

確率過程の統計力学的基礎

京大理 西 川 恭 治

統計力学は、ミクロな世界とマクロな世界を橋渡しする学問だと云われる。ミクロな世界は、粒子系の力学の方程式で記述され、その方程式は時間反転に関して不変であり、かつ粒子系の運動を、与えられた初期条件の下では完全に記述している。一方マクロな世界は、しばしば確率過程として記述され、またそれを支配する方程式は時間反転に関して不変ではない。ここで問題にするのは、この二つの異なる記述の間の橋渡しがどのように行われて来ているかである。

粒子系の力学過程を記述する仕方は二通りある。一つは、 P 空間で定義された確率密度関数 $\rho(p^N, q^N, t) \equiv \rho(t)$ に対する Liouville の方程式

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = -\{H, \rho(t)\} \equiv -i L \rho(t) \quad (1)$$

であり、今一つは、物理量 $A(p^N(t), q^N(t)) \equiv A(t)$ に対する Hamilton の方程式

$$\frac{d A(t)}{d t} = \{H, A(t)\} = i L A(t) \quad (2)$$

である。ここに H は系のハミルトニヤン、 $\{A, B\}$ はポアツソンの括弧

$$\{A, B\} = \sum_{j=1}^N \left[\frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial B}{\partial q_j} - \frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial B}{\partial p_j} \right] \quad (3)$$

で、

$$iL = \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial}{\partial q_j} - \frac{\partial H}{\partial q_j} \frac{\partial}{\partial p_j} \right\} \quad (4)$$

は Liouville operator と呼ばれる。

一方確率過程も、上に対応した二つの記述が可能である。前者でよく出て来る形は、系が状態 α にある確率分布関数 $\rho(\alpha, t)$ に対する Master Equation

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\alpha, t) = \int d\alpha' \{ W_{\alpha' \alpha} \rho(\alpha', t) - W_{\alpha \alpha'} \rho(\alpha, t) \} \quad (5)$$

であり、後者でよく出て来る形は、物理量 $A(t)$ に対する Langevin の方程式

$$\frac{dA(t)}{dt} = -rA(t) + f(t) \quad (6)$$

である。(5)で $W_{\alpha' \alpha}$ は、単位時間に状態 α' から α へ遷移する確率を表わし、右辺の二つの項は、夫々、 α' から α へ入って来る項 (gain term) と α から α' へ出て行く項 (loss term) を表わす。(6)の右辺第一項は、物理量 A に働く系統的な摩擦力を表わし、第二項は A の運動をひき起す random force を表わす。明らかに(5)も(6)も時間反転に関して対称でない。この「非可逆性」は、(5)の場合は、通常 H -一定理と呼ばれるもので表わされている。それによると、(5)の解は、 t を増すと共に、詳細均衡の条件

$$W_{\alpha' \alpha} \rho_{eq}(\alpha') = W_{\alpha \alpha'} \rho_{eq}(\alpha) \quad (7)$$

をみたす解 $\rho_{eq}(\alpha)$ へ単調に接近する。一方(6)の方では、例えば次のような表わし方がある。すなわち、今 random force の時間相関を

$$\langle f(t) f(t') \rangle = 2D \delta(t-t') \quad (8)$$

と仮定すると、 A の時間相関は

$$\langle A(0)A(t) \rangle = \exp[-\gamma t] \langle A^2(0) \rangle \quad (9)$$

という形で単調に消え失せて行く。ところで(8)の仮定は、random forceの相関時間が A の相関時間 $1/\gamma$ に比べて充分短いという意味であり、実はこれは、 $\gamma = \text{Const.}$ という仮定からむしろ要請される条件であることが示されている。¹⁾ 実際 γ と D の間にはFluctuation-Dissipation theoremとして知られている一定の関係があることが直ちに証明できる。

$$2D = \gamma \langle A^2 \rangle. \quad (10)$$

(5)及び(6)は、ある種のMarkoff random processを記述しており、特にGaussian random processに対しては、これらはFokker-Planck方程式に還元される。

