等重率の原理とエルゴード性

**2018/10/14 京大　理　佐々真一**

# 1　等重率の原理

体積 $V = L^3$ の中に $N$ 個の相互作用する質点が閉じ込められており、質点の運動はハミルトン力学に従うとする。相空間座標を $\Gamma$ と書き、運動方程式の解による相空間座標の時間発展を $\Gamma \to \Gamma_t$ のようにあらわす。示量的物理量 $A = O(N)$ の古典力学による表現を $\hat{A}(\Gamma)$ と書く。以下、$O(N)$ のような記号は、$N/V$ を固定して、$N \to \infty$, $V \to \infty$ を考えるときの評価を表しているとする。熱力学量に対応する全ての $\hat{A}$ について、ある時定数 $\tau_A(N, V)$（典型的には、$\tau_A(N, V) \simeq L^2$）があって、

$$\lim_{K\to\infty} \lim_{N\to\infty} |\hat{A}(\Gamma_{K\tau_A(N,V)})/N - a_*| = 0 \tag{1}$$

となるとき、熱力学における平衡状態が実現したと考え、$a_*$ を $A/N$ の平衡値とよぶ。ハミルトニアンを $H(\Gamma; V, N)$ と書く。エネルギー一定面 $H(\Gamma; V, N) = E$ に対して、ミクロカノニカル分布を

$$\rho^{\rm mc}_{E,V,N}(\Gamma) = \frac{\delta(H(\Gamma; V, N) - E)}{\Sigma(E, V, N)} \tag{2}$$

で定義する。「運動方程式を解かなくても $a_*$ を

$$a_* = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \int d\Gamma \rho^{\rm mc}_{E,V,N}(\Gamma) A(\Gamma) \tag{3}$$

によって求めることができる。」という仮説が等重率の原理である。

# 2　等重率の原理の判定条件？

講義では、等重率の原理を基本原理とした。つまり、それは何か他の条件から導かれるものではないと考えたが、「与えられたハミルトニアン $H(\Gamma; V, N)$ に対して、(3) の成否を判定できる条件は何か？」を問うのは自然である。例えば、時間発展 $\Gamma \to \Gamma_t$ でエネルギーが保存するので、$A(\Gamma_t)$ の値はエネルギー面 $H(\Gamma; V, N) = E$ 上にある $\Gamma$ に対する $A(\Gamma)$ の値のどれかである。ここで、その面上の $A(\Gamma)/N$ の値の分布をみると、ある値の周りに鋭く局在している。大数の法則である。だから、時間が十分にたったとき $A(\Gamma_t)/N$ の値はその値になっていると考えるのはもっともらしい。もっともらしいが、(3) は時間発展と独立に議論される性質ではないので、（時間発展と無関係な）大数の法則が (3) の成否を与えるわけではない。

歴史的には、ボルツマンは、任意の $\Gamma(0)$ に対して

$$\lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \int_0^t ds A(\Gamma_s) = \int d\Gamma \rho^{\rm mc}_{E,V,N}(\Gamma) A(\Gamma) \tag{4}$$

が成り立てば、(3) が分かることに着目した。そのため、(4) が成り立つための条件として、「運動方程式の解軌道がエネルギー面を埋め尽くす」ことを基本仮説とした。これが「ボルツマンのエルゴード仮説」である。これは素朴過ぎて成り立たないことはすぐに分かり、ボルツマンのエルゴード仮説は棄却された。

その後、(4) をめぐる理解は大きく発展し、「エルゴード理論」とよばれる体系ができた。様々な分野で（少しづつ異なった意味で）「エルゴード性」という言葉が使われている。このことが等重率の原理とエルゴード性の関係に混乱をもたらすことにもなった。従って、「エルゴード性」という言葉に対しては警戒するのが無難である。その言葉が使われている文脈や背景を適切に推測し条件等を補間する、あるいは、定義を確認する、などを通じて議論を成立させる努力が必要である。ましてや、統計力学を学び始めた学部生がこの多義な言葉を振り回すのはやめた方がいい。この注意を踏まえた上で、以下では、ボルツマン以後の研究で、「ハミルトン力学系におけるエルゴード性」について紹介し、等重率の原理 (3) との関係を議論する。

