2004 年度非平衡物理学 授業ノート 11

2005.1.11 担当 吉森 明

4. 不可逆過程と相反定理

4-1. 不可逆過程の現象論[*1]

目標 輸送方程式について式の形と物理的な意味を理解する。具体的には以下のことを分かる。

- ここでいう不可逆過程はある一方向の変化しか起こらない過程の事。
- 輸送方程式は、不可逆過程の数学的な表現になっている。

目次 (1) **4.** の流れ

(2) 不可逆過程と輸送方程式

(3) 数学的な性質

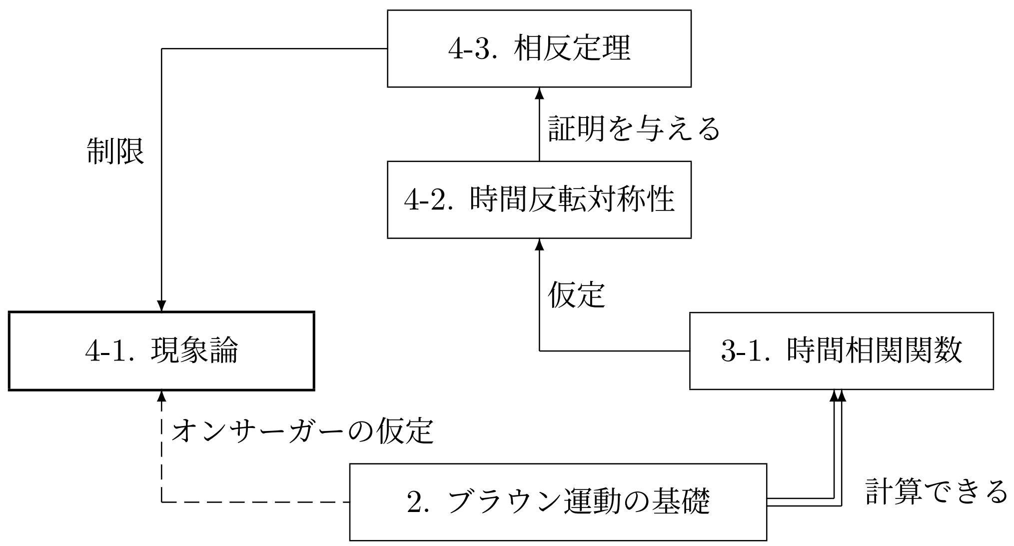
仮定 輸送方程式は一般的に次の様に書ける。

$$\dot{x}(t) = L' \frac{dS'(x)}{dx} \tag{1}$$

ただし、$S'(x)$ **は極値が 1 つしかなくて、それが最大。** その値が x の平衡値。さらに、$L' > 0$

結論 $t \to \infty$ で、必ず平衡値に達する。

(1) 4. の流れ



*1「輸送方程式」という言い方は、一般的でないので、4 も 4-1 も標題を変えて下さい。。

(3) 数学的な性質

(1) 式において、$S'(x)$ の時間変化を考える。

$$\frac{dS'(x)}{dt} = \dot{x}(t)\frac{dS'(x)}{dx} = L'\left(\frac{dS'(x)}{dx}\right)^2 \tag{2}$$

仮定より $L' > 0$ だから

$$\boxed{\frac{dS'(x)}{dt} \geq 0} \qquad S'(x) \text{ は単調増加 (非減少)} \tag{3}$$

だから、任意の x から始めて $dS'(x)/dt = 0$ となる x_{eq} まで、$S'(x)$ は増加しつづける。**仮定**から

$$t \to \infty,\ S' \to S'(x_{\mathrm{eq}}) \text{ つまり } x \to x_{\mathrm{eq}} \tag{4}$$

4-2. 時間反転対称性

目標 孤立系と時間反転対称性と時間相関関数の公式を理解する。具体的には以下のことを分かる。

- すべての自由度を含めた系では初期値が分布すると考えると便利。
- 時間反転対称性はある変数変換についての方程式の性質。
- 孤立系の時間反転対称性から、時間相関関数の性質が導ける。

