熱・統計力学と数学

熱・統計力学と情報理論・情報幾何の関係を例にして

伊 藤　創 祐

1. 公開にあたって

この原稿は"「数理科学」Vol.61-5, pp.30-36, サイエンス社，2023"中の記事"伊藤創祐，熱・統計力学と数学—熱・統計力学と情報理論・情報幾何の関係を例にして"の原稿バージョンになります．発売から１ヶ月以上経過してからサイエンス社の公開の条件に則って記事を公開しています．公開にあたって一部引用などの修正を行っています．

2. はじめに

この度,「物理を学ぶ・研究する上で数学とどのように向き合うのか」というテーマでこの原稿を依頼されたのだが, 私は物理学と数学について考えるとき, 学生の時に読んだある文をよく思い出す．それは熱・統計力学の名著である久保亮五編による『大学演習　熱学・統計力学』の序にある次の文である;「物理の問題を考えるときには, 何より大切なことは, それを物理の問題としてつかむことである．数学的な計算は面倒なこともあるし, また技巧を要することもある．それらの訓練も決して等閑視してはならないが, 数学に目がくらんで物理の問題がなんであったか忘れるようではこまる.」．この文の通り, 物理の研究をする上では, 例え数学的な概念を多用したとしても物理の問題そのものの意味・意義こそが重要であるべきである.

しかしながら, 熱力学や統計力学の学習・研究において, 数学の知識は欠かすことができず, 数学自体は有用なツールであるのもまた事実である．熱力学や統計力学ではさまざまな数学的なテクニックを駆使する場面が多く, また関連する数学的なテクニックの発祥そのものが統計力学の歴史と密接に関わっていることも相まって, ともすれば数学的な手法の理解や概念の習得に多くの勉強時間を割きがちである．また研究においては, 数学的な手法の開発も統計力学の研究の重要な要素となっており, 開発された数学そのものが統計力学の一分野とみなされているような状況もある.

このような状況で, 健全な「物理学者」としてはどのように数学に向き合うべきだろうか．健全性を保つためには, 「物理学」として習う一連の数式テクニックや計算のどこまでが数学的な事実で, 逆にどこが物理的な主張なのか, ということを自分の中で整理する作業が重要だと私は考えている．このような整理をする御利益として, 物理の計算の中で致命的な数学的誤りをしないことや, 数学的にあまり考察されてなくても物理的な視点から本来やっていいことを把握することができることが挙げられる．また他にも, 物理的に自然な状況設定を新規に数学化することや, もしくは物理学者が解きたい問題を既存の数学の手法の駆使によって解く, という研究を行うこともできるかもしれない.

実際, 私自身は非平衡系の熱力学及び統計力学

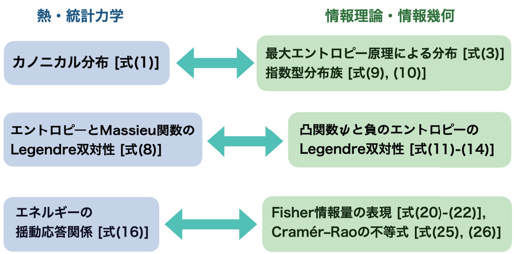

図 1　本稿で取り扱う, 熱・統計力学と情報理論・情報幾何との対応関係.

における, 情報理論やその周辺分野である情報幾何などとの関わりについて研究を行ってきた. その際には情報理論や情報幾何などの数学の知識は必要不可欠であったし, また物理学に動機付けられた問題意識から, 数学そのものの拡張を行うこともあった. そのような研究を行う過程で私は, 学部で習うような基礎的な平衡熱力学や平衡統計力学の主張のうち, どの主張が本質的に数学的な主張で情報理論・情報幾何のどの主張に対応しているか, ということを独自に整理してきた.

本稿ではそのような整理によって得られた私自身の知見の一部 (図 1 を参照) を紹介することで ,「物理を学ぶ・研究する上で数学とどのように向き合うのか」というテーマに回答したいと考えている. 私の整理や研究の仕方から, 数学との向き合い方について読者にとって何か考える材料になれば幸いである.

