2007 年度非平衡物理学 授業ノート 11

2008.1.9 担当 吉森 明

宿題の締め切り: 宿題の締め切りを

2 月 6 日 (水) 午後 5:00

にします。単位の必要な人は出して下さい。必ず手渡しにして下さい。
　宿題のレポートについては、

http://www.cmt.phys.kyushu-u.ac.jp/~A.Yoshimori/hguidan07.pdf

に PDF ファイルを載せています。

今後の授業の予定: 今日入れてあと 4 回あります。

1 月 9 日	4-2. 時間反転対称性
1 月 16 日	4-3. オンサーガーの相反定理
1 月 23 日	4-3. オンサーガーの相反定理 (続き)
1 月 30 日	5. ブラウン運動の微視的導出 (森理論)

4-2. 時間反転対称性

目標 時間相関関数の新しい性質を理解し、その仮定 (時間反転対称性) を覚える。具体的には以下のことを分かる。

- 孤立系の分布は、初期値が確定しないことにより起こる。
- 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、時間相関関数の新しい性質が導ける。

目次 (1) はじめに
(2) 時間反転対称性
(3) 時間相関関数の性質
(4) 定性的な説明とまとめ

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、これは位置を表す l 番目の正準変数 q_l だけの関数とする。$X_\mu = X_\mu(\{q_l\})$。

結論　時間相関関数について、次の事が成り立つ。

$$\langle X_\mu(t)X_\nu(0)\rangle = \langle X_\mu(-t)X_\nu(0)\rangle \qquad (1)$$

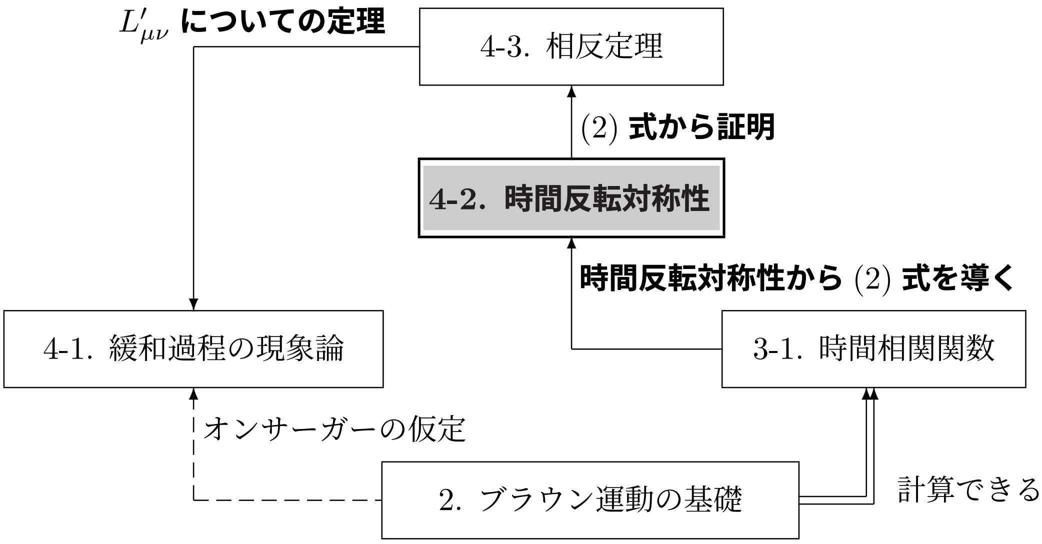
さらに、定常過程から $\langle X_\mu(-t)X_\nu(0)\rangle = \langle X_\nu(t)X_\mu(0)\rangle$ なので、

$$\langle X_\mu(t)X_\nu(0)\rangle = \langle X_\nu(t)X_\mu(0)\rangle \qquad (2)$$

例題　授業ノート 10 の 4-1(3) **例 3** で、2 つある箱のうち左の箱のエネルギーを E_1、電荷を Q_1 とした時、$\langle E_1(t)Q_1(0)\rangle$ と $\langle Q_1(t)E_1(0)\rangle$ は、等しい事を示せ。

