力学系とマルコフチェーンのエルゴード性

N 個の粒子からなる力学系 (=運動方程式などの物理法則にしたがって時間発展するものとさしあたって思って良い)。これは $3N$ 個の位置座標 $\mathbf{q} = (q_1, \ldots, q_{3N})$ および $3N$ 個の運動量座標 $\mathbf{p} = (p_1, \ldots, p_{3N})$ で記述される。
運動方程式は Hamiltonian と呼ばれる $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ の関数 $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ を用いて次の Hamilton の正準方程式: $(i = 1, \ldots, 3N)$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} q_i(t) &= \frac{\partial}{\partial p_i} H(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)) \\ \frac{d}{dt} p_i(t) &= -\frac{\partial}{\partial q_i} H(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)) \end{aligned}$$

にしたがって運動する。初期値 $(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0))$ に対して時刻 t の時の位置、運動量の座標 $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ を対応させる写像 $T_t : (\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)) \to (\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ で $\mathbf{R}^{6N}$ 上の全単射を得る。
H の例としては

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{3N} p_i^2 + V(\mathbf{q}).$$

など。V はポテンシャルである。この写像は次の性質をもつ。

(1) $T_{t+s} = T_t \circ T_s$

(2) T_t は $\mathbf{R}^{6N}$ 上の Lebesgue 測度 m を保存する。すなわち任意の $\mathbf{R}^{6N}$ 上の可測集合 E、t にたいして

$$m(T_t^{-1}(E)) = m(E)$$

が成立する。これは $\mathbf{R}^{6N}$ 上の任意のコンパクトサポートをもつ連続関数 $f(x)$ 及び t に対して

$$\int_{\mathbf{R}^{6N}} f(T_t x) m(dx) = \int_{\mathbf{R}^{6N}} f(x) m(dx)$$

が成立することと同値であることに注意せよ。

(3) $\Omega_E = \{(\mathbf{q}, \mathbf{p}) | H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = E\}$、すなわちエネルギー一定の曲面を考える。すると $T_t \Omega_E \subset \Omega_E$ がわかる。(エネルギー保存則) T_t は Ω_E 上の測度 $d\mu = \frac{dS}{\|\mathrm{grad} H\|}$ を保存する。ここで dS は Ω_E 上に誘導される超曲面の面積要素、

$$\|\mathrm{grad} H(\mathbf{q}, \mathbf{p})\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{3N} \left| \frac{\partial}{\partial q_i} H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \right|^2 + \left| \frac{\partial}{\partial q_i} H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \right|^2}$$

である。特に Ω_E がコンパクトな曲面のとき μ は有限測度になる。この時は、μ を $\mu(\Omega_E)$ で割って確率測度にしておく。

ポテンシャルが

$$\lim_{\|\mathbf{q}\|\to\infty} V(\mathbf{q}) = \infty$$

のときΩ_Eはコンパクトになる。これは、$V(\mathbf{q}) = \|\mathbf{q}\|^2$の様な時(調和振動子)OKである。

注意 1　上の(1)は常微分方程式の解の一意性による。(2)はベクトル場

$$\sum_{i=1}^{3N}\left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial q_i}\right)$$

の発散が0であることによる。

注意 2　統計力学ではNが気体分子の個数のように非常に大きな数を表す。そのときは、物理量A (Ω_E上の関数である、たとえばq_1など) の時間変化を追うのは大変で、その長時間の時間平均が観測される(平衡状態に達すると思えるので)と考える。その時間平均が相空間Ω_E上の平均値$\int_{\Omega_E} A(\mathbf{q},\mathbf{p})d\mu$と同じになるというのが「エルゴード仮説」と呼ばれるものである。物理学者Boltzmannはこのことは"tが動く時軌道$\{T_t x\}$がΩ上を埋め尽くすことである" (これがラフな意味でのエルゴード性である。) ことから証明できると考えた。

ここで次のように抽象化しよう。

定義 3　有界な測度空間(Ω, μ)上の$t \in \mathbf{R}$をパラメータとしてもつ可測写像

$$T_t : \Omega \to \Omega$$

の族で

(1) $T_{t+s} = T_t \circ T_s$

(2) $\mu(T_t^{-1}(E)) = \mu(E)$

を満たすものを力学系と呼ぶことにする。具体例はもちろん(Ω_E, μ, T_t)などである。

さて力学系のエルゴード性を述べよう。簡単のため、時間$\mathbf{R}$を$\mathbf{N} = \{1, 2, 3, \ldots, \}$にして1つの写像$T$を用いて$T_n = T^n$と書ける時を考える。($T$は逆写像を持つとは限らない。)

定義 4　可測集合$E \subset \Omega$が$\mu(T^{-1}E) = \mu(E)$を満たしていると$\mu(E) = 0$ or 1が成立する時(Ω, T, μ)はエルゴード的であるという。