3. 平衡統計力学におけるカノニカル分布

まず平衡統計力学における最も大事な出発点である**カノニカル分布**について述べ, そのカノニカル分布に関する物理的な事実を俯瞰してみよう. 今, $N \in \mathbb{N}_{>0}$ 個ある離散な微視的な状態を $i \in \{1, \ldots, N\}$ (もしくは $j \in \{1, \ldots, N\}$) で表すことにしよう. 正の値で与えられる逆温度 $\beta \in \mathbb{R}_{>0}$ で性質が決まる単一の熱浴に系が接触している場合, 十分時間が経った後は系はマクロにみて変化がない平衡状態に達し, その平衡状態における微視的状態 i を取る確率分布は, 微視的状態 i のエネルギー $E_i \in \mathbb{R}$ を用いて

$$p_i^{\mathrm{eq}} = \frac{\exp[-\beta E_i]}{\sum_{j=1}^{N} \exp[-\beta E_j]}, \tag{1}$$

で与えられる. この確率分布をカノニカル分布という. このカノニカル分布が確率分布であることは, 定義より任意の $i \in \{1, \ldots, N\}$ で $p_i^{\mathrm{eq}} \geq 0$ を満たし, $\sum_{i=1}^{N} p_i^{\mathrm{eq}} = 1$ であることから確かめられる. また本稿では以降 Boltzmann 定数 k_{B} を 1 とするような単位系を採用し, 逆温度 β は温度 T を用いて記述すると $\beta = 1/T$ で表されるとする.

この記述は若干数学的に書いているものの, 物理的な主張そのものである. つまり, 平衡状態が十分時間が経った後で達成されるという物理的な観測事実を疑うことなく導入し, また熱浴の逆温度 β や微視的状態 i のエネルギー E_i の存在も, 実際に何らかの実験によって物理的な測定により定量化できることを前提に自明であるとした上で, 平衡状態での微視的な状態 i の確率としてこのカノニカル分布を同定するのである. このカノニカル分布が実際に平衡状態の確率を与えることは, さまざまな物理的な仮定を前提に証明されうるが, 究極的には物理的な実験測定事実からしか正当化は不可能である.

一方で, このカノニカル分布の形は情報理論などの数学理論の中で度々目にする普遍的な分布の形である. よってこの普遍的な分布に関する様々な数学的な事実が存在する. また, 先ほど「さまざまな物理的な仮定を前提に証明されうる」と書いたように, 統計力学の教科書を読むとより基本的な物理的な原理からの「導出」が書かれている. このような物理的な「導出」において, 何が数学的な事実であり, どこに導出の数学的なエッセンスがあるかを確かめておくのは有用である.

数学的には, カノニカル分布はある仮定の下で, 以下のように「導出」できる. 以降, 本稿では $p_i > 0$ かつ $\sum_i p_i = 1$ を満たす確率分布を $\boldsymbol{p} = \{p_i | i \in \{1, \ldots, N\}\}$ とベクトル表記でかこう. ここで今, 状態 $i \in \{1, \ldots, N\}$ を引数にもつ量 $\epsilon_i \in \mathbb{R}$ に対する確率分布 $\boldsymbol{p}$ による期待値を $\langle \epsilon \rangle_{\boldsymbol{p}} = \sum_{i=1}^{N} p_i \epsilon_i$ とする. この時, 期待値 $\langle \epsilon \rangle_{\boldsymbol{p}}$ が

ある値 $\langle \epsilon \rangle_{\boldsymbol{p}} = \mathcal{E} \in \mathbb{R}$ になるように固定したもとで, $H(\boldsymbol{p}) = -\sum_{i=1}^{N} p_i \ln p_i$ で定義される **Shannon エントロピー**の最大化問題を考えると, その時に得られる確率分布はカノニカル分布と同じ形を持つ．これを次のように数学的事実 1 としてまとめよう．

数学的事実 1　最適化問題

$$\boldsymbol{p}^* = \arg\max_{\boldsymbol{p}} H(\boldsymbol{p}) \quad \text{s.t.}\ \langle \epsilon \rangle_{\boldsymbol{p}} = \mathcal{E}, \tag{2}$$

の解 $\boldsymbol{p}^* = \{p_i^* | i \in \{1, \ldots, N\}\}$ は

$$p_i^* = \frac{\exp[-\theta \epsilon_i]}{\sum_{i=1}^{N} \exp[-\theta \epsilon_i]}, \tag{3}$$