(1) はじめに

○ 4-2. の位置付け



○ 孤立系

水中に溶かしたブラウン粒子で説明すると、

これまでの扱い:　微粒子の運動だけに注目。残りはランダム力と考える。

$\updownarrow$

孤立系:　水分子を含めたすべての自由度で考える。

微粒子の位置と運動量: $\mathbf{R}, \mathbf{P}$

水分子の位置と運動量: $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots$

これらをまとめて $\{q_l, p_l\}$ と書く

○ 孤立系での分布

孤立系ではすべての自由度で初期値を決めるとその後の時間発展は一意的に決まる。その場合に、分布は生じるのだろうか。

ランジュバン方程式では、分布の要因として① ランダム力、② 初期値、の 2 つを考えた。孤立系では、① は無いが、② を考える事が出来る。つまり、**孤立系の分布は初期値が要因**。

○ 孤立系の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。

$$X(t) = X(\{q_l(t), p_l(t)\}) \tag{3}$$

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 の関数で書ける。

$$X(t) = X(\{q_l(t), p_l(t)\}) = f(t, \{q_l(0), p_l(0)\}) \tag{4}$$

$q_l(0), p_l(0)$ 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、

$$\langle X(t) \rangle = \int d\Gamma f(t, \{q_l, p_l\}) \rho(\{q_l, p_l\}) \tag{5}$$

と書ける。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。

$$\langle X(t) X(0) \rangle = \int d\Gamma \underset{\substack{\uparrow \\ X(t)}}{f(t, \{q_l, p_l\})} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{初期} \\ \text{(t=0)} \\ \text{の X}}}{X(\{q_l, p_l\})} \underset{\substack{\uparrow \\ \boxed{\text{初期値で平均}}}}{\rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l, p_l\})} \tag{6}$$

X が 2 個以上ある時も同様に

$$\langle X_\mu(t) X_\nu(0) \rangle = \int d\Gamma f_\mu(t, \{q_l, p_l\}) X_\nu(\{q_l, p_l\}) \rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l, p_l\}) \tag{7}$$

(2) 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。

$$\dot{X}_\mu(t) = F(\{X_\mu(t)\}), \qquad \mu = 1, \ldots, n \tag{8}$$

一般に次の定理が証明できる。

定理　ある変数変換 $t \to t' = h(t), X_\mu \to X'_\mu = g_\mu(\{X_\mu\})$ を考える。t について逆に解いて $t = j(t')$ とし、$X'_\mu(t')$ を

$$X'_\mu(t') \equiv g_\mu(\{X_\mu(j(t'))\}), \qquad \mu = 1, \ldots, n \tag{9}$$

で定義した時、逆に解いて $X_\mu(t), t$ を $X'_\mu(t'), t'$ で表し[*1]、(8) 式に代入すると、

$$\dot{X}'_\mu(t') = F(\{X'_\mu(t')\}), \qquad \mu = 1, \ldots, n \tag{10}$$

が得られる時、

$X_\mu(t)$ が (8) 式の解であれば、$X'_\mu(t')$ も (8) 式の解。

定理の証明:

$X_\mu(t)$ が (8) 式の解であるので、$X_\mu(t)$ は (8) 式を満たす。この時、(10) 式が成り立つが、これは (8) 式と同じ形なので、$X'_\mu(t')$ も (8) 式を満たす事が分る。(証明終り)

○ 孤立系でのニュートン方程式

$V(\{q_l(t)\})$ をポテンシャルとすると、

$$\dot{q}_l(t) = \frac{p_l(t)}{m} \tag{11}$$

$$\dot{p}_l(t) = -\frac{\partial V(\{q_l(t)\})}{\partial q_l(t)}, \qquad l = 1, \ldots, n \tag{12}$$

