アインシュタインの3つ目の夢

早川尚男
（京都大学基礎物理学研究所）

京都大学elcas 2022 講義型【A】8月20日（土） 11:00-12:30
京都大学百周年時計台記念館2階　国際交流ホールII

自己紹介

YUKAWA INSTITUTE FOR THEORETICAL PHYSICS

- 名古屋生まれの物理学者です。
- 親も物理をやっていました。
- そのため、物理を子供時代から万学の王と見て、ブルーバックスとかを読んでは親に叱られていました。
- 高校時代は文系、特に社会が得意で、物理とか数学は平気に赤点を取ったりしていました。
- 親には才能がないと疎まれて、文系に行けと言われましたが、反発して物理を志しました。
- 紆余曲折の末、京都大学理学部に入学して晴れて物理を勉強するようになり、現在に至っています。
- 息子が２人居ます。一人は特任助教（文学・理学の２つの学位持ち）、もう一人は大学院生（博士後期課程・数学）。
  - 偶然、海外の同じ街に在住

基礎物理学研究所

YITP
YUKAWA INSTITUTE FOR THEORETICAL PHYSICS

(©YITP=>上２つと下右の写真

- 1953年に日本初の共同利用研として設立。<=湯川のノーベル賞
- 1990年に広大理論研と合併
- 2008年に元所長の益川敏英がノーベル賞
- 理論物理学の研究所(定員内所員23名)=>物性分野も6名

http://www.47news.jp/feature/topics/2008/10/post_18.html (=>益川さんの写真)

目次

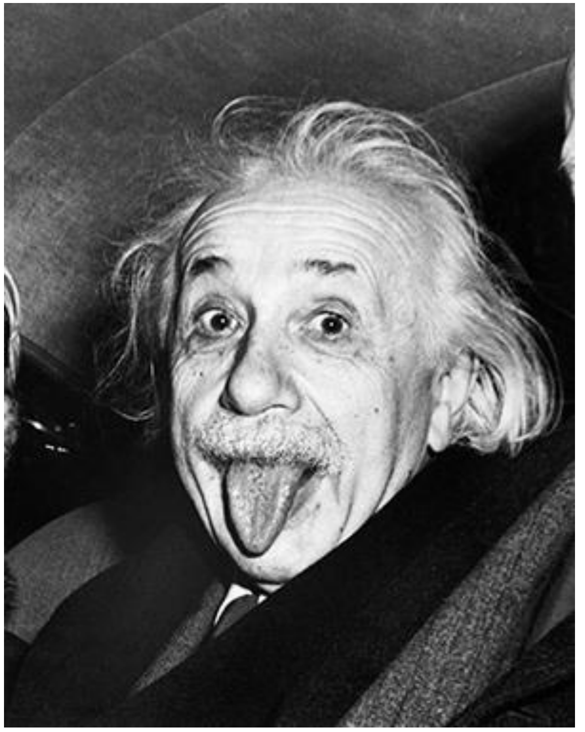
- アインシュタインの奇跡の年(1905年）
- ブラウン運動
  - プレヒストリー
  - アインシュタインの理論(1905,1906)とその歴史的意義
- ブラウン運動を記述する数学的理論
  - ランダムウォーク
  - 伊藤積分等
- 現代の確率論的熱力学への応用

目次

- アインシュタインの奇跡の年(1905年）
- ブラウン運動
  – プレヒストリー
  – アインシュタインの理論(1905,1906)とその歴史的意義
- ブラウン運動を記述する数学的理論
  – ランダムウォーク
  – 伊藤積分等
- 現代の確率論的熱力学への応用

アインシュタインの奇跡の年(1905年)

- アルバート･アインシュタイン (1879-1955)
  - Person of the Century (Life, 1999)
  - おそらく史上でもニュートンと並んで最も有名な科学者



http://sygnite.com/representation/einstein.html

MITのチャンピオンTシャツ

YITP
YUKAWA INSTITUTE FOR THEORETICAL PHYSICS

アインシュタインの奇跡の年(1905)