で与えられる．ただし $\theta \in \mathbb{R}$ は $\langle \epsilon \rangle_{\boldsymbol{p}^*} = \mathcal{E}$ を満たす定数である．

この事実は, Lagrange 未定乗数法を使って, $\langle \epsilon \rangle_{\boldsymbol{p}} = \mathcal{E}$ と確率の規格化 $\langle 1 \rangle_{\boldsymbol{p}} = \sum_i p_i = 1$ という二つの拘束条件を考慮した次のような関数

$$\mathcal{L} = H(\boldsymbol{p}) + \theta(\langle \epsilon \rangle_{\boldsymbol{p}} - \mathcal{E}) + \lambda(\langle 1 \rangle_{\boldsymbol{p}} - 1), \tag{4}$$

に対して, 任意の i に対し極値問題 $\partial_{p_i} \mathcal{L}|_{\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}^*} = 0$ を考え, $\sum_{i=1}^{N} p_i^* = 1$ を満たすように Lagrange 乗数 λ を決めることで示すことができる．ここで定数 θ は Lagrange 乗数に対応しているため, 対応する $\langle \epsilon \rangle_{\boldsymbol{p}} = \mathcal{E}$ の拘束条件によって決定することが可能である．またこの極値問題が最大値問題になっていることは任意の i で $(\partial_{p_i}^2)\mathcal{L} < 0$ および, $i \neq j$ を満たす任意の i, j で $\partial_{p_i} \partial_{p_j} \mathcal{L} = 0$ となることより確かめられる．

よってこの「導出」に基づくと, カノニカル分布はエネルギー期待値 $\langle E \rangle_{\boldsymbol{p}}$ を固定した下で Shannon エントロピー $H(\boldsymbol{p})$ が最大化された分布だと思うことができる．物理としてこの主張は, エネルギー期待値 $\langle E \rangle_{\boldsymbol{p}}$ を固定することはマクロな系に接触した平衡系でエネルギー期待値が変化しないこと, また Shannon エントロピー $H(\boldsymbol{p})$ の最大化は, 平衡化の際はエントロピー最大化 (MaxEnt) が行われるという原理として正当化されるだろう．実際, この事実は**最大エントロピー原理**として E. T. Jaynes によって物理として詳しく議論された[1)]．

このような数学的な事実 1 を踏まえると, 何が言えるだろうか．まずは数学としての拡張について述べたい．数学的事実 1 におけるカノニカル分布の「導出」はただの数学的な事実であるため, この導出における仮定を「加えたり」,「減らしたり」と変更することで, カノニカル分布とは異なる分布が出る状況を考えることができるだろう．例えば物理的に達成しうるグランドカノニカル分布や一様分布は, この MaxEnt における拘束条件の違いとして表現可能である．粒子数を微視的な状態として導入し, エネルギー期待値の拘束条件に加えて粒子数期待値についての拘束条件も加えれば, グランドカノニカル分布が MaxEnt から得られるだろう．またエネルギー期待値の拘束条件を課さない場合は, 一様分布が MaxEnt から得られる．このように拘束条件を変更することで数学的には様々な結果を得ることができ, この MaxEnt は今では物理的な視点を離れて情報理論の数学としてよく研究されている．

またこの数学的な事実 1 に基づいた物理的な拡張についても述べたい． 本稿では平衡状態におけるカノニカル分布を導出するための道具として Shannon エントロピー $H(\boldsymbol{p})$ を導入したが, 非カノニカル分布 $\boldsymbol{p}$ で微視的な状態の確率が実現されている非平衡な状態においても, この量 $H(\boldsymbol{p})$ を非平衡な状態における小さな系のエントロピーと同一視して, 小さな非平衡系の振る舞いを捉えようとする考え方がある．このような同一視はゆらぎの熱力学 (stochastic thermodynamics)[2)] の分野では主流であり, このゆらぎの熱力学の分野では, 情報理論で議論されてきた Shannon エントロピー $H(\boldsymbol{p})$ に関する様々な数理的な性質から, 小さな非平衡系における物理的な振る舞いを議論することが行われている．実際, 我々もゆらぎの熱力学の研究の中で, 情報理論を駆使して非平衡な系の物理的な振る舞いについて調べる研究を行ってきた (例えば文献[3)]など)．

4. 平衡熱力学における Legendre 双対性

次に平衡統計力学における平衡熱力学との関わりを, 数学的な側面から捉えてみよう．ご存知の通り, 平衡統計力学は平衡状態において期待値の意味で平衡熱力学と対応づくように構成されている．平衡熱力学はマクロな系における物理的な観測事実から積み上げられてきた理論体系であるため, 統計力学が物理的に妥当であるためには期待値の意味で平衡熱力学の結論と整合的でなければならない.

