情報統計力学
第2回
（改訂版）

2006年　前期
伊庭幸人

## 根本的な疑問1

物理の基本法則
（ニュートン力学，量子力学）との関係は？

決定論的なニュートン力学から確率の出てくる仕組みは一体何か？　なぜ十分統計量が保存量になるのか？　その条件は？

なぜ基準となる測度は $\prod_i dx_i \, dp_i$ か？

## 根本的な疑問2

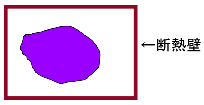
「定常状態」といっているが，どういう状態か．
熱力学でいう平衡状態
⇒　統計力学の内部での特徴付けは？

$$p(x,p) \propto \exp(-\beta E(x,p))$$

というが，エネルギーは保存量だから一定では
そもそも，どういう系を記述しているのか？

## 等確率の原理

今回～次回は疑問1のほうを考える




外部とエネルギーの出入りのない系が
じゅうぶん複雑なら，
観察する時間が無限大の極限で

与えられたエネルギーの
状態はすべて等確率で出現する

## コメント

- 等重率の原理ともいう
- 連続変数（古典系）なら

δ関数があやしい・・

$$\propto \delta(E(p,x) - E_0) \prod_i dx_i \prod_i dp_i$$

- エネルギー以外の保存量
（ex.角運動量）があれば
「保存則をみたす状態はすべて等確率」

## やさしい部分

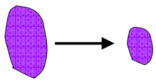
ニュートンの運動法則のもとで一様密度

$$\prod_i dx_i \prod_i dp_i$$

が不変密度になる

（解析力学の）リウビルの定理

## ヤコビアン



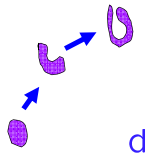
$$\gamma = \varphi(\alpha)$$

一変数 $|\delta\gamma| = |\varphi'(\alpha)||\delta\alpha|$

多変数（$\alpha$，$\gamma$ が高次元ベクトル）

$$\mathrm{vol}(\delta\gamma) = \left|\det\left(\frac{\partial\varphi}{\partial\alpha}\right)\right| \mathrm{vol}(\delta\alpha)$$

## 不変密度



$$\prod_i dx_i \prod_i dp_i$$

$$\det\left(\frac{\partial\varphi_t(\alpha)}{\partial\alpha}\right) = 1$$

$$\alpha = (\{x_i(0)\}, \{p_i(0)\})$$
$$\varphi_t(\alpha) = (\{x_i(t)\}, \{p_i(t)\})$$

## 難しい部分

どういう条件のもとで
不変密度が一意性をもつか
（i.e. 任意の初期条件から実現されるか）

### エルゴード問題

・反例はいくらでもある
・簡便な「判定法」「十分条件」が欲しいが，ほぼ無理？
・「一意的」でなくてもよいかも 「等価なものが多数」等？

## 今日の講義：やさしい部分

@ まず，簡単な場合で直観的な説明．

@ 次に，一般の場合に簡単に触れる．
⇒ 詳しくは解析力学の教科書

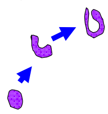
## ニュートン力学 （ポテンシャル力）

$$m\frac{d^2x_i}{dt^2} = -\frac{\partial U}{\partial x_i} \qquad E = \sum_i \frac{1}{2}m\left(\frac{dx_i}{dt}\right)^2 + U(\{x_i\})$$

$$\boxed{p_i = m\frac{dx_i}{dt}}$$

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{m}p_i$$
$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x_i} \qquad E = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + U(\{x_i\})$$