- アインシュタインの主な業績
  - 特殊相対論の創始(1905)
  - 光量子仮説の提案(1905)=>ノーベル賞
  - ブラウン運動の理論(1905)=>博士論文
  - 一般相対論の提案と完成(1915)
  - ボース･アインシュタイン凝縮(1925)
  - 量子力学の非局所性(EPR相関)(1935)

YUKAWA INSTITUTE FOR THEORETICAL PHYSICS

アインシュタインの２つの貢献(1905)

- 特殊相対論
  - 任意の慣性系で光速度不変
  - ニュートン力学での速度合成（ガリレイ変換）は出来ない。
  - 時間と空間の合体
  - 非慣性系への拡張が一般相対論
- 光量子仮説（光電効果）
  - 2つ目の量子論の論文
  - 光が粒子の様に振る舞うことを予言
  - 光電管（真空管）に応用=>鉄腕アトムにも使われている。
  - アインシュタインはこの業績でノーベル賞

アインシュタインの妄言？

- 一般相対論の帰結への混乱
  - ブラックホールは存在しない(1939). <=一般相対論の式を解いたシュヴァルツシルト(1916)がアインシュタインに手紙を送り、アインシュタインが論文を提出、学会で代読。
  - 重力波は存在しない(1936)

    =>レフェリーにたしなめられて修正=>2017年に検証
- 宇宙項を巡る混乱
  - 宇宙は静的であるとして導入(1917年)
  - ハッブルの観測による膨張宇宙論を見て、生涯最大の誤りとして宇宙項を捨てる(1931年）
  - 現代宇宙論では必須な項
- 量子力学は非局所的になるので誤り(1935): EPR論文
  - その後、量子力学の非局所性は証明・実証された。

目次

- アインシュタインの奇跡の年(1905年)
- ブラウン運動
  - プレヒストリー
  - アインシュタインの理論(1905,1906)とその歴史的意義
- ブラウン運動を記述する数学的理論
  - ランダムウォーク
  - 伊藤積分等
- 現代の確率論的熱力学への応用

scholar.google.com/citations?hl=ja&user=qc6CJjYAAAAJ

パナソニックお勧めのサ... 日本経済新聞 電子版 Google はてなアンテナ - hhay... Yahoo! JAPAN 京都大学基礎物理... 物性基礎論：統計... その他のブックマ

Albert Einstein

Institute of Advanced Studies, Princeton
確認したメール アドレス: なし
Physics

フォロー

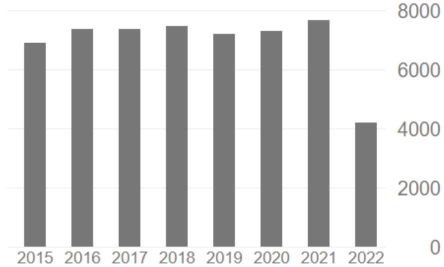
タイトル	引用先	年
Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? A Einstein, B Podolsky, N Rosen Physical Review 47 (10), 777	22146	1935
Uber einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heurischen Gesichtpunkt A Einstein Ann. Phys. 17, 132-148	18025 *	1905
On the movement of small particles suspended in stationary liquids required by the molecular-kinetic theory of heat A Einstein Annalen der Physik 17, 549-560	~~16554~~ *	1905
Zur Elektrodynamik bewegter Körper A Einstein	7011 *	
On gravitational waves Sitzungsber. preuss A Einstein Acad. Wiss 1, 154	6773 *	1918
Berichtigung zu meiner Arbeit:„Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen” A Einstein Annalen der Physik 339 (3), 591-592	6665 *	2006