実際, 平衡統計力学では, カノニカル分布における規格化からくる分配関数

$$Z = \sum_{i=1}^{N} \exp[-\beta E_i], \tag{5}$$

を用いて, **Helmholtz の自由エネルギー**を

$$F = -\beta^{-1} \ln Z, \tag{6}$$

の形で定義する．この定義は平衡熱力学で導入される Helmholtz の自由エネルギーと, 平衡状態において期待値の意味で整合的になることからきている．実際, この定義に基づくと, エネルギーの期待値は

$$\langle E \rangle_{\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}} = \partial_\beta[\beta F] = \partial_\beta[\beta \langle F \rangle_{\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}}], \tag{7}$$

でかける．ただし, ここでは Helmholtz の自由エネルギー F は状態 i に依存しないので $F = \langle F \rangle_{\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}}$ と, 期待値をとっても同じ値を持つことを用いている．よって, 平衡熱力学における Helmholtz の自由エネルギー $\bar{F}$ を用いたエネルギー $\bar{E} = \partial_\beta(\beta \bar{F})$ の定義と, 平衡統計力学の式 (7) は期待値の意味で同じ形を満たしていることがわかる．ただし, ここでは混乱を避けるため, 平衡熱力学の熱力学ポテンシャルを意味するときは $\bar{E}$, $\bar{F}$ のように上に線をつけている.

また, 平衡分布における Shannon エントロピーを計算すると, $p_i^{\mathrm{eq}} = \exp[-\beta(E_i - F)]$ より,

$$\begin{aligned} H(\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}) &= \beta\langle E \rangle_{\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}} - \beta\langle F \rangle_{\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}} \\ &= \beta\partial_\beta[\beta\langle F \rangle_{\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}}] - \beta\langle F \rangle_{\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}}, \end{aligned} \tag{8}$$

と計算ができるため, Shannon エントロピー $H(\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}})$ は平衡熱力学におけるエントロピー $\bar{S} = (\bar{E} - \bar{F})/T$ に相当していることがわかる．またこの式 (8) は **Legendre 変換**とみなすことができる．すなわち関数 $H(\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}})$ は β を引数とする関数 $\beta\langle F \rangle_{\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}}$ の Legendre 変換として与えられていることがわかる．この事実は平衡熱力学において, 逆温度 β を引数にもつ熱力学ポテンシャルである Massieu 関数 $\bar{\Psi} = -\beta\bar{F}$ と, エネルギー $\bar{E}$ を引数にもつ熱力学ポテンシャルであるエントロピー $\bar{S}$ との間の Legendre 双対性に相当している.

ではこの平衡統計力学における Legendre 双対性について数学的な立場から見ていこう．出発点を, Shannon エントロピー最大化問題として得られる確率分布 $\boldsymbol{p}^*$ としよう．ただし, 今 $\boldsymbol{p}^*$ はパラメータ θ の関数であることを明示的に $\boldsymbol{p}^*(\theta)$ と書き, また i 番目の成分 $p_i^*(\theta)$ を

$$p_i^*(\theta) = \exp[\theta(-\epsilon_i) - \psi(\theta)], \tag{9}$$

$$\psi(\theta) = \ln\left[\sum_{i=1}^{N} \exp[\theta(-\epsilon_i)]\right], \tag{10}$$

とし, $\psi(\theta)$ で規格化項を記述することにする．このようなパラメータ θ できまる分布 $p_i^*(\theta)$ の θ 依存性が, 指数の肩に一次の形で与えられる確率分布のクラスは, 数学的には**指数型分布族**と呼ばれている．また $\mathcal{P} = \{\boldsymbol{p}^*(\theta) | \theta \in \mathbb{R}\}$ のようにパラメータ θ を変えることで取れる確率分布 $\boldsymbol{p}^*(\theta)$ の集合 $\mathcal{P}$ を空間とみなすと, パラメータ θ はこの空間 $\mathcal{P}$ 上の座標とみなすことができる．このように指数型分布族のパラメータ θ を分布の集合の空間 $\mathcal{P}$ における座標とみなしたときの幾何学的な性質は情報理論の一分野である情報幾何[5)]でよく調べられている.