## 3　ハミルトン力学系におけるエルゴード性

ハミルトン力学系におけるエルゴード性とは、「(6N-1) 次元エネルギー面において時間発展で不変な（エネルギー面全体以外の）領域の (6N-1) 次元体積は 0 である」という性質である。つまり、エネルギー面のどこから出発しても、だいたいエネルギー面内をくまなくまわる。この「だいたい」というのを測度をつかって明確に表現したものになっている。この条件は、(2) で積分して値が定まる任意の $f(\Gamma)$ に対して、

$$\lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\int_0^t dsf(\Gamma_s)=\int d\Gamma\rho^{\rm mc}_{E,V,N}(\Gamma)f(\Gamma) \tag{5}$$

がほとんど全ての $\Gamma(0)$ で成り立つ、ということと等価である。最後の「ほとんど全ての $\Gamma(0)$ で成り立つ」という言葉は、等号が成立しない $\Gamma(0)$ の集合（以下、「例外集合」とよぶ）の (6N-1) 次元体積が 0 である、ということを意味する。

## 4　エルゴード性⇒等重率の原理？

考えているハミルトン力学系がエルゴード性を満たす、と仮定する。その場合、初期条件を「例外集合」に選ばない限り、等重率の原理が成り立つ。このことから、等重率の原理が成り立つかどうかは「ハミルトン力学系におけるエルゴード性」の有無によって判定できる、とする説明は（ある程度）流布している。しかし、初期条件が「例外集合にない」という条件は何によって保証されるのだろうか。

ここで、「例外集合」の $(6N-1)$ 次元体積がゼロだから観測される現象と関係ないと宣言できるわけではないことに注意したい。相空間の体積を尊重するならその理由が必要である。その問題を回避するために、僅かなノイズを加えて定式化したのちにノイズをゼロにする考えがある。これは「物理的測度の選択問題」に対するひとつのアプローチとして知られている。もっともらしいが、これはノイズの性質に依存する。そういう議論をするならば、自然法則として不可避的なノイズを考えることが必要になる。例えば、古典力学は量子力学から何らかの極限として得られると考え、量子力学で定式化してその後に古典極限をとる。不確定性関係により、相空間に対する体積要素は他の測度に比べて特権的になり、体積ゼロの例外集合が初期条件として選ばれることがないのはもっともらしい。この方向の研究の進展は理解していないが、「古典化」が簡単でないので、具体的に研究をすすめるのは容易ではないだろう。あるいは、「物理的初期条件」のような定式化ができて、初期条件を例外集合にしないように回避するというアイデアがあるかもしれない。筆者には、これは「ランダム列の判定問題」と似ているように見えて、原理的に出来ないと予想しているが、明示的に議論をつめたわけではない。

いずれにせよ、現時点では、「初期条件が例外集合にないこと」は追加要請するしかない。つまり、エルゴード性は等重率の原理の十分条件ではない。

## 5　等重率の原理⇒エルゴード性？

次に、考えているハミルトン力学系がエルゴード性を満たさないとする。エルゴード性が成り立たないので、ある有限体積の領域があって、その領域に初期条件を選ぶと、相空間全体に広がっていかない。ここで、その領域はエネルギー面全体の体積 $e^{O(N)}$ に比べれば圧倒的に小さな $O(N)$ くらいの体積（以下、体積 $e^{o(N)}$ の領域を「小さな穴」とよぶ）であってもエルゴード性は成り立たないことに注意したい。この「小さな穴」の影響によるエルゴード性の破れを検出するには、$e^{O(N)}$ オーダーの時間尺度で系の振る舞いを見る必要がある。従って、緩和時間 $\tau_A(N,V)$ でスケールされる時間領域が問題となる等重率の原理が成り立つことは可能である。つまり、エルゴード性は等重率の必要条件でない。

実際に、「小さな穴」があく可能性について考えよう。低自由度ハミルトン力学系において、パラメータを変化に対して規則的な運動から不規則な運動に分岐していく様子は丁寧に調べれられており、規則的な運動がある領域を部分的に残しつつ、それが次第に消滅する様子が分かっている。大自由度ハミルトン系の分岐については簡単ではない