## 状態空間の体積保存の証明



$$\varphi_{s+t}(\alpha) = \varphi_t(\varphi_s(\alpha))$$

$$\det\left(\frac{\partial\varphi_{s+t}(\alpha)}{\partial\alpha}\right) = \det\left(\frac{\partial\varphi_s(\alpha)}{\partial\alpha}\right)\det\left(\frac{\partial\varphi_t(\gamma)}{\partial\gamma}\right)$$
$$\gamma = \varphi_s(\alpha)$$

$$\frac{d}{dt}\left[\det\left(\frac{\partial\varphi_t(\alpha)}{\partial\alpha}\right)\right]_{t=0} = 0 \quad \Rightarrow \forall s,\ \frac{d}{ds}\det\left(\frac{\partial\varphi_t(\alpha)}{\partial\alpha}\right) = 0$$

## 時刻0でのヤコビアンの微分

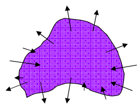
$$\frac{d}{dt}\left[\det\left(\frac{\partial\varphi_t(\alpha)}{\partial\alpha}\right)\right]_{t=0}$$

$$=\mathrm{tr}\left[\frac{d}{dt}\frac{\partial\varphi_t(\alpha)}{\partial\alpha}\right]_{t=0} = \mathrm{div}\left[\frac{d}{dt}\varphi_t(\alpha)\right]_{t=0}$$

$$\alpha=\varphi_0(\alpha)=(\{x_i(0)\},\{p_i(0)\})$$
$$\varphi_t(\alpha)=(\{x_i(t)\},\{p_i(t)\})$$

## divがゼロを示す

$\prod_i dx_i \prod_i dp_i$ 不変密度になる



Gaussの定理

$$\mathbf{div}\left(\frac{d\boldsymbol{x}}{dt},\frac{d\boldsymbol{p}}{dt}\right)_{\boldsymbol{at}\ (\boldsymbol{x},\boldsymbol{p})}$$

$$=\sum_i\left[\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{dx_i}{dt}+\frac{\partial}{\partial p_i}\frac{dp_i}{dt}\right]=0$$

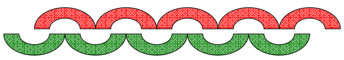
↑pを含まない ↑xを含まない

## Leap-Frog法による離散化

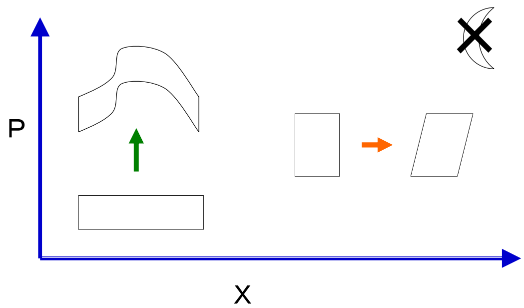
$$p_i(t+1/2)=p_i(t)-\frac{\epsilon}{2}\frac{\partial U(x)}{\partial x_i}\bigg|_{x=x(t)}$$

$$x_i(t+1)=x_i(t)+\epsilon\frac{p_i}{m}\bigg|_{p=p(t+1/2)}$$

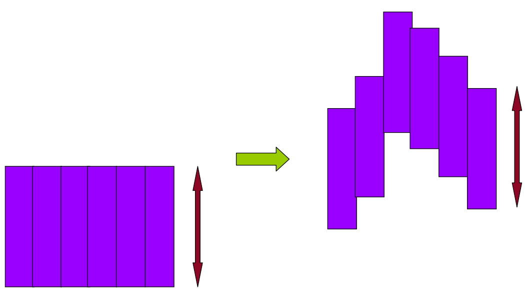
$$p_i(t+1)=p_i(t)-\frac{\epsilon}{2}\frac{\partial U(x)}{\partial x_i}\bigg|_{x=x(t+1)}$$