情報幾何の分野では指数型分布族の規格化項 $\psi(\theta)$ の θ に対する凸性から計量が導入できるため, よくこの凸性が考察される．実際, 情報幾何においては凸関数 $\psi(\theta)$ の Legendre 変換が議論され, Legendre 変換によって得られる双対な凸関数が負の Shannon エントロピー $-H(\boldsymbol{p}^*(\theta))$ になることと, θ と双対な座標 η が期待値 $-\langle \epsilon \rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta)}$ で与

えられることがよく知られている．このよく知られている数学的事実を明示的にまとめ直すと次のようになる．

数学的事実 2　$\psi(\theta)$ は下に凸な関数であり, Legendre 変換は次のようにかける．

$$\varphi(\eta) = \theta^*\eta - \psi(\theta^*), \tag{11}$$

$$\theta^* \in \arg\max_\theta[\theta\eta - \psi(\theta)], \tag{12}$$

$$\eta = \partial_\theta\psi(\theta)|_{\theta=\theta^*} = -\langle\epsilon\rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta^*)}. \tag{13}$$

ここで $\psi(\theta)$ の Legendre 変換で得られる関数 $\varphi(\eta)$ は負の Shannon エントロピー

$$\varphi(\eta) = -H(\boldsymbol{p}^*(\theta^*)), \tag{14}$$

で与えられる．

この事実は以下のように確かめられる．まず $\psi(\theta)$ が下に凸な関数なことは

$$(\partial_\theta)^2\psi(\theta) = \langle(\epsilon - \langle\epsilon\rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta)})^2\rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta)} \geq 0, \tag{15}$$

のように二回微分が ϵ の分散で与えられることより, 常に非負であることから確かめられる． 式 (13) の前半部 $\eta = \partial_\theta\psi(\theta)|_{\theta=\theta^*}$ は θ^* が極値条件 $\partial_\theta[\theta\eta - \psi(\theta)]|_{\theta=\theta^*} = 0$ から与えられることからわかる．また後半部 $\partial_\theta\psi(\theta)|_{\theta=\theta^*} = -\langle\epsilon\rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta^*)}$ は．$\partial_\theta\psi(\theta)|_{\theta=\theta^*}$ を直接計算することで確かめられる．また式 (14) は実際 $H(\boldsymbol{p}^*(\theta^*)) = \psi(\theta^*) + \theta\langle\epsilon\rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta^*)}$ と計算できることから確かめられる．

つまり, この数学的な事実を踏まえて $\boldsymbol{p}^*(\theta^*) = \boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}$, $\epsilon_i = E_i$, $\theta^* = \beta$, $\psi(\theta^*) = -\beta F$ と置くことで, 平衡統計力学におけるエントロピーと Massieu 関数の間の Legendre 双対性の起源は, 数学的には平衡分布であるカノニカル分布が指数型分布族であることによる帰結だと考えることができるだろう．

このような Legendre 双対性の数学的な構造を理解することで, どういう御利益があるだろうか．例えば, 統計力学に基づかない平衡熱力学においても Legendre 双対性を考察することができるため, エントロピー $\bar{S}$ や逆温度 β を座標とした平衡熱力学における幾何学を情報幾何と同じ枠組みで構築することができるだろう．そのような非統計力学的な熱力学的な幾何学に関連するものとして Ruppeiner 幾何[4)]の研究が挙げられる．また我々も化学物質の粒子数や濃度で記述される非統計力学的な熱力学である化学熱力学において, 情報幾何学を非確率分布の空間に拡張することで化学熱力学における幾何学を導入する研究を行っている[6~8)]．

また数学的には有限状態の離散確率分布は常に複数パラメータで記述される指数型分布族とみなせることが知られている．Legendre 双対性に起因するような熱力学的な構造は一般に指数型分布族に起因していると考えられるため, 平衡分布でない一般の分布でも何らかの熱力学的な構造が成り立つことが予想できる．よって, 確率分布が時間発展するような非平衡な系においても, 情報幾何が何らかの非平衡熱力学の性質を表現できるかもしれないと我々は考え, 非平衡熱力学における幾何構造に関して様々な考察をしている (例えば文献[8~12)].)．

