

統計物理学とは

目次

1 統計物理学とは	1
2 確率を用いて統計物理学を記述できるのはなぜか	2

1 統計物理学とは

自然現象を理解するため、原子や分子、あるいはさらに小さな素粒子など、ミクロな世界での物質の構成要素の存在や構造が探求され、明らかにされてきました。しかしそれだけでは、原子が多量に集まって構成された物質の性質や現象を理解することは困難です。（理由は次の章で説明しています。）例えば、原子が集まって構成されている水がなぜ温度によって水蒸気・水・氷と形を変えるのか、なぜ水はネバネバしておらずサラサラと流れていくのか、などを理解するのは難しいでしょう。つまり、ミクロな世界について追究するだけでは、マクロの世界の現象を理解することはできません。それゆえ、ミクロな世界を明らかにするのは別に、構成要素が集まったマクロな世界ではどのような現象が現れるのか、ということを考えたり、ミクロな世界と我々が経験しているマクロな世界での現象とを結びつけたりする必要があります。

このミクロな世界とマクロな世界を結びつける、というのは非常に難しい問題です。というのも、粒子の数が少しでも増えるだけで一気に力学の問題を解くことが難しくなってしまうからです。さらに、マクロな世界をなす多くのミクロな構成要素（たとえば 10^{23} 個というオーダーの個数の分子）を考える際、それらに対応する一つ一つの粒子の位置や速度のミクロなパラメータを全て正確に把握することは困難です。したがって、複雑で自由度が高いマクロな系の性質をミクロの力学法則に基づいて議論することは不可能だと考えられます。

ところが興味深いことに、構成要素の数が極めて多くなると、ある状態の問題の扱いは逆に簡単になってしまうのです。ある状態の問題とは、マクロな系が平衡状態という特殊な状態にあるときの問題のことです。（平衡状態についての説明は、別の記事「非平衡とは何か」にあります。）平衡状態では、粒子一つ一つの運動に着目しなくても、マクロな物理量の振る舞いを正確に特徴付けることができ、マクロな問題の扱いが容易になります。

平衡状態が持つ特殊な性質とは何でしょうか。その一つとして、普遍性が挙げられます。具体的には、マクロな系が一度平衡状態に落ち着くと、系の詳細（系の環境や平衡状態に至る前の系の様子など）に依存せず、系のマクロな振る舞いが決まります。これは理論的に完全に証明されたものではなく、経験事実から分かっていることです。

平衡状態におけるミクロな世界に基づいてマクロな世界を記述するほぼ完全な学問体系は、平衡統計力学と呼ばれています。（非平衡状態に関しては非平衡統計力学という学問分野があります。こちらはまだ完全ではありません。）平衡統計力学は、どんな問題にも適用可能な万能の方法というよりは、様々な考察や解析の基礎になる考え方の体系です。また平衡統計力学は、様々な物理量を細か

く計算するよりも、系のミクロな詳細に依存しない、様々な階層の普遍的な振る舞いを探し出し、それらを的確に記述することを目指した学問です。統計物理学というのは、統計力学よりも一般的な、大きく隔たった階層の物理を結びつけるための営みを指します。

2 確率を用いて統計物理学を記述できるのはなぜか

1. で平衡状態においては、粒子一つ一つの運動に着目しなくてもマクロな物理量の振る舞いを正確に特徴付けることができると述べました。そのマクロな世界を記述する際に用いるのが確率です。なぜ、確率的な要素がないはずの¹物理系を記述するのに確率を用いることができるのでしょうか。実は、物理量のゆらぎが小さければ、確率モデルを用いても一回の観測だけで確定した値²が測定されます。以下では、チェビシエフの不等式³を用いてその意味について述べます。

系の状態が $i = 1, 2, \dots, N$ の N 通りである状況を考え、状態 i が出現する確率は $p_i \geq 0$ であるとします。このとき、 $\sum_{i=1}^N p_i = 1$ であり、ある物理量 f の期待値は $\langle f \rangle = \sum_{i=1}^N f_i p_i$ です。

ではまず、物理量 f のゆらぎという量を定義します。実際の物理量 f の測定値が期待値 f からどの程度ずれているかというのは、ずれの二乗の期待値 $\langle (f - \langle f \rangle)^2 \rangle$ で表せます。また、

$$\langle (f - \langle f \rangle)^2 \rangle = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2$$

と書き換えられるので、この変形を用いて、

$$\mathcal{F}[f] = \sqrt{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2} \quad (1)$$