次の(5)、(6)のような方程式が、どのような物理的条件のもとで(1)、(2)から導かれるかを考察する。

力学から統計力学への移行は、精密な記述から粗な記述への移行に対応するが、これは数学的には、力学系を記述する関数空間での適当な射影で表わされるであろう。²⁾ そこで、次の性質をみたす射影演算子 P を導入する。

$$P^2 = P, \quad P(1-P) = 0, \quad P[f_1 + f_2] = Pf_1 + Pf_2$$

$$P \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} P$$

このような射影演算子を用いて、まず(1)から(5)への移行の条件を考察してみよう。

$$\rho(t) = \rho^{(1)}(t) + \rho^{(2)}(t) \quad (12)$$

$$\rho^{(1)}(t) = P \rho(t), \quad \rho^{(2)}(t) = (1-P) \rho(t) \quad (13)$$

と表わすと，簡単な計算から直ちに次の式がえられる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho^{(1)}(t) = & -i P L \rho^{(1)}(t) \\ & + \int_0^t ds K(s) \rho^{(1)}(t-s) + I(t) \end{aligned} \quad (14)$$

$$\rho^{(2)}(t) = U(t) \rho^{(2)}(0) - i \int_0^t ds U(t-s) (1-P) L \rho^{(1)}(s) \quad (15)$$

ここに

$$U(t) = \exp[-i t (1-P) L] \quad (16)$$

$$K(t) = -P L U(t) (1-P) L \quad (17)$$

$$I(t) = -i P L U(t) \rho^{(2)}(0) \quad (18)$$

ここまでは全く形式的な(1)の書きかえにすぎない。我々が問題にするのは，当然 $\rho^{(1)}(t)$ の方だが，(14)式は，通常の Master Equation と異なる二つの特徴を備えている。一つは， $\rho^{(1)}(t)$ の時間変化がその時刻での $\rho^{(1)}$ の値のみならず，過去の値 $\rho^{(1)}(t-s)$ にもよっていることであり，今一つは， $\rho^{(1)}$ と直交する部分 $\rho^{(2)}$ の初期値に依存する項を含むことである。この二つの性質は，non-Markoff process に特徴的なものと考えられる。

このような non-Markoffian equation が Markoffian master equation (5) の形に還元されるためには，通常，二つの明瞭に区別される time scales τ_1 と τ_2 ($\tau_2 \gg \tau_1$) が存在し，かつ適当な初期条件が選定されればよいと考えられている。実際この場合には， P として slow process を拾い出し， $(1-P)$ としては fast process のみを拾い出すように選ぶと，(17)，(18) から明らかなように， $K(t)$ ， $I(t)$ は fast process で支配されるようになる。従って適当な初期条件 $\rho^{(2)}(0)$ が選べれば， $I(t)$ は無視することができて，(14)は

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho^{(1)}(t) \doteq \left\{ -i P L + \int_0^t ds K(s) \right\} \rho^{(1)}(t) \quad (19)$$

と近似することができる。これは，多少一般化されてはいるが，(5) と似た形のマルコフ型の方程

式である。数学的には、(19)は(14)から、 τ_1 / τ_2 についての展開の最低次として求めることができる。ただし勿論、初期条件に対する要請を別々に加えなければならない。

二つの distinct time scales が存在するという事は、その力学系の運動を記述するのに適当な展開パラメーターが存在するという事に関係している。例えば Weakly interacting system では、相互作用エネルギーの運動のエネルギーに対する比 λ が展開パラメーターとなり、 $\tau_1 / \tau_2 = O(\lambda^2)$ となるような二つの time scales が存在する。稀薄気体では、粒子間力の range 内にある粒子数 c が展開パラメーターとなり、 $\tau_1 / \tau_2 = O(c)$ とえらぶことができる。電子一ケあたりの体積とデバイ球の体積の比 g が展開パラメーターとなり、 $\tau_1 / \tau_2 = O(g)$ とすることができる。このように力学系に小さい展開パラメーターが存在すると、それを使って二つの distinct time scales が作られ、そのうちの long time scale での現象に着目することによって一種の coarse-graining が行なわれる。しかし、完全に粗な記述へ移行するためにはこれだけでは不完全で例外的な初期条件を排除するという確率的考察が今一つ必要となる。こうして (14) から (19) への移行が可能になるわけである。