EPR論文

ブラウン運動の論文

引用先 すべて表示

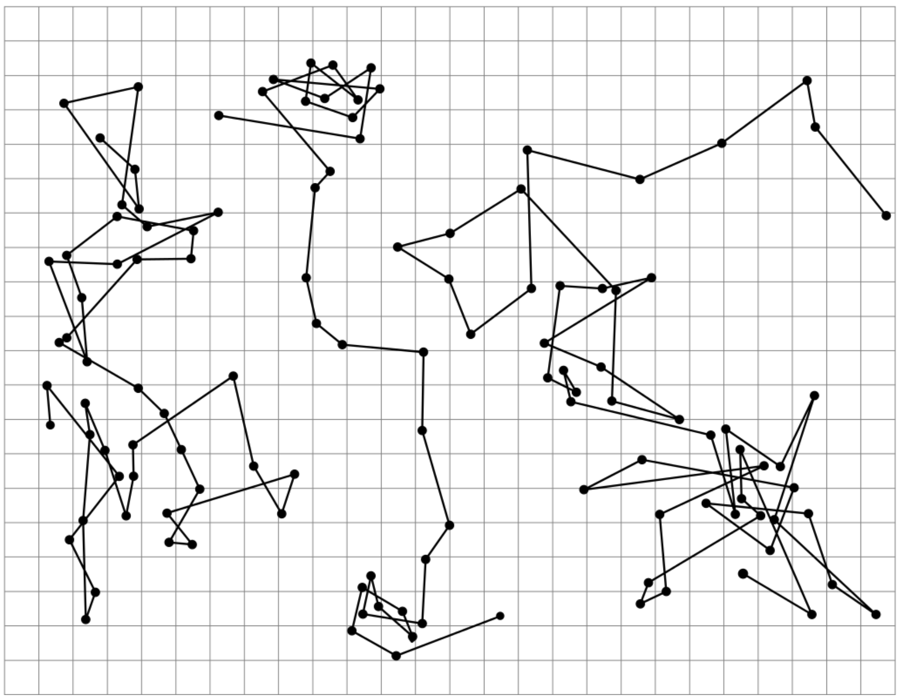
	すべて	2017 年以来
引用	151486	41272
h 指標	118	67
i10 指標	368	208