と表すことができ、これを物理量 f のゆらぎと定義します。このときチェビシエフの不等式より、任意の正の数 ϵ に対して、

$$\text{Prob}[|f - \langle f \rangle| \geq \epsilon] \leq \left(\frac{\mathcal{F}[f]}{\epsilon} \right)^2 \quad (2)$$

となります。ただし左辺は、測定値と期待値の差が測定誤差 ϵ より大きくなる確率を表しています。この式に従って考えると、 f のゆらぎが測定誤差に比べて十分小さく、 $\left(\frac{\mathcal{F}[f]}{\epsilon} \right)^2 \ll 1$ が成立するならば、一回 f を測定するだけで、ほぼ確実に期待値 $\langle f \rangle$ と測定誤差の範囲で等しい値が得られます。つまり、確率的なモデルを使っているにも関わらず、物理量 f の測定結果に関してほとんど厳密な予測をすることができます。

では、ゆらぎが小さいことを表す条件式 $\left(\frac{\mathcal{F}[f]}{\epsilon} \right)^2 \ll 1$ はどの程度一般的に成り立つのでしょうか。経験事実によると、普通の実験装置で測定できるような、大自由度の物理系のマクロな物理量の平衡状態でのゆらぎは、非常に小さいことが分かっています。したがって、通常測定する物理量に関しては、一回の測定で期待値とほぼ等しい値を得ることができて、確率的なモデルと整合します。これが、統計物理学を確率を用いて記述できる理由です。(もちろん、他にも複数の理由が考えられるとは思いますが、ここで挙げた理由は、統計物理学の根幹をなす重要な理由の一つであると思われます。)

¹ 確率で記述されるモデルでは、物理量の値はばらつくが、実際の測定量は、誤差の範囲で確定した値が得られるということの意味している。

² 正確には、ほとんどの場合で、測定誤差が測定精度に比べて十分に小さな範囲に収まっている値が観測されるということ。

³ 状態数が多くなるとゆらぎが小さくなり、正規化した確率変数は標準正規分布に近づいていくという、中心極限定理の考え方をういて説明されることもあります。しかしこの定理が成立する条件(正規化する前の確率変数、つまり $f_i (i = 1, 2, \dots, N)$ が独立かつ同じ分布に従うこと)は一般の物理系では成立せず(理由の一つとしては、粒子間の相互作用により $f_i (i = 1, 2, \dots, N)$ が独立でなくなることが挙げられます)、実用にはならないと考えられます。

ゆらぎが小さくなるイメージを掴む一例として、参考文献 [2] で挙げられている例を引用します。まず、全ての目の出る確率が $\frac{1}{6}$ で等しい理想的なサイコロを N 個用意します。これらを同時に、お互いに干渉し合わないよう投じます。その結果出た目の平均を物理量 f とします。例えば、サイコロが一個であった場合を考えると、

$$\langle f \rangle = \frac{1+2+3+4+5+6}{6} = 3.5$$

となります。一方、ゆらぎは式 (1) より (計算は省略します⁴)

$$\mathcal{F}[f] = \sqrt{\frac{35}{12N}}$$

となります。この式より、サイコロの数 N が多くなるとゆらぎが小さくなることがわかります。ここで、 $N = 10^{24}$ という大自由度の場合を考え、測定精度を $\epsilon = 10^{-8}$ とします。このとき、測定値が測定誤差の範囲内で 3.5 に一致しない確率は、チェビシェフの不等式 (2) から、 $\frac{35}{12} \times 10^{-24} \times (10^8)^2 \sim 10^{-8}$ 以下です。したがって、サイコロを 10^{24} 個同時に投げる実験を一回行えば、期待値 3.5 にほぼ一致する測定値が得られるとわかります。

上記の文章は、以下に記した参考文献を参照させて頂きました。さらに詳しい内容に興味を持たれた方は、そちらを参照なさってください。

参考文献

- [1] 田崎晴明. 2008. 『統計力学 I』 (新物理学シリーズ). 培風館.
- [2] 田崎晴明. 2018. 「統計物理学の基礎をめぐって」.
<https://www.gakushuin.ac.jp/881791/pdf/statphys.pdf>
- [3] 竹内一将. 2021. 統計力学 I 講義資料 (非公開)
- [4] 汪金芳. 「大数の法則・中心極限定」講義資料
<http://www.math.s.chiba-u.ac.jp/wang/teaching/b112.pdf>

⁴詳細は参考文献 [1] に記述がありますので、そちらを参照なさってください。