5. 平衡状態におけるゆらぎと応答

平衡統計力学において, エネルギー期待値 $\langle E\rangle_{\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}}$ のみならず, エネルギーの分散 $\langle(E - \langle E\rangle_{\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}})^2\rangle_{\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}}$ という平衡状態におけるエネルギーのゆらぎに興味がもたれることがある．この平衡状態におけるエネルギーのゆらぎは, 定積熱容量 $C_V = \partial_T\langle E\rangle_{\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}}$ との間に

$$\langle(E - \langle E\rangle_{\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}})^2\rangle_{\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}} = T^2 C_V, \tag{16}$$

のような比例関係が成り立つことが知られている．実際, この比例関係は,

$$\langle E\rangle_{\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}} = -\partial_\beta \ln Z, \tag{17}$$

$$\partial_\beta^2 \ln Z = \langle(E - \langle E\rangle_{\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}})^2\rangle_{\boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}}, \tag{18}$$

という二つの式の表現と $\partial_\beta = -T^2\partial_T$ を用いることで示すことができる．この結果の物理的な意味は, 平衡近傍において, 温度というパラメータを変化させたときのエネルギー期待値の応答性能、す

なわち定積熱容量 C_V が, 自身のゆらぎの大きさによって決まることを意味している．このような平衡近傍の物理量のゆらぎと, その物理量の期待値のパラメータ変化に対する応答性の間の比例関係は, 様々な設定の下でエネルギー以外の物理量にも普遍的に成り立つことが知られており, このような関係式は一般に**揺動応答関係**と呼ばれている．この関係式 (16) は平衡統計力学で最も初等的に導出可能な, エネルギーに関する揺動応答関係である．

この揺動応答関係の数理的な起源について, 数学的な立場から考えていこう．この揺動応答関係の数理的な起源は, **Fisher 情報量**と呼ばれる量を用いた関係式と捉えることが可能である．確率分布 $\boldsymbol{p}$ に対して, パラメータ $\theta \in \mathbb{R}$ に関する Fisher 情報量 $I_{\boldsymbol{p}}(\theta)$ は, 次のように定義される,

$$I_{\boldsymbol{p}}(\theta) = \langle (\partial_\theta \ln p)^2 \rangle_{\boldsymbol{p}}. \tag{19}$$

この Fisher 情報量について, 次のような数学的な事実が知られている．

数学的事実 3　指数型分布族 $\boldsymbol{p}^*(\theta)$ に対して, Fisher 情報量 $I_{\boldsymbol{p}^*(\theta)}(\theta)$ は.

$$I_{\boldsymbol{p}^*(\theta)}(\theta) = \langle (\epsilon - \langle \epsilon \rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta)})^2 \rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta)}, \tag{20}$$

または,

$$I_{\boldsymbol{p}^*(\theta)}(\theta) = -\langle (\partial_\theta)^2 \ln p^*(\theta) \rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta)} \tag{21}$$

$$= -\partial_\theta \langle \epsilon \rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta)}, \tag{22}$$

で与えられる．

まず式 (21) を示すには, $\sum_i p_i = 1$ より, $\sum_i (\partial_\theta)^2 p_i = 0$ であることに注意して,

$$\begin{aligned} &-\langle (\partial_\theta)^2 \ln p \rangle_{\boldsymbol{p}} \\ &= \sum_i \frac{(\partial_\theta p_i)^2}{p_i} - \sum_i (\partial_\theta)^2 p_i \\ &= \sum_i p_i (\partial_\theta \ln p_i)^2 = I_{\boldsymbol{p}}(\theta), \end{aligned} \tag{23}$$

より確かめられる．また残りの式は, $-\ln p_i^*(\theta) = \theta\epsilon_i + \psi(\theta)$, $\partial_\theta \psi(\theta) = -\langle \epsilon \rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta)}$ を用いれば良い．

この数学的事実 3 による Fisher 情報量の等価な表現により, 一般の指数型分布族に対して

$$\langle (\epsilon - \langle \epsilon \rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta)})^2 \rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta)} = -\partial_\theta \langle \epsilon \rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta)}, \tag{24}$$