は、次の変数変換 (時間反転) に対して形を変えない。(**時間反転対称性**)

$$t \to t' = -t, \tag{13}$$

$$q_l \to q'_l = q_l, \qquad p_l \to p'_l = -p_l \tag{14}$$

なぜなら、

$$q'_l(t') \equiv q_l(-t'), \qquad p'_l(t') \equiv -p_l(-t') \tag{15}$$

として、これを逆に解くと、

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

[*1] 具体的には、$X'_\mu = g_\mu(\{X_\mu\})$ を逆に解いて $X_\mu = k(\{X'_\mu\})$ とすると、$X_\mu(t) = k(\{X'_\mu(h(t))\})$ とすれば良い。

両辺を t で微分すると、

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

(15) 式と (17) 式を (11) 式と (12) 式に代入、$-t = t'$ だから、

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

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

これらの式は、(11) 式と (12) 式と同じ形をしている。したがって、**定理**から $q_l(t), p_l(t)$ という解があれば、$q_l(-t), -p_l(-t)$ も解だと分る。

例:　自由粒子 (1 次元)

$$\dot{q}(t) = \frac{p(t)}{m} \tag{20}$$

$$\dot{p}(t) = 0 \tag{21}$$

は、

$$q(t) = vt + c \tag{22}$$

$$p(t) = mv \tag{23}$$

という解を持つ。ただし、v と c は定数を表す。

この解に変数変換をほどこすと、

$$q'(t') = q(-t') = -vt' + c \tag{24}$$

$$p'(t') = -p(-t') = -mv \tag{25}$$

これにより、$q(-t), -p(-t)$ が (20) 式と (21) 式を満たす事は容易に分る。

○ 初期値

定理でつくった解の初期値もわかる。すなわち、$q_l(t), p_l(t)$ の初期値を q_l^0, p_l^0 とすると、$q_l(0) = q_l^0, p_l(0) = p_l^0$ となる。新しい解 $q_l(-t), -p_l(-t)$ の初期値は、$q_l(0), -p_l(0)$ だから、これは $q_l^0, -p_l^0$ と表せる。

特に $q_l(t)$ の一般解を $q_l(t) = q_l(t, \{q_l^0, p_l^0\})$ と書くと、$q_l(-t)$ は $q_l(-t, \{q_l^0, p_l^0\})$ と書けるが、これは初期値が $q_l^0, -p_l^0$ の解だから、$q_l(t, \{q_l^0, -p_l^0\})$ とも書ける。つまり、

$$q_l(-t,\{q_l^0,p_l^0\}) = q_l(t,\{q_l^0,-p_l^0\}) \qquad (26)$$

(3) 時間相関関数の性質

今、$X_\mu = X_\mu(t), \mu = 1,\ldots,n$ を q_l だけの関数 ($X_\mu(t) = X_\mu(\{q_l(t)\})$) とする。この場合でも、(4) 式の様に書くことが出来て、初期値を q_l, p_l と書くと、

$$X_\mu(t) = X_\mu(\{q_l(t)\}) = f_\mu(t,\{q_l,p_l\}) \tag{27}$$

と表せる。

(27) 式から $X_\mu(-t) = X_\mu(\{q_l(-t)\}) = f_\mu(-t,\{q_l,p_l\})$ だが、一方、$X_\mu(\{q_l(-t)\})$ の $q_l(-t)$ は $q_l(-t,\{q_l^0,p_l^0\})$ だから、(26) 式を代入すると、

$$X_\mu(\{q_l(-t)\}) = X_\mu(\{q_l(t,\{q_l,-p_l\})\}) = f_\mu(t,\{q_l,-p_l\}) \tag{28}$$

したがって、

$$f_\mu(-t,\{q_l,p_l\}) = f_\mu(t,\{q_l,-p_l\}) \tag{29}$$

この式を使って結論 (1) 式を証明する。

まず、$X_\mu(-t) = f_\mu(-t,\{q_l,p_l\})$ だから、(7) 式から

$$\langle X_\mu(-t)X_\nu(0)\rangle = \int d\Gamma f_\mu(-t,\{q_l,p_l\})X_\nu(\{q_l\})\rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l,p_l\}) \tag{30}$$