例として、弱く相互作用する系を考えてみよう。³⁾ 今、力学系のハミルトニアンが、

$$H = H_0 + \lambda V \quad (\lambda \ll 1) \quad (20)$$

という形に書かれたとしよう。ここに H_0 は

$$H_0 = \sum_{i=1}^N H_i \quad (21)$$

という形をしており、これだけでは N ケの互いに独立な部分系の集まりを記述しているにすぎない。 V がそれらをつなぐ相互作用で、 λ はそのカップリング・パラメーターを表わす。このような系は、適当に定義された作用変数 J とそれに共役な角変数 α

$$\begin{aligned} J &= \{ J_1, J_2, \dots, J_N \} \\ \alpha &= \{ \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N \} \end{aligned} \quad (22)$$

を用いて表わされる。このような変数を用いると、

$$H_i = H_i(\underline{J}) \quad (23)$$

$$V = \sum_{\underline{n}} V_{\underline{n}}(\underline{J}) \exp[i \underline{n} \cdot \underline{q}] \quad (24)$$

と書かれる。ここに

$$\underline{n} = \{n_1, n_2, \dots, n_N\}, \quad (n_j = \text{整数}) \quad (25)$$

すると Liouville operator は

$$iL = iL_0 + \lambda iL' \quad (26)$$

$$iL_0 = \underline{\omega}(\underline{J}) \cdot \frac{\partial}{\partial \underline{q}}, \quad \underline{\omega}(\underline{J}) \equiv \frac{\partial H_0}{\partial \underline{J}} \quad (27)$$

$$iL' = \sum_{\underline{n}} \exp[i \underline{n} \cdot \underline{q}] \left\{ \frac{\partial V_{\underline{n}}}{\partial \underline{J}} \cdot \frac{\partial}{\partial \underline{q}} - iV_{\underline{n}} \underline{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \underline{J}} \right\} \quad (28)$$

と書かれる。この系の運動は、確率分布関数 $\rho(\underline{J}, \underline{q}, t)$ 或はそのフーリエ変換 $(\underline{J}, \underline{n}, t)$ で記述されるが、このうち、 $\rho(\underline{J}, \underline{n} \neq 0, t)$ の方の時間変化は ω^{-1} の程度の time scale で起るのに対して、 $\rho(\underline{J}, \underline{n} = 0, t)$ の分は、 $(\lambda^2 \omega)^{-1}$ の程度でしか起らないことが示される。そこで、射影演算子としては $\underline{n} = 0$ の状態を拾い出す演算子

$$P = \int \frac{d\underline{q}}{(2\pi)^N} \quad (29)$$

をもって定義しよう。すると

$$P\rho(\underline{J}, \underline{n}, t) = \rho^{(1)}(\underline{J}, t)$$

の方程式は、適当な近似の下に (19)を見よ)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho^{(1)}(J, t) &\doteq -\lambda^2 \int_0^t ds P L' \exp[-i L_0 s] L' \rho^{(1)}(\underline{J}, t) \\ &\doteq \frac{\partial}{\partial \underline{J}} \cdot \underline{D}(\underline{J}) \cdot \frac{\partial}{\partial \underline{J} \rho} \rho^{(1)}(\underline{J}, t) \end{aligned} \quad (30)$$

と書かれることが示される。ここに

$$\underline{D}(\underline{J}) = \pi \lambda^2 \sum_{\underline{n}} |V_{\underline{n}}|^2 \underline{n} \underline{n} \delta[\underline{n} \cdot \underline{\omega}] \quad (31)$$

である。(30)はFokker-Planck方程式の特殊型に他ならない。

(30)式をきちんと導くにはいくつかの仮定が必要だが、それらを列挙すると、

1. Infinite system: これは、 $\underline{n} \cdot \underline{\omega}$ をほぼ連続とみなすために必要である。また、2の仮定にとっても必要である。
2. Diagonal singularity: 例えば

$$\sum_{\underline{n}_1 \underline{n}_2 \underline{n}_3} V_{\underline{n} - \underline{n}_1} V_{\underline{n}_1 - \underline{n}_2} V_{\underline{n}_2 - \underline{n}_3} V_{\underline{n}_3 - \underline{n}}$$