## 体積保存の直観的説明




## 体積保存

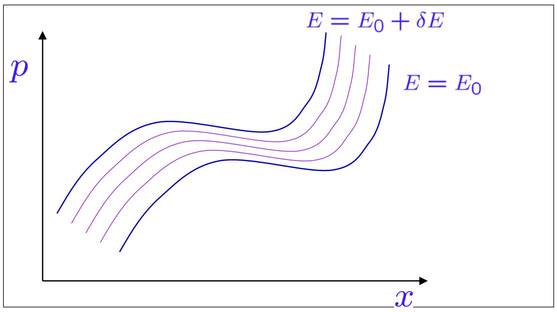


## エネルギー保存則

$$\frac{dE}{dt}=\frac{d}{dt}\left[\frac{1}{2}m\left(\frac{dx_i}{dt}\right)^2+U(\{x_i\})\right]$$

$$=\sum_i\left\{\frac{dx_i}{dt}\left[m\frac{d^2x_i}{dt^2}+\frac{\partial U(\{x_i\})}{\partial x_i}\right]\right\}=0$$

## ミクロカノニカル分布




## どのように「広がる」か

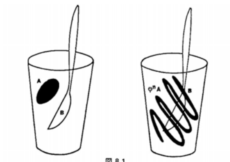


図 8.1.

蔵本由紀（岩波　物理の世界）より

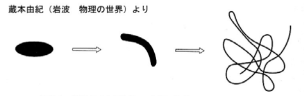
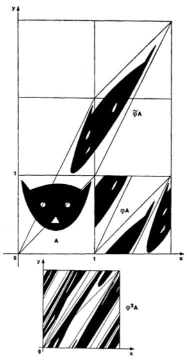
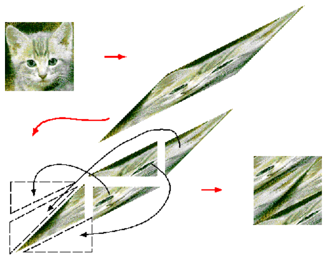


図 3.1　状態点で充満した $\Gamma$ 空間の体積要素が黒く塗りつぶされた領域で示されている．時間とともにこの体積要素は引き伸ばし折りたたみなどによってきわめて複雑な構造をもつフィラメント状のオブジェクトに変形すると期待される．

## アーノルドの猫（オリジナル）



## アーノルドの猫（写真版）



## 平衡統計力学の起源

ニュートンの運動方程式が状態空間の体積を保存することが基本

決定論からランダムネスが現れるようにみえる現象は他にもあるが，統計力学のような簡明な記述は一般にはできない

ex. 乱流

## 違う変数では？

たとえば $x$ の代わりに $s = f^{-1}(x)$ を使うと

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{m}p \qquad \longrightarrow \qquad \frac{ds}{dt} = \frac{1}{f'(s)}\frac{1}{m}p$$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial U(x)}{\partial x} \qquad \qquad \frac{dp}{dt} = -\frac{1}{f'(s)}\frac{\partial U(f(s))}{\partial s}$$

$dxdp$ は不変測度だが $dsdp$ は不変ではない！

$dsdx$ を使って普通と同じに統計力学をすることはできない

## 疑問1

変数を自由に選べないのは不便

⇒　$x$ だけでなく対応する　$p$　も変換したら
状態空間の体積保存(リウビルの定理)を
満たすことが可能なのでは？

実は体積保存より強い条件を課すのが自然
⇒　正準変換(シンプレクティック変換)

## 疑問2

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{m}p$$
← 右辺に $x$ が含まれていたら必ず駄目か？

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial U(x)}{\partial x}$$
← 右辺に $p$ が含まれていたら必ず駄目か？

有名な例　磁場中の荷電粒子の運動

力が速度と磁場のベクトル積に比例　(ローレンツ力)

## ハミルトン形式

ハミルトン形式の力学
正準変換(シンプレクティック変換)の導入

⇒　解決
半年ぶんの「解析力学」の授業が必要

以下はダイジェスト版

## ハミルトン方程式

ハミルトニアン:　$H(x,p)$

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H(x,p)}{\partial p_i}$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H(x,p)}{\partial x_i}$$