(29) 式から

$$= \int d\Gamma f_\mu(t,\{q_l,-p_l\})X_\nu(\{q_l\})\rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l,p_l\}) \tag{31}$$

$p_l \to p_l' = -p_l$ に変数変換して、

$$\langle X_\mu(-t)X_\nu(0)\rangle = \int \prod_l dq_l dp_l' f_\mu(t,\{q_l,p_l'\})X_\nu(\{q_l\})\rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l,-p_l'\}) \tag{32}$$

ここで、

$$\rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l,-p_l\}) = \rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l,p_l\}) \tag{33}$$

つまり、初期値 p_l と $-p_l$ は同じ重み (宿題 68) ということを考慮すると、

$$\begin{aligned}\langle X_\mu(-t)X_\nu(0)\rangle &= \int \prod_l dq_l dp_l' f_\mu(t,\{q_l,p_l'\})X_\nu(\{q_l,p_l'\})\rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l,p_l'\}) \\ &= \langle X_\mu(t)X_\nu(0)\rangle \end{aligned} \tag{34}$$

(4) 定性的な説明とまとめ

○ (1) **式の定性的な説明**

簡単のために 1 次元 1 粒子で考える。その場合は、$\{q_l, p_l\} = \{q, p\}$ となる。(30) 式の被積分関数は、$f_\mu(-t, \{q,p\}) X_\nu(q) \rho_{\mathrm{eq}}(\{q,p\})$ と書け、**時間反転対称性から**$f_\mu(-t, \{q,p\}) = f_\mu(t, \{q,-p\})$ となり、さらに、$\rho_{\mathrm{eq}}(\{q,p\}) = \rho_{\mathrm{eq}}(\{q,-p\})$ だから、

$$f_\mu(-t, \{q,p\}) X_\nu(q) \rho_{\mathrm{eq}}(\{q,p\}) = f_\mu(t, \{q,-p\}) X_\nu(q) \rho_{\mathrm{eq}}(\{q,-p\}) \tag{35}$$

右辺は p で積分すれば、$f_\mu(t, \{q,p\}) X_\nu(q) \rho_{\mathrm{eq}}(\{q,p\})$ を積分したものと同じになるので、(1) 式が導ける。

○ まとめ

- 孤立系の分布は、**初期値が要因**$\longleftrightarrow$ ランジュバン系は、初期値 + ランダム力
- 時間反転対称性: 時間反転という**変数変換**に対して**方程式の形が変わらない**。
  この性質があると、方程式の解にも特別な性質: $q_l(t)$ が解ならば $q_l(-t)$ も解。
- (2) 式は、次の 2 つの式から導ける。
  1. **時間反転対称性**$\rightarrow$(1) 式
     ただし、$\mu = \nu$ は定常過程からだけで導ける。
  2. 定常過程 $\rightarrow \langle X_\mu(-t) X_\nu(0) \rangle = \langle X_\nu(t) X_\mu(0) \rangle$

  2 つとも別の仮定から導ける事に注意しなさい。

付録: 仮定2 の代わりに

仮定　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。
$X_\mu = X_\mu(\{q_l, p_l\})$。

$$X_\mu(\{q_l, -p_l\}) = \epsilon_\mu X_\mu(\{q_l, p_l\}) \qquad ; \epsilon_\mu = \pm 1 \tag{36}$$

と拡張したとき、

結論　時間相関関数について、次の事が成り立つ。

$$\langle X_\mu(t) X_\nu(0) \rangle = \epsilon_\mu \epsilon_\nu \langle X_\mu(-t) X_\nu(0) \rangle \tag{37}$$

あるいは、定常過程から $\langle X_\mu(-t) X_\nu(0) \rangle = \langle X_\nu(t) X_\mu(0) \rangle$ なので、

$$\langle X_\mu(t) X_\nu(0) \rangle = \epsilon_\mu \epsilon_\nu \langle X_\nu(t) X_\mu(0) \rangle \tag{38}$$

