# 2006年度非平衡物理学 授業ノート 11

2006.12.20 担当 吉森 明

## 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) 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 $q_l$ 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。

$$\langle X_\mu(t) X_\nu(0)\rangle = \langle X_\mu(-t) X_\nu(0)\rangle \tag{1}$$

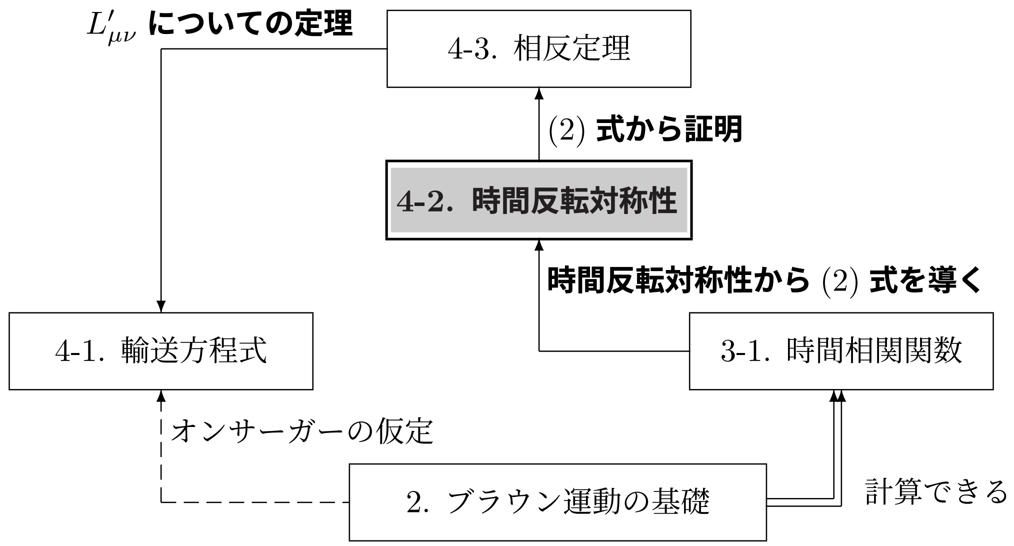
あるいは、定常過程から $\langle X_\mu(-t) X_\nu(0)\rangle = \langle X_\nu(t) X_\mu(0)\rangle$ なので、

$$\langle X_\mu(t) X_\nu(0)\rangle = \langle X_\nu(t) X_\mu(0)\rangle \tag{2}$$

**例**: 授業ノート 10 の 4-1(3) 具体例で、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。

## (1) はじめに

### ○ 4-2. の位置付け




### ○ 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 (宿題 62)。

> **定理**　ある変数変換 $t \to t' = h(t), X_\mu \to X'_\mu(t') = g_\mu(\{X_\mu(t)\})$ を考える。逆に解いて $X_\mu(t), t$ を $X'_\mu(t'), t'$ で表し、(8) 式に代入すると、
>
> $$\dot{X}'_\mu(t') = F(\{X'_\mu(t')\}), \qquad \mu = 1,\ldots,n \tag{9}$$
>
> 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。

例: 孤立系でのニュートン方程式

$$\dot{q}_l(t) = \frac{p_l(t)}{m} \tag{10}$$

$$\dot{p}_l(t) = -\frac{\partial V(\{q_l(t)\})}{\partial q_l(t)} \tag{11}$$

は、次の変数変換 (時間反転) に対して形を変えない。

$$t \to t' = -t, \tag{12}$$

$$q_l \to q'_l(t') = q_l(t), \qquad p_l \to p'_l(t') = -p_l(t) \tag{13}$$

なぜなら、(13) 式の両辺を $t$ で微分すると、$\boxed{dt'/dt = -1}$ だから、

$$-\dot{q}'_l(t') = \dot{q}_l(t), \qquad -\dot{p}'_l(t') = -\dot{p}_l(t) \tag{14}$$

(13) 式と (14) 式を (10) 式と (11) 式に代入

$$-\dot{q}'_l(t') = \frac{-p'_l(t')}{m} \tag{15}$$

$$\dot{p}'_l(t') = -\frac{\partial V(\{q'_l(t')\})}{\partial q'_l(t')} \tag{16}$$

