１１． 位相空間と Liouville の定理

統計力学では、視点を系の構成粒子（原子、分子）のレベルに移して議論を行う。このとき導入するのが位相空間の概念である。さしあたり量子力学は考慮せず、古典力学の範囲で議論する。

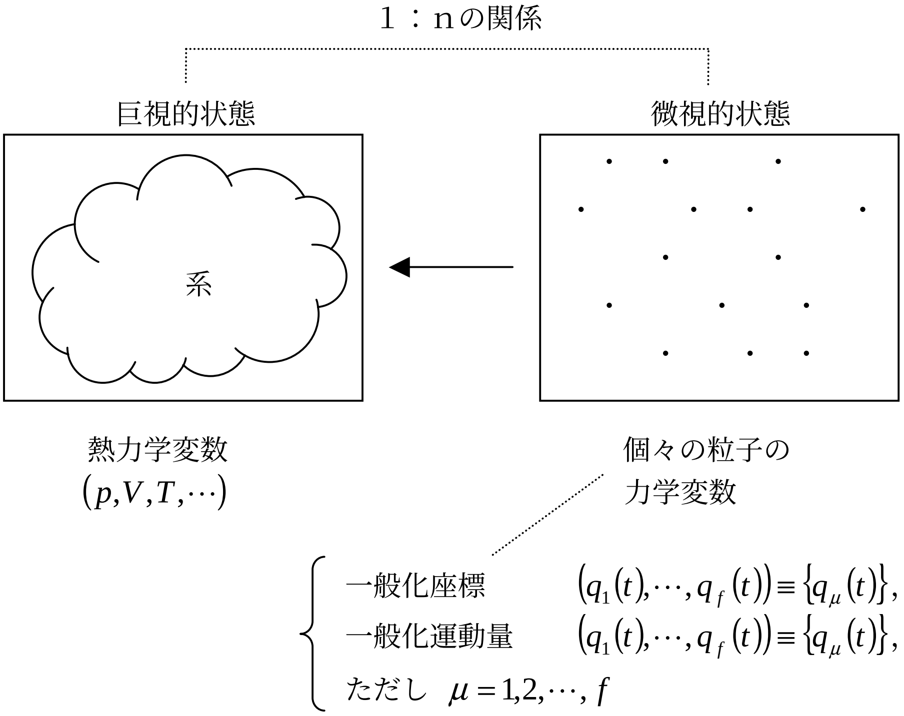

図 11－1．巨視的状態と微視的状態の関係（１）

ここで f は粒子の自由度（一般化座標の数）を表す。たとえば３次元 N 粒子系の場合、$f = 3N$ となる。巨視的状態（熱力学的状態）は熱力学変数 $p, V, T, \cdots$ で指定され、微視的状態は粒子の力学変数 $\{q_\mu\}, \{p_\mu\}$ で指定される。個々の粒子のミクロな動きの集積は、熱力学的状態に対する「統計集団」の概念を生みだす。