普通の「ポテンシャル力」のニュートンの運動方程式も
磁場中の粒子の運動もこの形にかける

## 運動方程式(ポテンシャル力)

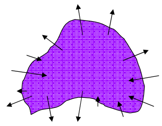
$$H(x,p) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_i U(x_i)$$

$$\left.\begin{array}{ll} \dfrac{dx_i}{dt} = \dfrac{\partial H(x,p)}{\partial p_i} & \dfrac{dx_i}{dt} = \dfrac{1}{m}p_i \\ \dfrac{dp_i}{dt} = -\dfrac{\partial H(x,p)}{\partial x_i} & \dfrac{dp_i}{dt} = -\dfrac{\partial U}{\partial x_i} \end{array}\right\} \; m\frac{d^2x_i}{dt^2} = -\frac{\partial U}{\partial x_i}$$

$p_i = mv_i$　$H = \sum_i \frac{1}{2}mv_i^2 + \sum_i U(x_i)$　　Hの値は全エネルギーに等しい

## 性質1:　リウビルの定理

$$\left(\frac{dx_i}{dt}, \frac{dp_i}{dt}\right) = \left(\frac{\partial H}{\partial p_i}, -\frac{\partial H}{\partial x_i}\right)$$



Gaussの定理

$$\mathrm{div}\left(\frac{dx}{dt}, \frac{dp}{dt}\right)_{at\ (x,p)}$$

$$= \sum_i \left[\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial x_i}\right] = 0$$

↑　こんどは対角要素があるが打ち消しあう

「ハミルトン方程式によって動かす」変換は保測変換！

## 性質2： エネルギー保存則

$$\frac{dH(x(t),p(t))}{dt} = \sum_i \left\{ \frac{\partial H}{\partial x_i}\frac{dx_i(t)}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{dp_i(t)}{dt} \right\}$$

$$= \sum_i \left\{ \frac{\partial H}{\partial x_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial x_i} \right\} = 0$$

$$\left(\frac{dx_i}{dt}, \frac{dp_i}{dt}\right) = \left(\frac{\partial H}{\partial p_i}, -\frac{\partial H}{\partial x_i}\right)$$

## ハミルトン方程式の別の表示

$$\alpha = {}^t(\{x_i\},\{p_i\}) \qquad J = \begin{pmatrix} O & I \\ -I & O \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial H}{\partial \alpha} = {}^t\left(\left\{\frac{\partial H}{\partial x_i}\right\}, \left\{\frac{\partial H}{\partial p_i}\right\}\right)$$

$I$: identity matrix

$$\frac{d\alpha}{dt} = J\frac{\partial H}{\partial \alpha}$$

## ハミルトン方程式の形を変えない変換

$$\alpha = f(\tilde{\alpha})$$

$$K(\tilde{\alpha}) = H(f(\tilde{\alpha}))$$

$$\frac{\partial K}{\partial \tilde{\alpha}} = \left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]^T \frac{\partial H}{\partial \alpha} \qquad \frac{d\alpha}{dt} = \frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\frac{d\tilde{\alpha}}{dt}$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = \left\{\left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]\right\}^{-1} J \left\{\left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]^T\right\}^{-1} \frac{\partial H}{\partial \alpha}$$

## シンプレクティック変換（正準変換）

$$J^{-1} = J$$

$$\left\{\left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]\right\}^{-1} J \left\{\left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]^T\right\}^{-1} = J$$

$$\left\{\left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]\right\} J - J \left\{\left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]^T\right\}^{-1} = 0$$

$$\left\{\left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]\right\} J \left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]^T = J$$

## シンプレクティック群

$$\left\{\left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]\right\} J \left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]^T = J$$

行列 $Q$ $\qquad Q^T J Q = J$

$Q \in Sp(n)$ ：symplectic group

## ポアソンの括弧式であらわす

$$\alpha = {}^t(\{x_i\},\{p_i\}) \qquad \left\{\left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]\right\} J \left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]^T = J$$

$$\alpha = f(\tilde{\alpha})$$

$$\{A,B\}_{x,p} = \sum_i \left[\frac{\partial A}{\partial x_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial x_i}\right]$$

$$\{\tilde{x}_i, \tilde{p}_j\}_{x,p} = \delta_{ij}$$

$$\{\tilde{x}_i, \tilde{x}_j\}_{x,p} = 0 \qquad \{\tilde{p}_i, \tilde{p}_j\}_{x,p} = 0$$