が成立することがわかる．上述の揺動応答関係 (16) は $\boldsymbol{p}^*(\theta) = \boldsymbol{p}^{\mathrm{eq}}$ のときに $\theta = \beta$, $\epsilon_i = E_i$ とした特殊な場合だと捉えることができる．このように, 揺動応答関係は Fisher 情報量と密接に関係していることがわかる．

また分布 $\boldsymbol{p}$ が指数分布族かどうかによらず, 一般に Fisher 情報量 $I_{\boldsymbol{p}}(\theta)$ に対して, 任意の物理量 $R_i \in \mathbb{R}$ のゆらぎに対して成立する次のような Cramér–Rao の不等式が知られている,

$$\langle (R - \langle R \rangle_{\boldsymbol{p}})^2 \rangle_{\boldsymbol{p}} \geq \frac{(\partial_\theta \langle R \rangle_{\boldsymbol{p}})^2}{I_{\boldsymbol{p}}(\theta)}. \tag{25}$$

これは任意の物理量のゆらぎ $\langle (R - \langle R \rangle_{\boldsymbol{p}})^2 \rangle_{\boldsymbol{p}}$ の下限が Fisher 情報量の逆数で抑えられることを意味している．そして, この不等式はある種の揺動応答関係の一般化とみなすことができるだろう．実際, 一つのパラメータ θ で記述される指数型分布族 $\boldsymbol{p}^*(\theta)$ に対しては, $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}^*(\theta)$ のときに $R_i = \epsilon_i$, $I_{\boldsymbol{p}}(\theta) = -\partial_\theta \langle \epsilon \rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta)}$ とすれば, 式 (24) は

$$\langle (\epsilon - \langle \epsilon \rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta)})^2 \rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta)} = \frac{(\partial_\theta \langle \epsilon \rangle_{\boldsymbol{p}^*(\theta)})^2}{I_{\boldsymbol{p}^*(\theta)}(\theta)}, \tag{26}$$

と Cramér–Rao の不等式が等号成立している特殊な状況であることがわかるだろう．　よって, Cramér–Rao の不等式は揺動応答関係の一般化とみなすことができる．

実際, 我々はこのような知見に基づいて, Fisher 情報量の数理を用いて非平衡な状況における揺動応答関係の一般化に関する研究を行なっている．例えば, 確率分布が時間 $t \in \mathbb{R}$ に依存するような非定常なダイナミクスの場合には, 時間に依存する分布 $\boldsymbol{p}(t)$ から定義される Fisher 情報量 $I_{\boldsymbol{p}(t)}(t)$ は, 時刻 t における任意の物理量 R_i のゆらぎ $\langle (R - \langle R \rangle_{\boldsymbol{p}(t)})^2 \rangle_{\boldsymbol{p}(t)}$ に対する限界を与えることが, Cramér–Rao の不等式からわかるだろう．この式を用いて, 非平衡かつ非定常な状態におけるある時刻 t のゆらぎ $\langle (R - \langle R \rangle_{\boldsymbol{p}(t)})^2 \rangle_{\boldsymbol{p}(t)}$ と, $\partial_t \langle R \rangle_{\boldsymbol{p}(t)}$

で定義されるような時間に対する応答, すなわち期待値の時間発展スピード, との関係を作ることが可能である[13]. また, 情報幾何においては時間に関する Fisher 情報量 $I_{\boldsymbol{p}(t)}(t)$ は確率分布の集合からなる多様体上での速度の二乗とみなすことができ, 非平衡ダイナミクスの速度に関する様々な限界を Fisher 情報量の数理を用いて導出することが可能である.

6. 結びに代えて - 幾何学と非平衡熱力学

最後に結びに代えて, 節々で語ってきた我々が行った研究に関連して, 現在自身がどういう研究を目指しているかについて, もう少し言及させていただきたい. 私の個人的な研究の話で恐縮ではあるが, 読者が「物理を学ぶ・研究する上で数学とどのように向き合うのか」について, 何か考えるきっかけになればと思う.