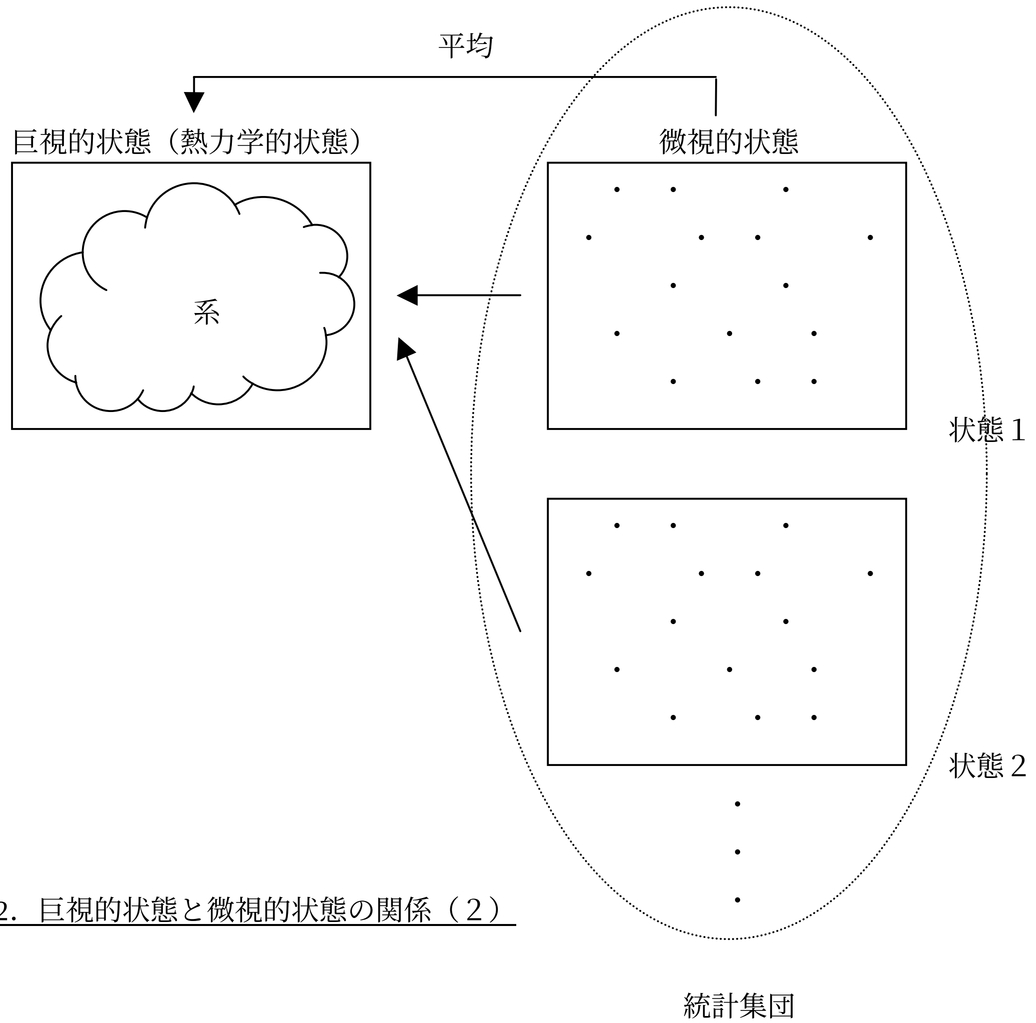

図 11－2．巨視的状態と微視的状態の関係（２）

● 微視的状態の時間変化

個々の粒子の運動状態は Hamilton の正準方程式で記述する。

$$\dot{q}_\mu = \frac{\partial H}{\partial p_\mu} \ , \qquad \dot{p}_\mu = -\frac{\partial H}{\partial q_\mu} \qquad (\mu = 1, 2, \cdots, f)\ ,$$

ただし $H = H(\{q_\mu\}, \{p_\mu\}, t)$ ………（11－1）

正準方程式は、$2f$ 個の連立微分方程式として表される。また時間 t を媒介変数として、解を $(\{q_\mu(t)\}, \{p_\mu(t)\})$ と表したとき、それは $2f$ 次元空間（位相空間）の中で曲線（位相軌道）を描く。位相軌道上の点（代表点）は、系の微視的状態を完全に指定する。なお運動量を考えない f 次元空間 $(q_1, \cdots, q_f)$ を、とくに配位空間とよぶ。

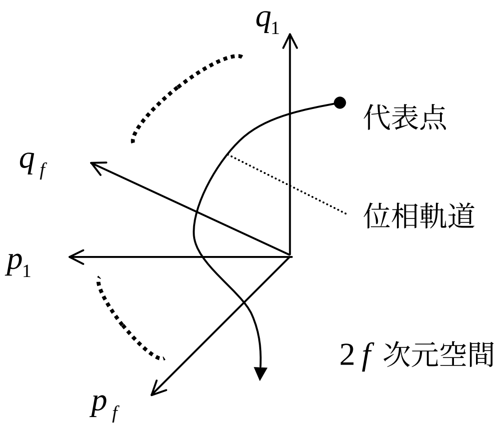

図 11－3．位相空間

● 位相空間の性質

　位相空間の性質を以下に列挙する。

- 位相空間の１点を指定すると系の状態は完全に指定され、過去および未来の状態は完全に決まる。
- 位相軌道は交差しない。（もし交差すると仮定すれば、交点の未来が２つあることになり、矛盾する。）