という量を計算するのに、 $\underline{n}_2 = \underline{n}$ という部分の寄与が、全体と N のorderで同じ程度となる。という仮定である。

3. Coarse-graining in time: $t \sim (\lambda^2 \omega)^{-1} \gg \omega^{-1}$ というtime scaleで考える。

4. Coarse-graining in \underline{J} : $\rho^{(1)}(\underline{J}, t)$ は \underline{J} の関数としてゆっくり変化するとする。

5. Initial Condition: (14)の $I(t)$ の項が考えているtime scaleでは無視できるとする。

以上5つの仮定は、必ずしもすべてが必要かどうかは分らないが、Master Equationを導

く時にはほとんどいつも使われている仮定である。

以上、分布関数に対する Master Equation が導かれる条件を考察して来たが、全く同様な考察が、(2)から(6)の形の Langevin 方程式を導く場合にも行われている。⁴⁾以下それを簡単に示そう。

文献 4) にならって、射影演算子 P を次のように定義しよう。

$$P F \equiv \langle F A \rangle / \langle A^2 \rangle A \quad (3.2)$$

定義から明らかなように、 P は、力学変数のはる空間において、物理量 A の方向への射影を表わす演算子である。 $A(t)$ を、相互作用表示

$$\hat{A}(t) = e^{-i\omega t} A(t) \quad (3.3)$$

$$\omega = \langle A P L A \rangle / \langle A^2 \rangle \quad (3.4)$$

に移して計算を行うと、次式がえられる。

$$\frac{d \hat{A}(t)}{d t} = - \int_0^t d s \hat{\varphi}(s) \hat{A}(t-s) + \hat{f}(t) \quad (3.5)$$

ここに

$$\hat{\varphi}(t) = e^{-i\omega t} \langle A K(-t) A \rangle / \langle A^2 \rangle \quad (3.6)$$

$$\hat{f}(t) = e^{-i\omega t} i U(-t) (1-P) L A \quad (3.7)$$

で、 $U(t)$ 及び $K(t)$ は夫々 (16), (17) で定義される。ここまでは全く形式的な計算で導かれる。

(3.5) は、(6) の Langevin 方程式と非常に似た形をしているが、次の二つの点で異っている。一つは、 $\hat{A}(t)$ がその時刻での \hat{A} の値のみによらず、過去の値 $\hat{A}(t-s)$ によることであり、今一つは、random force に対応する $\hat{f}(t)$ が有限な相関時間をもつことである。実際、 $\hat{f}(t)$ の

相関関数を計算すると

$$\langle \hat{f}(0) \hat{f}(t) \rangle = \hat{\varphi}(t) \langle A^2 \rangle \quad (38)$$

と書かれることが分る。(38)を(8), (10)と比較してみれば分るように, これは Fluctuation - Dissipation Theorem に他ならない。

前と同様, 力学系の運動が二つの distinct time scales で特徴づけられると, 適当な A をえらぶことによって, (35) は (6)の形に還元することができる。すなわち A への射影が slow process を拾い出すことに対応し, それに直交する部分はすべて fast process のみを表わすとすると, $\varphi(t)$ や $f(t)$ は fast process となり,

$$\varphi(s) \sim 2\tau \delta(s) \quad (39)$$

と近似できるようになる。(39)を(35)(38)に代入すれば, 直ちに(6), (8), (10)がえられる。

文 献

- 1) R. Kubo, Rep. on Prog. in Phys. XXIX (1966) 255; Tokyo Summer Institute on Theoretical Physics. (1965) Part I, Many-Body Theory, 1.
- 2) R. Zwanzig, Journ. Chem. Phys. 33 (1960) 1338; Lectures in Theoretical Physics III (Boulder, 1960) 106.
- 3) I. Prigogine, Non-Equilibrium Statistical Mechanics (Interscience, 1963); R. Brout and I. Prigogine, Physica 22 (1956) 621.
- 4) H. Mori, Prog. Theor. Phys. 33 (1965) 423.