

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 3 日現在

機関番号：17102

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2013～2015

課題番号：25610021

研究課題名(和文)非平衡物理に現れる確率過程に関する確率幾何的手法の開拓

研究課題名(英文)stochastic geometric approach to stochastic processes in non equilibrium statistical mechanics

研究代表者

原 隆 (Hara, Takashi)

九州大学・数理(科)学研究科(研究院)・教授

研究者番号：20228620

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 1,700,000円

研究成果の概要(和文)：身の回りの系では、非平衡状態(例：コップに熱いコーヒーが入っている)が最終的に平衡状態(コーヒーが冷めて室温と同じ温度になる)に落ち着くことはよく経験する。ところが、このような緩和現象を量子力学から説明できる満足な理論はない。

本研究ではこの問題に取り組み、特に、どのような条件の下で緩和が起きるかの条件と、その際の緩和時間を解明することを目的とした。

結果として、自然と思われる仮定(非平衡部分空間が典型的である)の下では緩和が必ず起きるが、緩和時間が「ボルツマン時間」というべき異常に短い時間スケールになることがわかった。これは「自然と思われる仮定」が全く自然ではなかったことを示す。

研究成果の概要(英文)：In our daily life, we experience various relaxation or thermalisation phenomena. A typical example will be that a cup of hot coffee becomes cooler until its temperature approaches that of our room. However, there seems to be no satisfactory theory which can explain these phenomena starting from quantum mechanics.

In this research, we tried to find out general conditions under which relaxation occurs, and also tried to estimate relaxation time scales.

We have shown that under a "natural" assumption (non-equilibrium subspace is "typical"), relaxations do always occur, but that the relaxation time scale is extremely small (about poco seconds, called "Boltzmann time"). Our result suggests that the "natural" assumption about relaxation is not natural at all, and relaxation phenomena are more complicated than we first thought.

研究分野：数理物理学, 確率論, 統計力学

キーワード：統計力学 緩和時間 非平衡状態 量子力学 マクロな物理量 確率過程 非平衡部分空間

1. 研究開始当初の背景

統計力学の基礎付けについては、未だに満足に行く理論がない。もちろん、「等重率の原理」などのアドホックな仮定を入れての平衡統計力学の定式化は完成されていると言って良く、その有効性も日々、膨大な研究によって確かめられている。この意味で、物理の理論としての平衡統計力学の定式化とその有効性には全く揺るぎがない。

ところが、物事を第一原理に遡って考えようとすると、上記のような統計力学の定式化には疑問が残る。原理主義的には、この世の中が量子力学で記述されている以上、「等重率の原理」などの付加的な仮定を入れなくとも熱力学的・統計力学的現象が説明できて然るべきである。しかし現在の統計力学の定式化はそのようなはなっておらず、(等重率の原理のような)新たな仮定を一つ導入して話が進められている。

さらに世の中には非平衡状態もたくさん存在し(我々が生きている事自身が非平衡状態の例である)、日常的にも非常に良く目にするのであるが、現在の統計力学での非平衡状態の扱いは未だに不満足なものである。特に、我々の身の回りには非平衡現象や緩和現象が普通に見られる(例:暖かいコーヒーを放置すれば、やがて冷めて室温と同じになる)が、なぜこれほどまでに緩和現象が普遍的に見られるのか、そもそもなぜ緩和が起こるのか、などについても、その物理的および数学的基礎づけには曖昧なものがある。

もちろん、統計力学的現象を確率過程としてとらえて、非平衡現象や緩和現象を説明する理論はたくさんあり、大きな成功を収めている。しかし、根本の量子力学から出発するレベルでは、満足のいく理論は未だ存在しないと行って良いと考える。

さて、最近になって、典型性の議論 (typicality argument) と呼ばれる考え方が広く知られるようになってきた。これは古くは von Neumann に端を発するもの(が再発見されたもの)で、非常に大雑把にいうと、「量子力学的に許される状態のほとんど(『典型的なもの』)は、我々が観測する平衡状態を表現している」というものである。大抵の状態は平衡状態を表しているのだから、普通に(典型的な状態を)観測したら平衡状態が見えるのは当然だ、ということである。

これは統計力学の基礎づけという点からも非常に魅力的である --- 「等重率の原理」が「典型的な量子力学的状態」に変わったという一面はあるが、量子力学と統計力学の関係がかなり近くなった印象はうける。この辺りから、統計力学、緩和現象などについて、基礎的な理解をさらに深めることはできないだろうか?これがこの研究を始めた時点での背景である。

2. 研究の目的

上の「背景」で述べたような未解決問題に答えたい、というのがこの研究の(遠大な)テーマである。もちろん、このような百年来の大問題にすぐに答えが出せることは期待しにくいので、以下の二つの研究テーマを設定した。