（例）１次元調和振動子

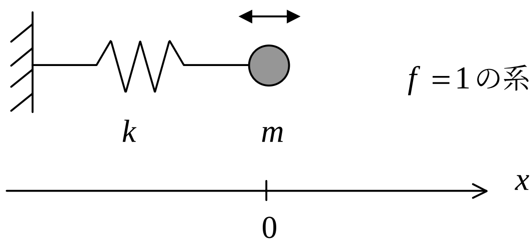

図 11－4．１次元調和振動子

　バネ定数 k のバネの先端に質点（質量 m ）を取り付けた、１次元方向に振動する系を考える。この系（１次元１粒子系）の自由度 f は

$$f=1$$

である。またハミルトニアン H は

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}kx^2=Const.\ ,\qquad \text{ただし } p=m\dot{x}$$

となる。よって正準方程式は

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad \cdots ①, \qquad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -kx \quad \cdots ②$$

①，②を解いて

$$\left.\begin{array}{l} x(t) = A\sin\left(t\sqrt{\dfrac{k}{m}} + \alpha\right) , \\ p(t) = \sqrt{km}A\cos\left(t\sqrt{\dfrac{k}{m}} + \alpha\right) , \\ \text{ただし } A,\alpha \text{ は任意定数} \end{array}\right\} ③$$

を得る。③式のような表現の仕方を、位相軌道の媒介変数表示という。また③式より変数tを消去して次式を得る。

$$mx^2 + \frac{p^2}{k} = C \quad (C \text{ は任意定数}) \qquad ④$$

④式のような表現の仕方を、位相軌道の媒介変数非表示という。見てわかる通り、 p - x 座標において④が描く曲線は楕円となる。

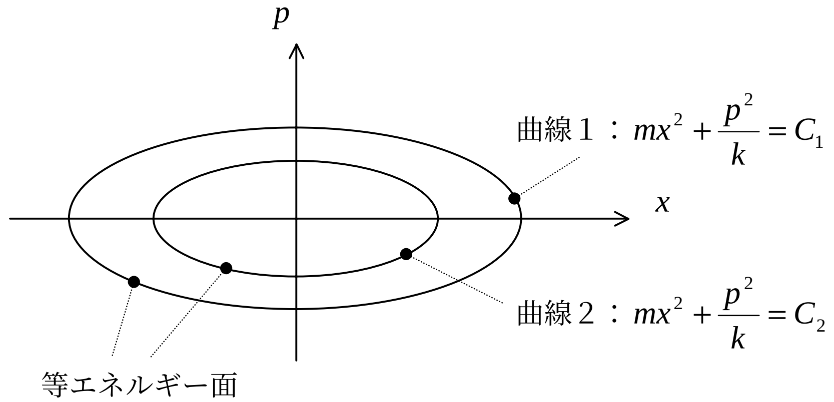

図 11－5. １次元調和振動子の位相空間

● 等エネルギー面

ハミルトニアン H に関して、一般的に

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} + \sum_{\mu=1}^{f}\left[\frac{\partial H}{\partial q_\mu}\dot{q}_\mu + \frac{\partial H}{\partial p_\mu}\dot{p}_\mu\right]$$

