等重率の原理はエルゴード性で基礎づけられる」

としばしば表現される。

→ よくある質問へ

Q1　エルゴード性の成立

Q：別の問題に変えただけで、そもそもエルゴード性は成り立つのか？

A ：現在までに、エルゴード性が証明されているのは低自由度の限られた系でしかないです。統計力学が対象とするハミルトニアンに対してエルゴード性が成り立つかどうかは、意見の一致はないと思っています。
●個人的には、エルゴード性は破れているが、破れの程度が自由度とともに急速に減少する場合も結構あると予想しています。（予想なのではずれているかもしれません）確率過程＆ハミルトン系の素養があればエルゴード性の破れの自由度依存性を数値的に調べることは可能だと思いますが、誰かやりませんか？

Q2　収束する時間スケールの問題

Q: Page6 ☆左辺が収束する時間スケールはエネルギー面全体をまわるのに必要な「エルゴード時間」であり、実験と無関係で途方もなく長いのでは？

A：誤解です。長時間平均の値が定まる時間は、ハミルトニアンや物理量の詳細に依存します。Page2 の例題の場合、ハミルトン力学系の数値計算によると、実験と矛盾のない緩和時間が得られることは知られています。エルゴード時間は、（Q4の再帰性など）エルゴード性しか使わずに一般的な命題を述べるときに関わってきます。例えば、粒子の相互作用が不均一で色々な配置に応じて圧力の値が異なるような人工的な系での極めて遅い緩和を想定することも可能ですが、「そういう異常な場合も含めてエルゴード性だけで主張するときの話」と「平衡状態に健全に緩和する系に対して測定値と統計平均の関係を議論するときの話」は区別した方がいいと思います。

Q3　緩和の問題

Q:Page6の議論では、圧力が平衡値 p_*に緩和することを前提に議論をすすめたが、エルゴード性はそれも保証するのか？

A : Page2の例の様に観察されるミクロ力学の振る舞いを理論的に議論するには、初期条件の設定を明示し、圧力の期待値が長時間で平衡値 p_* に緩和することを示し、適切な極限（流体力学極限）でゆらぎが無視できることを示します。このような議論を一般的に展開するにはエルゴード性だけでは不十分だと考えられています。

Q4　再帰性の問題

Q: エルゴード性が成り立てば、Γ_t が初期条件 Γ_0にかぎりなく近づく時間 t があって緩和と矛盾するのでは？

A : エルゴード性が成り立つときに再帰性が生じるのは正しいです。その再帰時間は、だいたい、Q2で触れたエルゴード時間に対応します。実際に観測される緩和時間とは大きく離れているので、現実に観測されることはないです。再帰はNを固定して、時間を無限に大きくしたときに見られる現象で、Q3で説明した緩和に対する漸近的状況とは異なることを理解するのが大事だと思います。

Q5　熱力学極限との関係

Q: Page6の☆は熱力学極限において成立すればよいので、等号である必要はないのでは？

A : 等重率の原理の基礎づけという点からはその通りです。エネルギー面上での「穴」の体積が自由度に関してsub-exponential くらいでも、Page 6 の★は成り立つので、そういう性質を定式化するのが重要だと思います。Q1 の答えで触れた私の予想もそれを踏まえて書いたものです。力学系の性質を熱力学極限と組み合わせて統計力学の基礎を議論した研究もあります。

Q6　エルゴード測度の一意性

Q: エルゴード性を満たす不変測度は一意ではない、ということを聞いたのですが・・・

A : Page 7の定義は特定の測度を前提にしたものですが、一般に、力学系に対して不変測度を指定しそれに関するエルゴード性が定義されます。Page 7の意味でエルゴード性を満たすとき、エネルギー面上の標準的な測度に関して絶対連続な測度でエルゴード性を満たすものはミクロカノニカル分布によるものだけです。ただし、そうでない特異的な測度まで考えればエルゴード測度は無限にあります。この無限にある測度の中でミクロカノニカル分布によるものを「物理的な測度」として特徴づける研究もあります。

Q7　エルゴード不要論

Q：「統計力学の基礎にエルゴード性は関係ない」という言葉を見かけるのですが・・・

A: 等重率の原理を前提にして統計力学を構築する場合、エルゴード性を問題にする必要はありません。Page3で記した「仮設」を力学に基づいて理解しようとするとき、歴史的にも、現在の知見としても、エルゴード性について考えるのが最初の論点だと思います。

Q8　時間平均の解釈

Q: Page6☆のように時間平均を持ち出すのは測定時間間隔が有限なことから来ていて、時間平均として与えられる測定値を確率分布による平均を結びつける式だと学んだのですが・・・

A：誤解です。Page4 の典型性の議論から分かるようにある時刻での測定で確定します。「エルゴード性にもとづく統計力学では、測定値が時間平均として与えられる」という誤った議論を批判して、エルゴード不要論を述べている文も見かけますが、誤解に誤解を重ねているように思います。Page6☆の直前の式で書かれているとおり、測定値 p_* を力学の解 Γ_t と結びつけるために時間平均が考えられています。

Q9　エルゴード性 VS 典型性

Q:「エルゴード性 VS 典型性」という表現で、前者は古く、後者は現代的という言葉を見かけたのですが・・・

A : 私には意味がとれません。典型性の議論はミクロカノニカル分布を前提にして実験の測定値を確定値として与えるときの話です。他方、エルゴード性はミクロカノニカル分布の根拠を問うときの話です。したがって、そもそも VS で並べられるものではないと考えています。

Q10　量子性

Q: 孤立力学系として量子力学を考えるとどうなる？

Ａ: 考える論旨は基本的に共通していますが、古典にはない新しい様相もあります。古典力学系の持つ細かい相空間構造がなだらかになること、および、エネルギー固有状態が特別にもつ役割など統計力学の基礎に本質的に関わってくる可能性があります。［e.g. 古典力学では付加条件なしではエルゴード測度が一意にしぼれない問題がありますが（参照：Ｑ６）、量子系では（strong ETHが成立すれば）そういう問題があらわれない・・・とか。］

まとめ

統計力学に関わるエルゴード性について議論する場合：

✓ まず、（エルゴード性と関係なく）統計力学の基本的事項であるPage2 – Page4 を理解するのが大事です。

✓ その上で、エルゴード性に興味をもつなら、基本的命題であるPage6-Page8 を理解しましょう。

✓ Q1-Q10 などのようにたくさんの疑問が湧くかもしれません。分からないことを無理に「分かったこと」にするのでなく、興味の程度に応じてゆっくり勉強すればよいと思います。（私の解答にも不適切な記述があるかもしれません。）

謝辞

このノートに対して有用なコメントをいただいた沙川貴大さん、
白石直人、田崎晴明さんに感謝します。