具体的に意味のある物理モデルでエルゴード性が示されているのは余り多くない。例えばスタジアムと呼ばれる形状の平面内の領域のなかを完全弾性衝突しながら運動するビリヤードなどのエルゴード性は示されている(Sinai)。しかしもっと巨大な数の粒子を扱うよりリアルなモデルではまだ理論はすすんでいないようである。さて、実は次が示せる。これは上述のBoltzmannの主張を証明したものになっている。

定理 5 (Birkoff の個別エルゴード定理)　T はエルゴード的とする。$f \in L^1(\Omega, \mu)$ に対してほとんどすべての x に対して

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f(T^k x) = \int_\Omega f(x) d\mu(x)$$

エルゴード的でなくても次の定理が成立する。

定理 6 (Poincaré の再帰定理)　$\mu(C) > 0$ とする。ほとんどすべての $x \in C$ に対して無限個の n があって $T^n x \in C$ となる。

Poincaré の定理はそんなに難しくなく証明できる。トライしてみよ。Boltzmann は彼の理論でエントロピーの増大則 (Boltzmann の H-定理) を示したが、これに対して上の Poincaré の再帰定理をたてに疑問を提出する人たちがいた。上の定理によればどんな状態から出発しても時間が経てばその最初の状態に近い状態に帰ってくるのだからエントロピーが増大しっぱなしということはないというのである。ただその再帰時間は宇宙の寿命ほどになるという。そこで Boltzmann は「待てるものなら待ってみろ！」と言ったという。

さてマルコフチェーンと力学系との関連を述べよう。マルコフチェーンの状態空間を S, 推移確率を $\{p(x,y)\}_{x,y\in S}$ とする。

定義 7　$\{\nu(x)\}_{x\in S}$ が定常確率測度 (stationary probability measure) とは任意の $y \in S$ に対して

$$\nu(y) = \sum_{x\in S} \nu(x) p(x,y)$$

となるような確率のこと。

以下定常測度 ν があると仮定する。

注意 8　マルコフチェーンが既約で正再帰のときすなわち任意の x に対して

$$\lim_{k\to\infty} p^{(kd)}(x,x) = \frac{d}{m(x)} > 0$$

の時 $\nu(x) = \frac{1}{m(x)}$ となる。

$$\Omega = S^{\mathbf{N}} = \{(x_1, x_2, \ldots, x_n, \ldots) \mid x_i \in S\}.$$

とおき Ω 上の確率を

$$\mu = \sum_{x\in S} \nu(x) P_x$$

と定める。P_x は x から出発したマルコフチェーンの確率で Ω 上の確率であることに注意せよ。

$$P_x\left(\{x_1\}\times\{x_2\}\times\cdots\{x_n\}\times S\times S\times\cdots\right)=p(x_1,x_2)p(x_2,x_3)\cdots p(x_{n-1},x_n)$$

を満たす確率測度である。この書き方は講義の時とは少し違うが、注意せよ。最後に T を

$$T(x_1,x_2,x_3,\ldots)=(x_2,x_3,x_4,\ldots)$$

とおく。すると T が μ を保存することがわかり、(Ω,μ,T) は力学系となる。この T はマルコフシフトと呼ばれ、記号力学系 (=symbolic dynamical system) の代表例である。実は

命題 9 マルコフチェーンが既約であることと (Ω,μ,T) がエルゴード的である事は同値である。

マルコフチェーンのエルゴード性は、"既約かつ周期が 1"だから力学系のエルゴード性よりは強い概念である。

Birkoff のエルゴード定理からつぎがわかる。

定理 10 M.C. $\{X_n\}$ は既約とする。また定常測度を $\{\nu(x)\}$ とする。$\sum_{x\in S}^{\infty}|f(x)|\nu(x)<\infty$ のときほとんどすべての w に対して

$$\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1}f(X_k(w))=\sum_{x\in S}f(x)\nu(x).$$

最後に確率論の大数の法則を述べよう。

定理 11 $\{X_k\}_{k=0}^{\infty}$ は同分布に従う独立確率変数列で $E|X_1|<\infty$ とする。このときほとんど全ての w について

$$\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1}X_k(w)=EX_1.$$

となる。

実は、X_1 の取る値が有限個の時 (さいころ投げ、銅貨投げなど) $\{X_k\}_{k=1}^{\infty}$ は定常分布をもつ既約なマルコフチェーンとなる。本当は有限個の値に限定する必要は無いが、講義ではそのようなものしか扱っていないのでそうする。状態空間、推移確率、定常分布がなにになるかは考えて見よ。そこで、Birkoff のエルゴード定理から上の大数の法則が示されることがわかる。この意味で Birkoff の定理は大数の法則の拡張にあたるといえる。