が成り立つ。（11−1）式によれば右辺第２項の$[\ ]$は消える。したがって

$$\frac{dH}{dt}=\frac{\partial H}{\partial t} \qquad (11-2)$$

もしHが陽に時間tを含まなければ、エネルギー保存則

$$\frac{dH}{dt}=0 \quad , \qquad H=H(\{q_\mu\},\{p_\mu\})=Const. \qquad (11-3)$$

を得る。このとき等エネルギー面は、$2f$次元空間内の$(2f-1)$次元超曲面となる。また代表点が描く位相軌道も、等エネルギー面上に存在する。

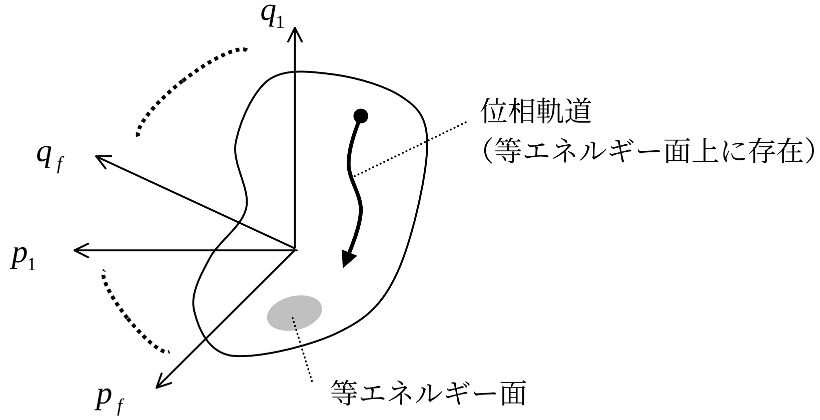

図 11−6．位相空間内の等エネルギー面

● Liouville の定理

位相空間内の代表点の集合からなる微小体積要素は、時間とともに形を変えるが、体積は不変である。・・・ Liouville の定理

（証明）

統計集団の微小変位の経時変化は、次の行列(J_{ij})によって特徴づけられる。

$$(J_{ij})=\begin{pmatrix} \dfrac{\partial q_1(t+\Delta t)}{\partial q_1(t)} & \cdots & \dfrac{\partial q_1(t+\Delta t)}{\partial p_f(t)} \\ \vdots & & \vdots \\ \dfrac{\partial p_f(t+\Delta t)}{\partial q_1(t)} & \cdots & \dfrac{\partial p_f(t+\Delta t)}{\partial p_f(t)} \end{pmatrix} \qquad (11-4)$$

たとえば微小変位ベクトル$(dq_1(t),0,\cdots,0)$の変換式は、上式を用いて

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial q_1(t+\Delta t)}{\partial q_1(t)} dq_1(t) \\ \vdots \\ \dfrac{\partial q_f(t+\Delta t)}{\partial q_1(t)} dq_1(t) \\ \dfrac{\partial p_1(t+\Delta t)}{\partial q_1(t)} dq_1(t) \\ \vdots \\ \dfrac{\partial p_f(t+\Delta t)}{\partial q_1(t)} dq_1(t) \end{pmatrix} = (J_{ij}) \begin{pmatrix} dq_1(t) \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

となる。他の微小変位ベクトルについても同様であり、それらを１つの行列にまとめておく。

$$(dV'_{ij}) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial q_1(t+\Delta t)}{\partial q_1(t)} dq_1(t) & \cdots & \dfrac{\partial q_1(t+\Delta t)}{\partial p_f(t)} dp_f(t) \\ \vdots & & \vdots \\ \dfrac{\partial p_f(t+\Delta t)}{\partial q_1(t)} dq_1(t) & \cdots & \dfrac{\partial p_f(t+\Delta t)}{\partial p_f(t)} dp_f(t) \end{pmatrix},$$

$$(dV_{ij}) = \begin{pmatrix} dq_1(t) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & dp_f(t) \end{pmatrix} \text{ とおいて } (dV'_{ij}) = (J_{ij})(dV_{ij}) \qquad ①$$