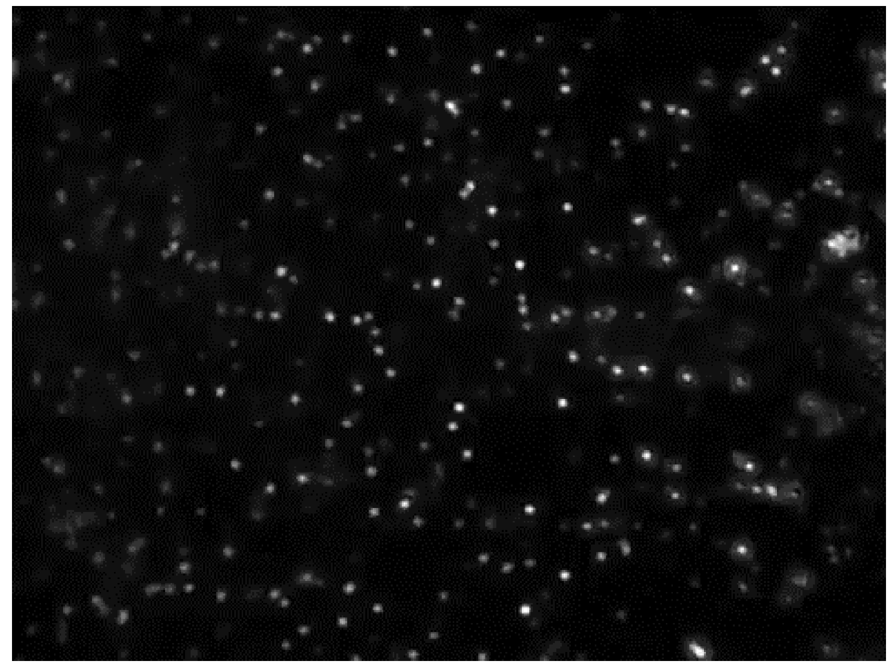
ここに入力して検索 断続... あ 23:55 2022/08/17

ブラウン運動

- ロバート･ブラウン(1827)が花粉中から流出した微粒子のランダム運動を観測



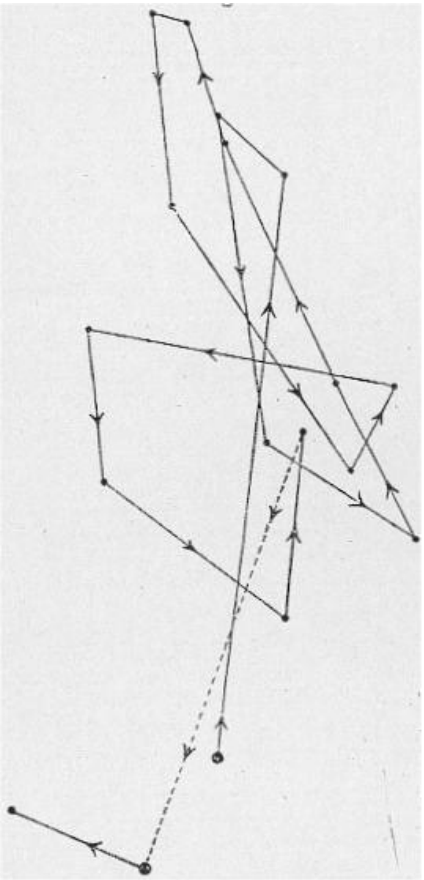
ペランの実験によるコロイド粒子の軌跡
https://en.wikipedia.org/wiki/Brownian_motion



水中のナノ粒子
https://youtu.be/cDcprgWiQEY?t=12

アインシュタインの理論(1905)

- それまでブラウン運動のメカニズムは明らかではなかった。
  - ダーウィン(1880)の植物の運動学
- アインシュタイン=>メカニズムを明らかにした+分子の実在性を証明。
  - アボガドロ数の予言
  - これは彼の博士論文
  - ペランの実験(1909)=>その正しさを実証。



ダーウィン:「植物の運動学」より

https://en.wikipedia.org/wiki/Ernst_Mach

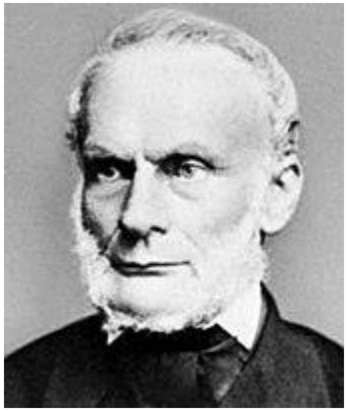
分子は実在するか？

https://en.wikipedia.org/wiki/Ludwig_Boltzmann

- ドルトン(1808)の原子論
- アボガドロ(1811)
- カールスルーエの会議(1860)で広く化学者は分子の実在性を受容
- メンデレーエフ(1869)の周期表
- しかし、反原子論の勃興は19世紀末
  - マッハ、オズヴァルド、デューエム等の熱力学の巨人等が提唱
  - 統計力学の始祖のボルツマンと激しく対立

エントロピーについて

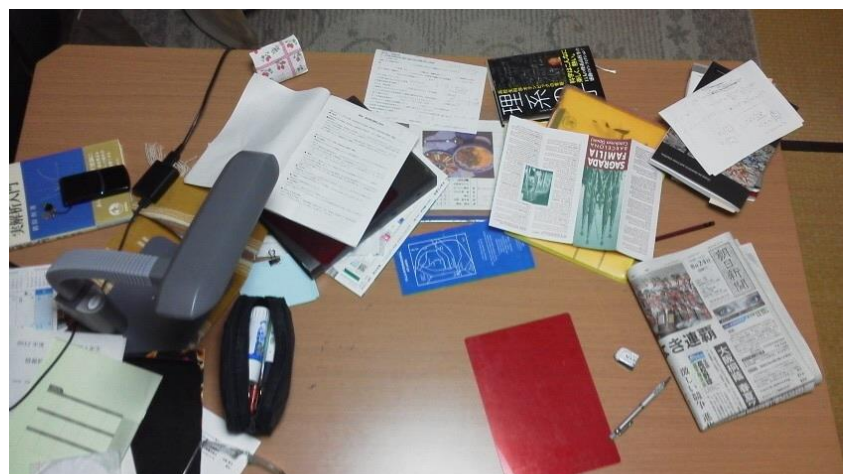
- エントロピーはクラウジウスが導入
- 断熱過程では減らない量
- 断熱準静過程では一定
- 熱力学の第二法則 $\Delta S \geq 0$
- 不可逆性を表す⇔力学の可逆性



https://en.wikipedia.org/wiki/Entropy

不可逆性

- エントロピー：乱雑さ
- エントロピーの低い（整った）状態から高い（乱れた）状態へ遷移
- 時間の不可逆性



ボルツマンについて

- ルードヴィヒ・ボルツマン (1844-1906)
- 可逆な力学法則⇔不可逆な熱力学第2法則
- $S = k \log W$ は量子論の父であるプランクが刻んだ。
- S: エントロピー, W: 状態数, $k = R/N_A$: ボルツマン定数

図 1.1　ボルツマンの墓
（撮影：早川尚男）.