が、少なくともあるパラメータ領域で規則的な運動と不規則的な運動が共存しているのは間違いない。ただし、体積 $e^{O(N)}$ のカオス領域があらわれるとき、「小さな穴」に閉じ込められた規則的な運動を直接数値実験で検出することはできない。そこで、そのような場合、rare event sampling 的なことを考えて、「小さな穴」に閉じ込められた規則運動を検出するのは面白い研究課題かもしれない。そのような例を明示的に見つけると、「熱力学が成り立ち、統計力学の処方箋が有効なのに、ハミルトン力学系の意味でエルゴード性が成り立っていない」ことを主張することになるので、教育的題材になるだろう。逆に、もし、大自由度ハミルトン系ではそういうことは稀で、熱力学極限のスケーリングが成り立つと、低温液体であっても「小さな穴があいていない」なら、その理由を知りたい。力学系としてチャレンジングな課題となるだろう。

ちなみに、この「小さな穴」の問題も量子系では様相が異なる。複雑な分岐を示す低自由度ハミルトン系に対応する量子力学では、はっきりした分岐を示さずにある種の複雑さが連続的に変わっていく。大自由度量子系はさらに難しいが、この振る舞いから想像するに、問題となっている「小さな穴」はあらわれないかもしれない。

## 6　熱力学的エルゴード性？

以上のようなことを考えていると、そもそも「力学系としてのエルゴード性」は自由度と関係がない性質なので、もっと大自由度性を尊重した（別の意味の）「エルゴード性」を提案したくなる。例えば、「エネルギー面で（面全体でない）不変領域の 体積が $e^{o(N)}$ である」という性質を「熱力学的エルゴード性」と呼ぶのは適切に思える。（注：佐々が今考えた造語なので、外では使わないように。）このときは、熱力学に対応する全ての示量変数に対して

$$\lim_{K\to\infty}\lim_{N\to\infty}\int_0^{K\tau_A(N,V)} ds\hat{A}(\Gamma_s)/N = \lim_{N\to\infty}\int d\Gamma\rho^{\mathrm{mc}}_{E,V,N}(\Gamma)A(\Gamma)/N \tag{6}$$

を導くスケーリング関係式が成り立たない初期条件の集合は割合は $N$ 粒子系に対して $e^{-O(N)}$ 程度であろう。実際、熱力学を念頭においた分子動力学の数値実験で統計量を計算するときは (6) に相当することを確認しているように思う。熱力学的エルゴード性は等重率の原理と関係が深い（必要十分条件？）と期待されるが、論理的に検証したわけではない。

## 7　メッセージ

筆者の学生時代、「等重率の原理は力学系のエルゴード性によって基礎づけられる。」という文がほとんど説明がないままに紹介されていることが多かった。その中には非論理的な間違った説明もあり、非常に混乱していた。「力学系のエルゴード理論と統計力学の基礎との関係は明らかではない。」という注釈をつける文献もあったが、それに出会うのはたまたまでしかなかった。「等重率の原理がエルゴード性によって基礎づけられる」という簡単なフレーズだけが広がり、思考停止したままそのフレーズを繰り返すようになってしまったのだろう。

現在、「等重率の原理がエルゴード性によって基礎づけられる」という簡単なフレーズを見かけることは（３０年前よりは）少なくなり、「自由度と関係のない性質であるエルゴード性が等重率の原理と直接関わることはないだろう」という知見が広まってきた。その一方、「エルゴード性は等重率の原理と無関係である」という別の簡単なフレーズが思考停止的に使われるのもみかけるようになってきた。確かに、エルゴード性は等重率の原理の必要条件でも十分条件でもないだろうが、両者の等価性を阻むのは「初期条件の例外集合」と「相空間の小さな穴」という微妙な論点であり、無関係の一言で切って捨てられるものではない。むしろ、これくらいの小さな問題しかないくらいに大ざっぱには関係が深いという見方もありえる。さらにいえば、4 節と 5 節で言及したように、どちらの問題も量子力学の記述では解消されうるかもしれない。時代を超えて、また自戒を込めて、簡単なフレーズによる思考停止には十分に気をつけたい。

近年では、孤立量子系の研究が進展し、統計力学の基礎を量子力学にもとづいて理解しようとする機運が高まっている。ハミルトン力学系のエルゴード性と等重率の原理の関係を再考するよい機会かもしれない。