目次 (1) **4-2.** の位置付け
(2) 孤立系の平均
(3) 時間反転対称性
(4) 時間相関関数の性質
(5) まとめ

仮定 1. 時間相関関数を**時間反転対称性を満たす**孤立系で定義する。(定常過程)
2. ある複数の量 $\{X_\mu\} = \{X_1, X_2, \ldots\}$ を考え、これは q_l, p_l の関数とする。$X_\mu = X_\mu(\{q_l, p_l\})$。

$$X_\mu(\{q_l, -p_l\}) = \epsilon_\mu X_\mu(\{q_l, p_l\}) \qquad ;\epsilon_\mu = \pm 1 \tag{5}$$

結論 時間相関関数について、次の事が成り立つ。

$$\langle X_\mu(-t) X_\nu \rangle = \epsilon_\mu \epsilon_\nu \langle X_\mu(t) X_\nu \rangle \tag{6}$$

(1) 4-2. の位置付け

4-2. **時間相関関数の性質：(6) 式** ← 時間反転対称性

↓ 証明に使う

4-3. オンサーガーの相反定理

(2) 孤立系の平均

○ 平均と時間相関関数

今、ある量 X(t) が考えている系の全ての粒子の位置と運動量 $\{q_l(t), p_l(t)\}$ の関数とする。

$$X(t) = X(\{q_l(t), p_l(t)\}) \tag{7}$$

孤立系を考えているので、$q_l(t), p_l(t)$ は初期値 $q_l(0), p_l(0)$ を与えれば、ニュートン方程式により**完全に決まる。**つまり、$X(t)$ は $q_l(0), p_l(0)$ **と** t **の関数**である。

$$X(t) = X(\{q_l(t), p_l(t)\}) = f(t, \{q_l(0), p_l(0)\}) \tag{8}$$

$q_l(0), p_l(0)$ が分かれば、$q_l(t), p_l(t)$ が完全に分かって、$X(t)$ も分かる。しかしながら、$q_l(0), p_l(0)$ は完全には分からないので、分布を考える。今、$\rho(\{q_l, p_l\})$ を孤立系の分布関数とすると、平均値は、

$$\langle X(t)\rangle = \int d\Gamma f(t, \{q_l, p_l\})\rho(\{q_l, p_l\}) \tag{9}$$

とかける。ここで、$q_l(0) = q_l$、$p_l(0) = p_l$ で、$d\Gamma = \prod_l dq_l dp_l$。

平衡分布 $\rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l, p_l\})$ を使って、時間相関関数を次の様に表すことが出来る。

$$\langle X(t)X(0)\rangle = \int d\Gamma \underset{\substack{\uparrow \\ X(t)}}{f(t, \{q_l, p_l\})} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{初期} \\ \text{(t=0)} \\ \text{の X}}}{X(\{q_l, p_l\})} \underset{\substack{\uparrow \\ \boxed{\text{初期値で平均}}}}{\rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l, p_l\})} \tag{10}$$

X が 2 個以上ある時も同様に

$$\langle X_\mu(t)X_\nu(0)\rangle = \int d\Gamma f_\mu(t, \{q_l, p_l\})X_\nu(\{q_l, p_l\})\rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l, p_l\}) \tag{11}$$

(3) 時間反転対称性

○ 微分方程式の一般的な関係

n 個の変数 $\{X_1, X_2, \ldots, X_n\} = \{X_\mu\}$ に対する常微分方程式を考える。

$$\dot{X}_\mu(t) = f(\{X_\mu(t)\}), \qquad \mu = 1, \ldots, n \tag{12}$$

一般に次の定理が証明できる (宿題 46)。

> **定理** 微分方程式がある変数変換 $X_\mu \to X'_\mu, t \to t'$ に不変である時、$X_\mu(t)$ が解であれば、$X'_\mu(t')$ も解。ただし、初期条件は同じ変数変換で結ばれる。

例: 孤立系でのニュートン方程式

$$\dot{q}_l(t) = \frac{p_l(t)}{m} \tag{13}$$

$$\dot{p}_l(t) = -\frac{\partial V(\{q_l(t)\})}{\partial q_l(t)} \tag{14}$$

は、次の変数変換 (時間反転) に対して不変。

$$t \to t' = -t, \tag{15}$$

$$q_l \to q'_l(t') = q_l(t), \qquad p_l \to p'_l(t') = -p_l(t) \tag{16}$$

なぜなら、(16) 式の両辺を時間で微分すると、

$$-\dot{q}'_l(t') = \dot{q}_l(t), \qquad -\dot{p}'_l(t') = -\dot{p}_l(t) \tag{17}$$