アインシュタインの論文　1

- 浸透圧の理論（ファント・ホッフ）

$$pV = RTz$$

圧力 p，容積 V，気体定数 R，温度 T

zモルの溶液

溶質分子の数密度を n とすると $n = zN_A/V$

$$p = \frac{RT}{N_A}n$$

N_A :アボガドロ数

- 圧力勾配=数密度*外力

$$\boxed{\frac{\partial p}{\partial x}} = nF_{ex}$$

アインシュタインの論文 2

- 数密度のみが空間xに依存すると

密度勾配

$$F_{ex} = \frac{1}{n} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{RT}{nN_A} \boxed{\frac{\partial n}{\partial x}}$$

- 流体中の運動法則(ストークス則)を適用

$$v_f = \frac{F_{ex}}{6\pi a\eta}$$

v_f: 外力下での粒子の速度、a: 粒子半径、η:流体の粘性率

- 拡散のフィック則（D: 拡散係数）

$$nv_f + J = 0 \qquad J = -D\frac{\partial n}{\partial x}$$

アインシュタインの論文 3

- アインシュタインの帰結

$$\boxed{N_A = \frac{RT}{6\pi a\eta D}}$$

右辺は観測可能量で表される。

- アインシュタインのアボガドロ数の推定値

2.1×10^{23} (1905/5/11)=>4.15×10^{23} (1906)
=>6.6×10^{23}(1911; 1906年論文の計算間違いの訂正）

- アボガドロ数：1モルの分子の構成数
  - 分子が実在の証拠

アインシュタインが他に示した事

- アインシュタインは様々な理論で分子の実在性を示した。
- レオロジーによるもの(1906)
  - 有効粘性率の上昇

体積分率

$$\eta = \eta_0 \left(1 + \frac{5}{2}\phi\right) \quad \phi = \frac{4\pi}{3}a^3 N_A z/V$$

η_0 溶媒の粘性率

- 粒子の平均2乗変位(1905)

$$\langle x^2 \rangle = \frac{RT}{3\pi N_A a \eta} t$$

<·> アンサンブル平均

ゆらぎと散逸の関係式

- 恒等式

$$\langle x^2(t)\rangle = \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle v(t_1)v(t_2)\rangle$$

$$\langle x^2\rangle = 2Dt \;\Leftrightarrow\; D = \lim_{t\to\infty}\frac{\langle x^2\rangle}{2t}$$

$v(t) = dx(t)/dt$ である．$t_1 = t_0$, $t_2 = t_0 + t'$

$$D = \int_0^\infty dt' \langle v(t_0)v(t_0+t')\rangle \qquad t\to\infty$$

$$D = \mu kT = \frac{kT}{\zeta} \qquad \mu = \frac{1}{kT}\int_0^\infty dt' \langle v(0)v(t')\rangle$$

μ は移動度，ζ は摩擦係数

ゆらぎと散逸の関係式

- ゆらぎと散逸の関係式=>非平衡物理の基本法則
- 一般のカレントに替えても、同様の関係式が成り立つ。
- 線形応答領域での量子系での一般論は久保亮五が完成

$$\langle J\rangle_t = \sigma(\omega) F e^{i\omega t} \qquad \beta = {}^{1}/_{kT}, \qquad \hbar = h/2\pi$$

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{L}\int_0^\infty dt e^{-i\omega t}\int_0^\beta d\lambda \langle J(-i\hbar\lambda)J(t)\rangle_{eq}$$