①の行列式は

$$\det(dV'_{ij}) = \det(J_{ij})\det(dV_{ij}) \ ,$$

ここで$\det(J_{ij})$はヤコビの行列式$J(t+\Delta t,t)$である。また$\det(dV_{ij})$は簡単に展開でき、これを$d\Gamma_t = dq_1(t)\cdots dp_f(t)$とおくと、上式は

$$\det(dV'_{ij}) = J(t+\Delta t,t)d\Gamma_t \qquad ②$$

となる。$d\Gamma_t$は$dq_1(t),\cdots,dp_f(t)$で囲まれた領域の体積、すなわち時刻tにおける統計集団の微小体積要素を表している。

②式左辺の$\det(dV'_{ij})$は、時刻$t+\Delta t$における変形した微小体積要素

$$d\Gamma_{t+\Delta t} = dq_1(t+\Delta t)\cdots dp_f(t+\Delta t)$$

を表す。よって②は

$$d\Gamma_{t+\Delta t} = J(t+\Delta t, t)d\Gamma_t \qquad （11－5）$$

となる。$d\Gamma_t$ の時間不変性は、（11－5）に対して古典力学の法則、すなわち正準方程式を適用することで説明できる。まず位置および運動量について、以下の近似が成り立つと仮定しよう。

$$q_\mu(t+\Delta t) = q_\mu(t) + \dot{q}_\mu(t)\Delta t + o\left((\Delta t)^2\right) \qquad ,$$

$$p_\mu(t+\Delta t) = p_\mu(t) + \dot{p}_\mu(t)\Delta t + o\left((\Delta t)^2\right) \qquad ,\ \text{これより}$$

$$\frac{\partial q_\mu(t+\Delta t)}{\partial q_\nu(t)} = \delta_{\mu\nu} + \frac{\partial \dot{q}_\mu(t)}{\partial q_\nu(t)}\Delta t = \begin{cases} 1 + \dfrac{\partial \dot{q}_\mu(t)}{\partial q_\mu(t)}\Delta t & (\mu = \nu) \\ 0 + o(\Delta t) & (\mu \neq \nu) \end{cases}$$

$$\frac{\partial p_\mu(t+\Delta t)}{\partial p_\nu(t)} = \delta_{\mu\nu} + \frac{\partial \dot{p}_\mu(t)}{\partial p_\nu(t)}\Delta t = \begin{cases} 1 + \dfrac{\partial \dot{p}_\mu(t)}{\partial p_\mu(t)}\Delta t & (\mu = \nu) \\ 0 + o(\Delta t) & (\mu \neq \nu) \end{cases}$$

上式を $J(t+\Delta t, t) = \det(J_{ij})$ に代入して展開すると

$$J(t+\Delta t, t) = \left(1 + \frac{\partial \dot{q}_1(t)}{\partial q_1(t)}\Delta t\right)\cdots\left(1 + \frac{\partial \dot{p}_f(t)}{\partial p_f(t)}\Delta t\right) \quad ,$$

積の結果できる Δt の 2 次以上の項を高位の摂動量とみなして、$J(t+\Delta t, t)$ は

$$J(t+\Delta t, t) = 1 + \left\{\frac{\partial \dot{q}_1(t)}{\partial q_1(t)} + \cdots + \frac{\partial \dot{p}_f(t)}{\partial p_f(t)}\right\}\Delta t + o\left((\Delta t)^2\right) \qquad ③$$

となる。ここで正準方程式より

$$\frac{\partial \dot{q}_\mu(t)}{\partial q_\mu(t)} + \frac{\partial \dot{p}_\mu(t)}{\partial p_\mu(t)} = \frac{\partial}{\partial q_\mu(t)}\left(\frac{\partial H}{\partial p_\mu(t)}\right) + \frac{\partial}{\partial p_\mu(t)}\left(-\frac{\partial H}{\partial q_\mu(t)}\right) = 0 \quad ,$$

これを③に代入して次式を得る。

$$J(t+\Delta t, t) = 1 + o\left((\Delta t)^2\right) \quad 1 \quad ,\ \text{ゆえに}$$

$$d\Gamma_{t+\Delta t} = J(t+\Delta t, t)d\Gamma_t = d\Gamma_t \qquad （11－6）$$

Liouville の定理は、位相空間内の代表点の集団が、非圧縮性流体のように振舞うことを示している。これは流れ場のなかの油滴の運動に類似する。　　◆