## 微分形式であらわす

$\alpha = {}^t(\{x_i\},\{p_i\})$

$\alpha = f(\tilde{\alpha})$

$$\left\{\left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]\right\} J \left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]^T = J$$

$$\sum_i dx_i \wedge dp_i = \sum_i d\tilde{x}_i \wedge d\tilde{p}_i$$

正準2-形式の保存 ⇒ シンプレクティック変換

左辺をばらして基底で展開すると，じつはポアソンの括弧式

## 座標変換 ⇒ 運動量の変換

$x = \phi(\tilde{x})$

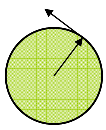
$$p = \left\{\left[\frac{\partial \phi(\tilde{x})}{\partial \tilde{x}}\right]^T\right\}^{-1} \tilde{p}$$

$$J = \begin{pmatrix} O & I \\ -I & O \end{pmatrix}$$

$$\left\{\left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]\right\} J - J \left\{\left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]^T\right\}^{-1} = 0$$

$$\tilde{p} = \left[\frac{\partial \phi(\tilde{x})}{\partial \tilde{x}}\right]^T p$$

## 正準運動量の例



$x = r\cos\theta$

$y = r\sin\theta$

$$\begin{pmatrix} p_r \\ p_\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -r\sin\theta \\ \sin\theta & r\cos\theta \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \end{pmatrix}$$

$$p_r = (\cos\theta, \sin\theta)\begin{pmatrix} p_x \\ p_y \end{pmatrix} \quad p_\theta = r(-\sin\theta, \cos\theta)\begin{pmatrix} p_x \\ p_y \end{pmatrix}$$

角運動量 $p_\theta = rmv = r^2 m\omega$

## 保測変換とシンプレクティック変換

$x = \phi(\tilde{x})$

$$p = \left\{\left[\frac{\partial \phi(\tilde{x})}{\partial \tilde{x}}\right]^T\right\}^{-1} \tilde{p}$$

図形的に体積保存がわかる

$$\left\{\left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]\right\} J \left[\frac{\partial f(\tilde{\alpha})}{\partial \tilde{\alpha}}\right]^T = J$$

両辺のdetを取る
ヤコビアンの絶対値が1はすぐわかる

$$\sum_i dx_i \wedge dp_i = \sum_i d\tilde{x}_i \wedge d\tilde{p}_i$$

保存される微分形式の外積は
保存される ⇒ 最高次は体積要素

➡ シンプレクティック変換は保測変換だが，逆は真でない

## 正準座標での統計力学

任意の正準座標と正準運動量の組

＝ 静止系のデカルト座標・運動量から
シンプレクティック変換で移れるもの

について，状態空間の体積保存が成立

この範囲でどの座標を使っても同じ統計力学となる
ことは，シンプレクティック変換の保測性が保障

## 解析力学（数学系）

＠アーノルド「古典力学の数学的方法」（岩波）

日本語は品切れ．

Mathematical Methods of Classical Mechanics

＠伊藤 秀一「常微分方程式と解析力学」

共立講座 21世紀の数学

リストマニア！＠アマゾン
解析力学

# 解析力学（物理系）

- @ ランダウ・リフシッツ「力学」 東京図書
- @ 高橋康 「量子力学を学ぶための解析力学」 講談社
- @ ゴールドスタイン「古典力学」（上・下） 吉岡書店
- @ 並木美喜雄「解析力学」 丸善
- @ 山本義隆・中村孔一「解析力学」（I, II） 朝倉書店

難度ではなく，マニア度（？）の順