(16) 式と (17) 式を (13) 式と (14) 式に代入

$$-\dot{q}'_l(t') = \frac{-p'_l(t')}{m} \tag{18}$$

$$\dot{p}'_l(t') = -\frac{\partial V(\{q'_l(t')\})}{\partial q'_l(t')} \tag{19}$$

これらは、(13) 式と (14) 式と同じ形をしている。

○ 孤立系の関係式

(13) 式と (14) 式の解を、初期条件 $q_l(0) = q_l^0, p_l(0) = p_l^0$ として、$q_l(t) = q_l(t, \{q_l^0, p_l^0\})$、$p_l(t) = p_l(t, \{q_l^0, p_l^0\})$ と書くと、

$$\boxed{\begin{aligned} q_l(-t, \{q_l^0, p_l^0\}) &= q_l(t, \{q_l^0, -p_l^0\}) \quad (20) \\ -p_l(-t, \{q_l^0, p_l^0\}) &= p_l(t, \{q_l^0, -p_l^0\}) \quad (21) \end{aligned}}$$

例: 自由粒子 (1 次元)

$$\dot{q}(t) = \frac{p(t)}{m} \tag{22}$$
$$\dot{p}(t) = 0 \tag{23}$$

は、

$$q(t, q^0, p^0) = \frac{p^0}{m} t \tag{24}$$
$$p(t, q^0, p^0) = p^0 \tag{25}$$

と解ける (宿題 47)。この場合、(20) 式と (21) 式の左辺は、

$$q(-t, q^0, p^0) = \frac{p^0}{m}(-t) \tag{26}$$
$$-p(-t, q^0, p^0) = -p^0 \tag{27}$$

右辺は、

$$q(t, q^0, -p^0) = \frac{-p^0}{m} t \tag{28}$$
$$p(t, q^0, -p^0) = -p^0 \tag{29}$$

で同じになる。

宿題:

43 (20 点) 電荷を持った粒子が電場の中でブラウン運動する時、授業で説明した久保公式の仮定が成り立たないことを示しなさい。ただし、この場合は、宿題 40 の多変数の場合で、その時の仮定は、

(a) $X_\mu = X_\mu(t), \mu = 1, \ldots, n$ は、不規則に時間変化する物理量。その分布は、フォッカー・プランク (FP) 方程式に従う。

(b) X_μ の分布は、外場をかける前は、外場 0 の平衡状態。

(c) 外場が時間変化しない時、平衡状態はカノニカル分布になる。

(d) $f_\mu(t), \mu = 1, \ldots, n$ を外場とすると、$E(\{x_\mu\}) = E_0(\{x_\mu\}) - \sum_\mu^N x_\mu f_\mu(t)$

の 4 つである。X_1 を荷電粒子の位置、X_2 を速度と考えよ。

44 (30 点) 粗視化された変数が幾つかある時の輸送方程式が

$$\dot{x}_\mu = \sum_\nu L'_{\mu\nu} \frac{\partial S'}{\partial x_\nu} \tag{30}$$

と書ける時、$L'_{\mu\nu} + L'_{\nu\mu}$ を要素に持つ行列が正値 (正定値) であれば、時間無限大で $x_\mu = x_\mu^{eq}$ となる事を示せ。ただし、S' は最大値を 1 つだけ持ち、それを x_μ^{eq} とする。

45 (30 点) さらに、(宮崎ら 1996)

$$\dot{x}_\mu = \sum_\nu \{x_\mu, x_\nu\} \frac{\partial S'}{\partial x_\nu} + \sum_\nu L'_{\mu\nu} \frac{\partial S'}{\partial x_\nu} \tag{31}$$

の場合でも、同じ事がいえるのを示せ。ただし、$\{x_\mu, x_\nu\} = -\{x_\nu, x_\mu\}$ を仮定する。

46 (10 点) 4 ページの**定理**を証明しなさい。ただし、「初期条件は同じ変数変換で結ばれる」というのは、変数変換を $X'_\mu = f(\{X_\mu\})$ と書くと、$X_\mu(0) = f(\{X_\mu(0)\})$ と書ける事を意味する。

47 (10 点) 次の運動方程式を初期値 $q(0) = q^0, p(0) = p^0$ で解きなさい。

(a) $\dot{q}(t) = p(t)/m, \qquad \dot{p}(t) = 0$

(b) $\dot{q}(t) = p(t)/m, \qquad \dot{p}(t) = -kq(t)$