を示す。

○ 仮定の例

水中の微粒子 (1 次元)、$\{q_l, p_l\} = \{R, r_1, r_2, \ldots, P, p_1, \ldots\}$: R と P は微粒子の位置と運動量、r_i と p_i は i 番目の水分子の位置と運動量。

微粒子の位置、	$X_1(\{q_l, p_l\}) = q_1 = R$、	$\epsilon_1 = 1$。
微粒子の速度、	$X_2(\{q_l, p_l\}) = p_1/M = P/M$、	$\epsilon_2 = -1$。
水分子の運動エネルギー、	$X_3(\{q_l, p_l\}) = \sum_i p_i^2/(2m)$、	$\epsilon_3 = 1$。

○ 運動量に対する (26) 式同様の関係式

$p_l(t)$ の一般解を $p_l(t) = p_l(t, \{q_l^0, p_l^0\})$ と書くと、(26) 式とまったく同じようにして

$$p_l(-t, \{q_l^0, p_l^0\}) = -p_l(t, \{q_l^0, -p_l^0\}) \tag{39}$$

が示せる (宿題 69 参照)。

○ 証明

まず、(4) 式で t を $-t$ にすると、

$$X_\mu(-t) = X_\mu(\{q_l(-t), p_l(-t)\}) = f_\mu(-t, \{q_l, p_l\}) \tag{40}$$

ただし、初期値 $\{q_l^0, p_l^0\}$ を $\{q_l, p_l\}$ とした。$q_l(-t)$、$p_l(-t)$ に一般解 $q_l(-t, \{q_l, p_l\})$、$p_l(-t, \{q_l, p_l\})$ を代入。

$$X_\mu(\{q_l(-t), p_l(-t)\}) = X_\mu(\{q_l(-t, \{q_l^0, p_l^0\}), p_l(-t, \{q_l^0, p_l^0\})\}) \tag{41}$$

(26) 式と (39) 式を使って、

$$X_\mu(\{q_l(-t), p_l(-t)\}) = X_\mu(\{q_l(t, \{q_l^0, -p_l^0\}), -p_l(t, \{q_l^0, -p_l^0\})\}) \tag{42}$$

(42) 式の右辺に**仮定** (36) 式を代入して、

$$X_\mu(\{q_l(-t), p_l(-t)\}) = \epsilon_\mu X_\mu(\{q_l(t, \{q_l^0, -p_l^0\}), p_l(t, \{q_l^0, -p_l^0\})\}) \tag{43}$$

$f_\mu(t, \{q_l, p_l\})$ の定義 (4) 式から

$$= \epsilon_\mu f_\mu(t, \{q_l^0, -p_l^0\}) \tag{44}$$

結局

$$f_\mu(-t, \{q_l^0, p_l^0\}) = \epsilon_\mu f_\mu(t, \{q_l^0, -p_l^0\}) \tag{45}$$

が示せた。

これを使って、(7) 式から、

$$\langle X_\mu(-t)X_\nu\rangle = \int d\Gamma f_\mu(-t,\{q_l,p_l\})X_\nu(\{q_l,p_l\})\rho_{\rm eq}(\{q_l,p_l\}) \tag{46}$$

$$= \int d\Gamma \epsilon_\mu f_\mu(t,\{q_l,-p_l\})X_\nu(\{q_l,p_l\})\rho_{\rm eq}(\{q_l,p_l\}) \tag{47}$$

$p'_l = -p_l$ として、積分変数を変換すると、

$$= \int \prod_l dq_l dp'_l \epsilon_\mu f_\mu(t,\{q_l,p'_l\})X_\nu(\{q_l,-p'_l\})\rho_{\rm eq}(\{q_l,-p'_l\}) \tag{48}$$

仮定(36) 式から

$$= \int \prod_l dq_l dp'_l \epsilon_\mu f_\mu(t,\{q_l,p'_l\})\epsilon_\nu X_\nu(\{q_l,p'_l\})\rho_{\rm eq}(\{q_l,-p'_l\}) \tag{49}$$