- (A) どのような条件の下で、「緩和」が起こるのか、その必要条件または十分条件をできるだけ一般的に見つけること。
- (B) 「緩和」が起こる場合には、その時間スケール(緩和時間)はどのくらいになるかを一般的に考えること。

上の(A)については先行研究もかなり存在するので、どのような方向性で考えて独自性を出すのが大変に重要になってくる。一方、(B)については、ほとんど先行研究がなく、あったとしても宇宙年齢よりもさらに長い時間スケールを预言するものがほとんどであった(一つの例外は逆に極端に緩和時間が短いものだった)。そこで、特に上の(B)の中でも、ある程度短い(可能ならば我々が観測しているような)時間スケールを预言できる理論の構築を目指した。これが本研究の大きな目的である。

緩和時間の問題自身が非常な大問題であるので、段階を分けて問題を設定した。ただし、以下の(B)-2 が完成すれば、この大問題が完全解決されたことになる。これは短期間には難しいであろうから、今研究では以下の(B)-1 を主目標とした。

(B)-1. 非平衡状態を表す部分空間「非平衡部分空間」が「典型的」な場合の緩和時間を考える。

(B)-2. 非平衡状態を表す部分空間「非平衡部分空間」が「典型的」ではない場合の緩和時間を考える。

以下の4.(研究成果)で述べるように、(B)-1 についてはほぼ完全な解答を得ることができた。またこの場合には、上の(A)(どのような条件の下で緩和が起こるのか)についても完全かつ強力な結果を得た。さらにその結果として、「ある程度短い時間スケールを预言できる理論の構築」という当研究の目的は達成されたことになる。一方、(B)-2 については、当然のことながら、まだまだ解明すべきことが残っている。

(補足)『『典型的』な『非平衡部分空間』を考えれば緩和現象が説明できるかもしれない』というのは、1929年に von Neumann が提唱した事である(J. von Neumann: Beweis des Ergodensatzes und des H-Theorems in der neuen Mechanik, Z. Phys. 57, 30 (1929) ----- ただし、彼は緩和時間についての定量的な考察は行っていない)。上の(B)-1の問題設定は明らかにこの von Neumann の問題設

定の延長上にあるが、当初はこの論文の存在を知らずに問題を設定したものである。この意味で、(B)-1 の問題設定は非常に自然なものである。また以下に述べる結果は、von Neumann の見通しが実際にはどのくらい当たっていたか、にも応えるものとも捉えられる（後述）。

3. 研究の方法

まずは「典型性の議論」を徹底的に理解することから始めた。典型性の議論は量子力学の基本的な枠組みに乗っているので、初等的な線型代数などが主な武器になった。ただ、実際に部分空間を構成してやってみると、線型代数の範疇でも新しい発見があった。

その上で、「非平衡部分空間」が「典型的」な場合の緩和時間の解析に入った。非平衡状態を表す部分空間「非平衡部分空間」が「典型的」ということの数学的表現がまず必要であるが、これは「非平衡部分空間」をランダムにとることで表現した。さらに、そのランダムな取り方を一様分布とし、その取り方についての確率を評価することで、「典型性」を表現した。

このように表現したことで、解析すべき対象と解決すべき問題の数学的性質が明確になり、おかげで、そのあとの解析は（試行錯誤はあったが）かなり一直線に行うことができた。結果的に数学の力 --- 特に問題を数学的に明確に定式化することの威力 --- を再発見した面もある。

ランダムな取り方に関する平均を行うことは、数学的にはユニタリー群のハール測度に関する積分を行うことと同値であり、ここでユニタリー群やそのハール測度、さらには表現論の知識を駆使して膨大な計算を行うこととなった。

さらに、解析的手法だけではなかなか研究が進まない状況を打開するため、計算機による数値実験 (Mathematica および C のプログラムによる) をも積極的に取り入れて「実際にはどのような現象が起こっているのか」の予想を立てつつ、それを数学的に証明することで研究を進めた。

「非平衡部分空間」が「典型的」でない場合の解析については、数値実験を含む様々な手法を試みた。

4. 研究成果

(1). 「非平衡部分空間」が「典型的」な場合の数学的に厳密な結果

「非平衡部分空間」が「典型的」な場合について、上の 3. で述べたような手法を駆使して解析したところ、以下の事実が数学的に厳密に証明できてしまった：

(ア) 「非平衡部分空間」が「典型的」な場合には、どのような初期状態から出発しても、緩和が起こる。

(イ) その緩和時間は ボルツマン時間 $h/(kT)$ 程度になる ----- ここで、 h はプランク定数、 k はボルツマン定数、 T は温度である。

この結果は以下の点で興味深い：

どのような初期状態から出発しても緩和が起こること (ア)、を示しているのは非常に強い結果である。実際、似たような結果を記述した論文が同時期に幾つか現れたが、それらはすべて、「ほとんどすべての」または「多数の」初期状態から出発すれば緩和が起こる、というものであった。この意味で、我々の上の結果 (ア) は大変に強力である。また、これによって、研究目的 (A) にも答えている。