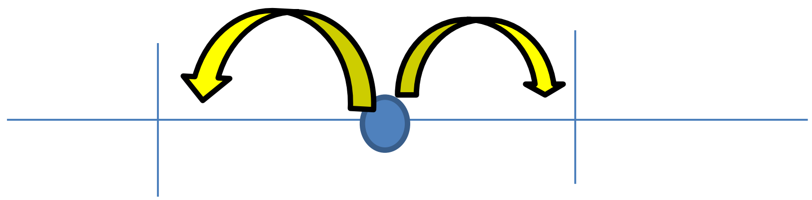
https://en.wikipedia.org/wiki/Ryogo_Kubo

目次

- アインシュタインの奇跡の年(1905年)
- ブラウン運動
  - プレヒストリー
  - アインシュタインの理論(1905,1906)とその歴史的意義
- ブラウン運動を記述する数学的理論
  - ランダムウォーク
  - 伊藤積分等
- 現代の確率論的熱力学への応用

ランダムウォーク(1)

- アインシュタインのブラウン運動の理論は拡散現象を記述
- 拡散は数学的には**ランダムウォーク**



ホッピング確率1/2

- Nステップ後に原点の右nサイトに居る場合の数

$$\frac{N!}{\left(\frac{N+n}{2}\right)!\left(\frac{N-n}{2}\right)!}$$

$N \pm n$ を偶数

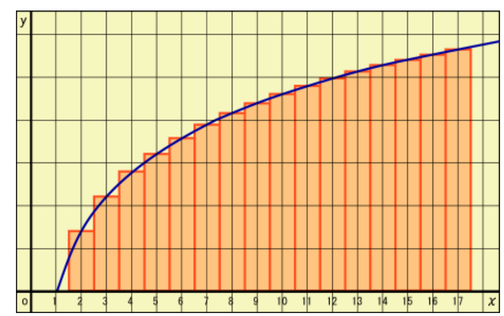
ランダムウォーク(2)

- Nステップ後にnに居る確率

$$P_N(n) = \begin{cases} \left(\dfrac{1}{2}\right)^N \dfrac{N!}{[(N+n)/2]![(N-n)/2]!} & N \pm n : \text{偶数} \\ 0 & N \pm n : \text{奇数} \end{cases}$$

- スターリングの公式($N \gg N - n \gg 1$)

$$\ln N! = \left(N + \frac{1}{2}\right) \ln N - N - \frac{1}{2} \ln(2\pi) + O\left(\frac{1}{N}\right)$$



- $\because \ \int_1^n \ln x \, dx \le \ln(n!) \le \int_1^{n+1} \ln x \, dx$

但しリーディングオーダーのみ。高次項はもう少し面倒な計算が必要。

ランダムウォーク(3)

- スターリングの公式を使うと

$$e^x := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$$

$$P_N(n) = \left(\frac{2}{\pi N}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{n^2}{2N}\right)$$

更に連続変数 $x = nl$ を導入し，空間変数 x の連続極限 $\Delta x \to 0$

$$P_N(x)\Delta x = P_N(n)\frac{\Delta x}{2l}$$

格子間隔 l

- 空間の連続極限での分布

$$P_N(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi N l^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2Nl^2}\right)$$

- 時空間連続分布

$$P(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

$$N\tau = t, \quad D = \frac{l^2}{2\tau}$$

正規(ガウス)分布

- ランダムウォーカーの分布は正規(ガウス)分布に従う。
- 正規分布は(無相関な)ランダムな変数を沢山集めると普遍的に現れる。
  - 中心極限定理
- 分布関数は拡散方程式に従う。

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = D\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,t)$$

https://en.wikipedia.org/wiki/Carl_Friedrich_Gauss

アインシュタインのゆらぎの理論

- アインシュタインは平衡ゆらぎの理論も発展(1904,1909)

$$(S - S_0)/k = -\frac{1}{2}\beta_{ij}x_i x_j$$ i,jについて和

$\{x_i\}_{i=1}^{N}$ をゆらぎ, $S(\{x_i\}),\ S_0$

エントロピー、平衡エントロピー

$$S - S_0 = k \ln \Omega \quad \Leftrightarrow \quad \Omega = e^{(S-S_0)/k}$$

状態数 $\Omega(\{x_i\})$ は配位 $\{x_i\}$ を取る確率分布 $w(\{x_i\})$ に比例

$$w = \frac{\sqrt{\beta}}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2}\beta_{ij}x_i x_j\right)$$ 行列式 $\beta = |\beta_{ij}|,$