さらに、(33) 式から、

$$= \int \prod_l dq_l dp'_l \epsilon_\mu f_\mu(t,\{q_l,p'_l\})\epsilon_\nu X_\nu(\{q_l,p'_l\})\rho_{\rm eq}(\{q_l,p'_l\}) \tag{50}$$

$$= \epsilon_\mu\epsilon_\nu\langle X_\mu(t)X_\nu\rangle \tag{51}$$

宿題:

63 (10 点) 水中の微粒子がブラウン運動する場合でも、孤立系を考える事が出来る。微粒子は、その位置や運動量について初期値を決めてもその後の運動は一意的に決まらない。この事は、「その後の時間発展は一意的に決まる。」という孤立系の性質に反しないか。反しないならば、その理由を述べなさい。また、微粒子の初期における位置や運動量が同じでも別の時間発展をするのはなぜか。

64 (10 点) 1 次元調和振動子 ($\dot q = p/m, \dot p = -m\omega^2 q$) で、

$$q(t) = \frac{A}{m\omega}\sin\omega t, \qquad p(t) = A\cos\omega t \tag{52}$$

という解から時間反転で新しい解をつくりなさい。横軸 q、縦軸 p の位相空間上では新しい解はどのように書けるか。

65 (20 点) 次の KdV 方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + 6u\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \tag{53}$$

について、形を変えない変数変換を少なくとも 2 つ以上考え、ある特殊解 $u = 2\,\mathrm{sech}^2(x-4t)$ から新しい解をつくりなさい。

66 (25 点) 孤立系の平均 (5) 式と時間相関関数 (6) 式は、2-4 や 3-1 で説明したような遷移確率で表すことも出来る。孤立系の遷移確率を位相空間の関数として $T(\{q_l, p_l\}, \{q_l^0, p_l^0\}, t)$ と書いた時に、$\langle X(t)\rangle$ と $\langle X(t)X(0)\rangle$ を $T(\{q_l, p_l\}, \{q_l^0, p_l^0\}, t)$ を使って表しなさい。また、

$$f(t, \{q_l^0, p_l^0\}) = \int U(\{q_l^0, p_l^0\}, \{q_l, p_l\}, t) X(\{q_l, p_l\}) d\Gamma \tag{54}$$

となるように $U(\{q_l^0, p_l^0\}, \{q_l, p_l\}, t)$ が定義できるとする。この場合、$U(\{q_l^0, p_l^0\}, \{q_l, p_l\}, t) = T(\{q_l, p_l\}, \{q_l^0, p_l^0\}, t)$ とすれば、遷移確率を使った平均と時間相関関数の式が (5) 式と (6) 式に等しくなることを示しなさい。

67 (25 点) 宿題 66 で、文献を調べて $U(\{q_l^0, p_l^0\}, \{q_l, p_l\}, t) = T(\{q_l, p_l\}, \{q_l^0, p_l^0\}, t)$ を証明しなさい。調べた文献は、明記すること。

68 (30 点) (33) 式を示しなさい。ただし、任意の物理量を平衡分布 $\rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l, p_l\})$ で平均すると、時間変化しないということを使え。

69 (10 点) (39) 式を示しなさい。

70 (25 点) 4-1 で説明した現象論 (授業ノート 10 の (2) 式や (3) 式) は、時間反転対称性を満たすかどうか答えなさい。また、そのことと、孤立系のニュートン方程式からこれらの方程式が導けるかどうかということとの関係を論じよ。

71 (25 点) 授業では、時間相関関数の性質 (1) 式を導くのに、時間反転対称性を仮定した。最近では、時間反転対称性よりも**詳細釣り合い**が強調されることがある。遷移確率に対して、詳細釣り合いの式 (授業ノート 5(23) 式) を仮定して、時間相関関数を授業ノート 6 の (1) 式のように与えた時、授業ノート 11 の (1) 式を証明しなさい。