私自身の興味の対象は未だ未完成とされている平衡状態を離れた非平衡・非定常な状態における熱・統計力学を, すでに完成したとされる平衡熱・統計力学の一般化としてどのように構築できるか, ということである. この一般化の際に重要となるのは, 平衡熱・統計力学における結果の一般化を与えてくれる情報理論・情報幾何の数学だろうと我々は考えている. なぜならば, これまでみたように平衡状態における確率分布に基づいた「平衡統計力学」の結果や, Legendre 双対性に基づいた「平衡熱力学」の結果は, 「情報理論・情報幾何」の数学の結果の特殊なケースとして理解可能だと言えるからである. よって, 平衡状態を離れた非平衡・非定常な状態における熱・統計力学も, 何らかの意味で情報理論や情報幾何の数学の助けを借りながら, 物理的に妥当な形で構築することが可能だろうと考えている.

そのような考えのもと, 現在我々が興味を持って取り組んでいる研究は, 情報幾何や最適輸送理論などの情報理論に関係する幾何を用いて, 非平衡熱力学の幾何学的な理論フレームワークを構築することである. 実際, 今までに得られた結果によると, 熱力学的な散逸であるエントロピー生成や, 物理量のゆらぎ, 物理量の期待値の変化速度などは, Fisher 情報量や, Kullback–Leibler ダイバージェンス, Wasserstein 距離などの幾何学的な情報の指標を用いて捉えることができている. その結果, ある種の省エネルギー性能であったり, もしくは熱力学的な最適化や制御を, 情報の幾何における測地線といったような幾何学的な視点から捉えることができるようになってきた (例えば, 文献[14~16]). このような研究によって非平衡熱力学をある種の「数学化」をすることで, 今まで物理的な事実として知られていた結果を数学的に捉え直すことができ, 拡張や一般化を考えることが容易になった. さらに様々な幾何学的な不等式や幾何学的な事実を「物理的に」読み替えることで, 非平衡系のダイナミクスにおける物理的な制約や新たな見方を数学から提供できるようになってきた.

このように, 私自身は数学の知見や考え方をうまく利用しながら物理の研究をしている, ということもできるかもしれない. しかしながら, やはり私は「物理学者」として, 冒頭に述べたように『数学に目がくらんで物理の問題がなんであったか忘れるようではこまる』ということを念頭に置いておきたいと考えている. 数学的にどれだけ美しくて正確であっても, その数理に物理的な対応物がきちんとあるのか, 主張そのものに何らかの物理的に意味があるか, きちんと測定可能な量で閉じていて, 実験によって検証可能であるか, 物理的な測定や計算上有用であるか, ということは研究する上で常に注意しておきたい. 物理の問題がなんであったかを適切に捉えるある種の「物理的なセンス」こそが, その研究の「物理としての」価値を決めるはずだからである.

参考文献

1) Jaynes, E. T. Phys. Rev., **106**, 620 (1957).
2) Sekimoto, K. Stochastic energetics (Vol. 799). Springer (2010).
3) Ito, S., & Sagawa, T. Phys. Rev. Lett., **111**, 180603 (2013).
4) Ruppeiner, G. Phys. Rev. A, **20**, 1608 (1979).
5) Amari, S. I. Information geometry and its appli-

cations (Vol. 194). Springer (2016).
6) Yoshimura, K., & Ito, S. Phys. Rev. Res, **3**, 013175 (2021).
7) Ohga, N., & Ito, S. Phys. Rev. E, **106**, 044131 (2022).
8) Kolchinsky, A., Dechant, A., Yoshimura, K., & Ito, S. arXiv:2206.14599 (2022).
9) Ito, S. Phys. Rev. Lett., **121**, 030605 (2018).
10) Ito, S., Oizumi, M., & Amari, S. I. Phys. Rev. Res, **2**, 033048 (2020).
11) Ito, S. J. Phys. A, **55**, 054001 (2022).
12) Ohga, N., & Ito, S. Phys. Rev. Res, **6**, 013315 (2024).
13) Ito, S., & Dechant, A. Phys. Rev. X, **10**, 021056 (2020).
14) Nakazato, M., & Ito, S. Phys. Rev. Res, **3**, 043093 (2021).
15) Yoshimura, K., Kolchinsky, A., Dechant, A., & Ito, S. Phys. Rev. Res, **5**, 013017 (2023).
16) Ito, S., Information Geometry, 7(Suppl 1), 441-483. (2024).

（いとう そうすけ，東京大学生物普遍性研究機構）