確率過程

- ランダムウォークをする粒子を数学的に記述
- 物理学者はランジュバン方程式を使う。
- 数学的には**ウィーナー過程**

$$P(\hat{W}(t+\Delta t)=x|\hat{W}(t)=x')=\frac{1}{\sqrt{2\pi t}}e^{-\frac{(x-x')^2}{2t}}$$

- をベースにする。

$$\begin{aligned}(d\hat{W}(t))^2 &= dt,\\ d\hat{W}(t)dt=(d\hat{W}(t))^k &= 0. \qquad k\geq 3\end{aligned}$$

確率過程における積

- ウィーナー過程では粒子は常にランダムにキックされる。

$$d\hat{W}(t) = \hat{\xi}(t)dt$$

無相関ノイズ

- 時間発展を離散的に考える
- 伊藤型 : 前進差分

$$\int_0^\tau d\hat{W}(t) \cdot f(t, \hat{W}(t)) := \lim_{\Delta t \to 0} \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\xi}_{\Delta t}(t_n) f(t_n, \hat{W}_{\Delta t}(t_n))$$

- ストラトノビッチ型 : 中心差分

$$\int_0^\tau d\hat{W}(t) \circ f(t, \hat{W}(t)) := \lim_{\Delta t \to 0} \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\xi}_{\Delta t}(t_n) f\left(t_n, \hat{W}_{\Delta t}\left(\frac{t_n + t_{n+1}}{2}\right)\right)$$

確率解析の現代的意味

- 伊藤清(1915-2008:京大名誉教授)は確率過程の基礎を確立
- ファイナンス（金融工学）の父
  - 本人は嫌がっていた
- ウォール街は確率解析で株価を予測
  - 世界経済は伊藤の掌の中で動いている。

https://en.wikipedia.org/wiki/Kiyosi_It%C3%B4

目次

- アインシュタインの奇跡の年(1905年)
- ブラウン運動
  - プレヒストリー
  - アインシュタインの理論(1905,1906)とその歴史的意義
- ブラウン運動を記述する数学的理論
  - ランダムウォーク
  - 伊藤積分等
- **現代の確率論的熱力学への応用**

現代の確率論的熱力学

- 熱力学は通常、極めて多くの自由度が必要
- ナノスケールでは必ずしも系の大きさは大きくない。
- 確率解析を使うと一本の粒子軌道をベースに相対エントロピーの単調性と非負性を利用して熱力学を構成する事が可能。
  – その際はストラトノビッチ型積を使うと便利
  – その指摘は1997年（関本謙による）

相対エントロピー

- カルバック･ライブラー情報量とも呼ばれる。
- p_i, q_i:2つの離散確率分布

$$D(\boldsymbol{p}||\boldsymbol{q}) := \sum_j p_j \ln \frac{p_j}{q_j}$$

- 非負性 $$D(\boldsymbol{p}||\boldsymbol{q}) \geq 0$$
- 単調性:確率が非負で全確率の和が1を保つと$(p, q) \to (p', q')$で $$D(\boldsymbol{p}||\boldsymbol{q}) \geq D(\boldsymbol{p}'||\boldsymbol{q}')$$

相対エントロピーの補足

- 証明は初等的ですが、省略
- 相対エントロピーは非負なので確率分布空間の距離と呼ぶことがある。
  - 但し対称性がなく、三角不等式を満たさないので距離ではない。
- 禁止則を決めている。=>熱力学第二法則
- 元の出どころが情報幾何なので、熱力学を情報理論で再構成できる。

現代の熱力学の基礎

- ゆらぎの定理(Evans & Morriss, 1993)

$$\frac{\mathrm{Prob}(\hat{\sigma} = \Sigma)}{\mathrm{Prob}^{\dagger}(\hat{\sigma} = -\Sigma)} = e^{\Sigma}$$