しかしながら、問題はこの結果で示された緩和時間 (イ) にある。研究目的 (B)-1 に完全に答えてはいるが、通常室温でボルツマン時間を計算すると、だいたいピコセカンド (10^{-12} 秒) 程度になる。これは (コーヒーが冷めるのに分単位の時間がかかることからしても) 明らかに速すぎる値である。

なお、「ボルツマン時間」 $h/(kT)$ は、プランク定数とボルツマン定数から自然に作られる時間のスケールとしては一番簡単かつ自然なものである。これが結果に現れたこと自身は「典型的」な部分空間を考えている以上、自然である。

このように、強力な成果が得られたものの、予測された緩和時間が非現実的に速すぎる結果となった。予測される時間スケールが短すぎるので、von Neumann の予想は楽天的すぎたとも言える。この意味で、これは von Neumann の予想を (ある種否定的に) 解決した事になっている。

(2). (1) の結果の証明について

この事実の証明に直接使えそうな過去の研究事例を見出せなかったため、確率論および群論の知識を動員して独自に証明を構成した。特に緩和時間の逆数がある作用素の最大固有値と関係していることに注目し、その最大固有値を、その作用素の (大きな) 冪乗のトレースから評価する方法を用いた。(もちろん、トレースの評価に際しては数学の様々な定理、特に B. Collins and P. Sniady,

Integration with respect to the Haar measure on unitary, orthogonal and symplectic group, *Commun. Math. Phys.* **264**, 773-795 (2006) などの結果を大いに活用した.)

(3) . (1)の結果の物理的解釈と意義

(1)の結果は数学的に厳密に正しいが、現実の緩和現象を説明できるものではない。「何がおかしいのか」の解明が次の当然の課題となる。様々な解析の結果、我々が日常見ている緩和現象を表す非平衡部分空間は「典型的」なものではありえないという結論に達した。

これまでの統計力学の研究では「典型的」なものだけを扱う事が多く、かつ、それがうまく機能していた。今回、「典型的」なものでは見えない現象の存在が統計力学の範疇でも明確に認識できた事になる(かつこれが日常の緩和現象である)。これはこれまでの研究の流れに一石を投じるものになると自負している。

また、我々が日常見ている緩和現象を表す非平衡部分空間は「典型的」なものではないということから、「ではなぜ緩和が起こるのか」という問題がまだ未解決であることが、改めて明らかになった。

(4) . 「非平衡部分空間」が「典型的」でない場合の解析の試み

上で述べたように、「非平衡部分空間」が「典型的」でない場合が実際の非平衡状態に対応すると考えられ、物理学的には大変に興味深いものである。ただし、研究目的の項でも述べたように、これは非常に大問題であり、一朝一夕の解決は望めず、本研究の目的ともししていない。そのため、この問題への基礎からのアプローチを様々な角度から行った。

現在までのところ、

実際に解けるモデルでは、非平衡部分空間がどのようになっているかを具体例から探ること

身の回りで見られる緩和現象では、非平衡部分空間がどのようになっているかを予測すること

観測量とハミルトニアンの間にもどのような関係があれば、緩和が起こるのか、またその際の緩和時間はどのくらいになるのか、の評価を行うこと

などを手がけた。ではたくさんの例に共通する特徴を抽出しつつある。では思考実験を含めて、ほぼ正しいと思われる描像に到達することを目的としているが、これはまだ研究途上である。一方、³については「どのような条件の下なら現実的な緩和時間が見られるのかの(ほぼ必要かつ)十分条件」などが得られた。

5 . 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計2件)

Sheldon Goldstein, Takashi Hara, and Hal Tasaki: Time Scales in the Approach to Equilibrium of Macroscopic Quantum Systems. *Phys. Rev. Lett.* **111** (2013) 140401
DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.140401> (査読あり)

Sheldon Goldstein, Takashi Hara, and Hal Tasaki: Extremely quick thermalization in a macroscopic quantum system for a typical nonequilibrium subspace. *New Journal of Physics* **17** (2015) 045002
doi:10.1088/1367-2630/17/4/045002 (査読あり)

[学会発表](計1件)

原隆: マクロ量子系における「典型的」な非平衡部分空間からの異常に速い「緩和」、KEK 研究会 QMKEK5 「量子論の諸問題と今後の発展」2014年3月11日、「高エネルギー加速器研究機構(茨城県つくば市)」

[その他]
ホームページ等

6 . 研究組織

(1)研究代表者

原 隆 (HARA, Takashi)
九州大学・大学院数理学研究院・教授
研究者番号: 20228620

(2)研究分担者

()

研究者番号:

(3)連携研究者

田崎晴明 (Tasaki, Hal)
学習院大学・理学部・教授
研究者番号: 50207015