$\mathrm{Prob}^{\dagger}$　時間反転軌道に関する確率

- 証明は大学院生レベル
- ゆらぎの定理からゆらぎと散逸の関係式や、久保公式を導出可能。

現代的熱力学の課題

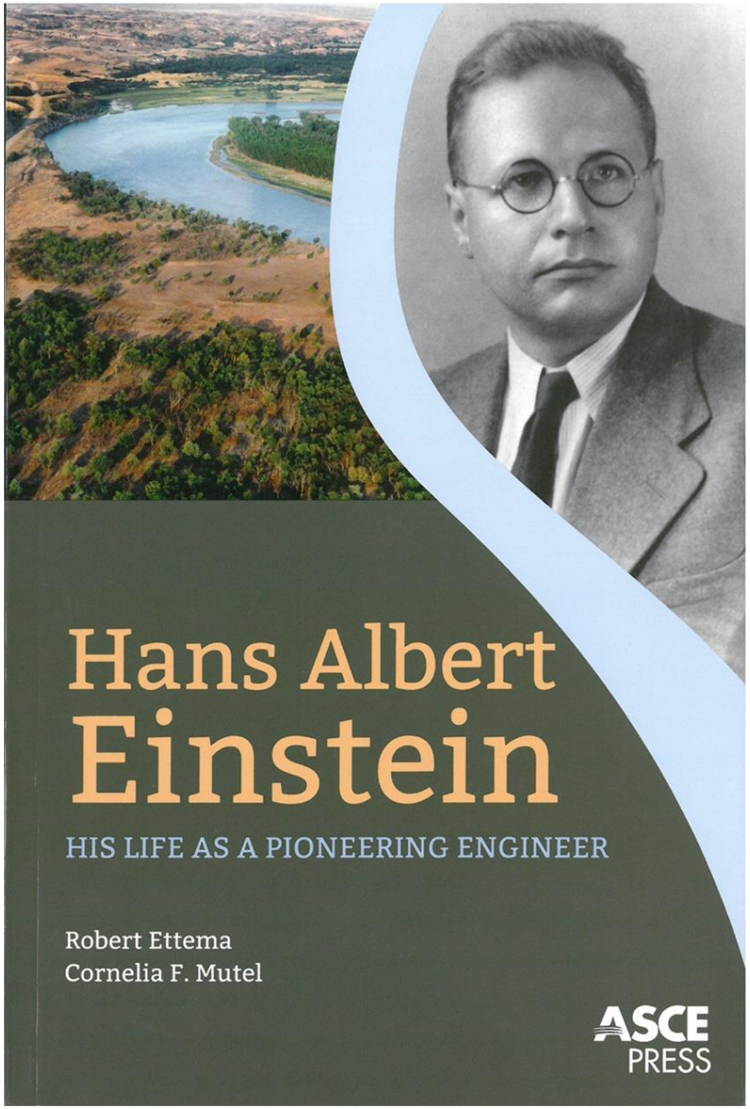
- 有限時間熱力学での仕事率と効率のトレードオフ関係式
  - カルノーサイクルは効率最大だが、仕事率ゼロなので使えない。
  - 仕事率最大を有限時間熱力学では論じる。
- 熱力学の幾何学化
- その他：変なこと
  - 物理学者は法則を作っては、その例外を探す

まとめ

- アインシュタインのブラウン運動の理論をベースにその歴史的意義と現代的な発展を追ってみた。
- アインシュタインの理論
  - 非平衡物理の最初の理論
  - 現代的熱力学の基礎を与える。

アインシュタインの息子

- ハンス・アルベルト・アインシュタイン(1904-73)
- 水理学、流砂の研究で知られる。
- 身近な物理現象は泥臭く、案外未解決



YUKAWA INSTITUTE FOR THEORETICAL PHYSICS

参考文献

- A. パイス「神は老獪にして-アインシュタインの人と学問-」(産業図書, 1987)
- A. Einstein, Investigation on the theory of the Brownian movement (Dover, 1956).
- 早川尚男「非平衡統計力学」（サイエンス社,2007）
- N. Shiraishi, “An introduction to stochastic thermodynamics” (Springer, 2022 or 2023).

数学的補足

- 指数関数　$e^x := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$
- 自然対数　$\mathrm{y} = \ln x \leftrightarrow x = e^y$
  - 時として$\log x$: これも自然対数
- $\frac{\partial f(x,y)}{\partial x} := \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x,y) - f(x,y)}{\Delta x}$