これらは、(10) 式と (11) 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。

### ○ 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、新しい解の初期値は、$q_l^0, -p_l^0$ となる。特に $q_l(t)$ の一般解を $q_l(t) = f_l(t, \{q_l^0, p_l^0\})$ と書くと、

$$\boxed{f_l(-t, \{q_l^0, p_l^0\}) = f_l(t, \{q_l^0, -p_l^0\}) \qquad (17)}$$

### (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、$X_\mu(t) = f_\mu(t, \{q_l, p_l\})$ と表せる。

$X_\mu$ は $q_l$ だけの関数なので、(17) 式から

$$f_\mu(-t, \{q_l, p_l\}) = f_\mu(t, \{q_l, -p_l\}) \tag{18}$$

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

$$\langle X_\mu(-t) X_\nu(0) \rangle = \int d\Gamma f_\mu(-t, \{q_l, p_l\}) X_\nu(\{q_l\}) \rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l, p_l\}) \tag{19}$$

(18) 式から

$$= \int d\Gamma f_\mu(t, \{q_l, -p_l\}) X_\nu(\{q_l\}) \rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l, p_l\}) \tag{20}$$

ここで、

$$\rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l, -p_l\}) = \rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l, p_l\}) \tag{21}$$

つまり、初期値 $p_l$ と $-p_l$ は同じ重み (宿題 63) ということを考慮すると、(20) 式で $p_l \to p_l' = -p_l$ に変数変換して、

$$\langle X_\mu(-t) X_\nu(0) \rangle = \int \prod_l dq_l dp_l' f_\mu(t, \{q_l, p_l'\}) X_\nu(\{q_l\}) \rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l, -p_l'\}) \tag{22}$$

(21) 式を使って

$$= \int \prod_l dq_l dp'_l f_\mu(t, \{q_l, p'_l\}) X_\nu(\{q_l, p'_l\}) \rho_{\rm eq}(\{q_l, p'_l\}) \tag{23}$$

$$= \langle X_\mu(t) X_\nu(0) \rangle \tag{24}$$

---

**宿題:**

**52 (10 点)** 部屋の湿気の問題を 4-1 の現象論で考えよう。梅雨時など部屋の湿気が高いとき、窓を開けて湿気を外に出したい。ところが、外は雨が降っていて、部屋よりも湿度は高い。授業ノート 10 の (7) 式を使って、窓を開けるのが良いか悪いか議論しなさい。また、外より部屋の方が温度が高いときはどうなるか、授業ノート 10 の (8) 式で考えなさい。

**53 (10 点)** 2 つ以上の変数、$x_\mu, \mu = 1, \ldots, n$ が

$$\dot{x}_\mu = \sum_\nu \{x_\mu, x_\nu\} \frac{\partial S'}{\partial x_\nu} + \sum_\nu L'_{\mu\nu} \frac{\partial S'}{\partial x_\nu} \tag{25}$$

の方程式にしたがう時 (宮崎ら 1996)、時間無限大で $x_\mu = x_\mu^{eq}$ となる事を示せ。ただし、 $L'_{\mu\nu} + L'_{\nu\mu}$ を要素に持つ行列が正値 (正定値) で、$S'$ は最大値を 1 つだけ持ち、その時の $x_\mu$ を $x_\mu^{eq}$ とする。さらに、$\{x_\mu, x_\nu\} = -\{x_\nu, x_\mu\}$ を仮定する。

**54 (10 点)** cirtical slowing down に 4-1 の現象論を応用する。$F(x)$ がランダウ自由エネルギーのとき $S(x) = -\beta F(x)$ として、授業ノート 10 の (7) 式を考える。$F(x)$ を次の様に展開したとき、

$$F(x) = a(T - T_c)x^2 + bx^4 + \cdots \tag{26}$$

授業ノート 10 の (7) 式を $T > T_c$ と $T = T_c$ の場合に解いて、cirtical slowing down を説明しなさい。ただし、$T > T_c$ の時は、$b$ は無視しても良い。

**55 (15 点)** 授業で扱ったものと宿題 50,51,52,54 以外について、授業ノート 10 の (7) 式や (8) 式の例を挙げなさい。$x(t)$ や $S(x)$ に対応する変数を具体的に説明し、方程式を書きなさい。参照した文献は名前を明らかにすること。

**56 (10 点)** ブラウン運動でなぜランダム力が分布するのか、孤立系の観点から論じなさい。

**57 (10 点)** 1 次元自由粒子 ($\dot{q} = p/m, \dot{p} = 0$) で、$q(t) = vt, p(t) = mv$ 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。

**58 (10 点)** 次の KdV 方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + 6u\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \tag{27}$$

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。

**59 (10 点)** 4-2(3) では、$X_\mu(t)$ を、$q_l$ だけの関数としたが、ここでは、$p_l$ を含む場合を考える。最も簡単な場合として、$\langle X(t)p_l(0)\rangle$ はどうなるか計算しなさい。また、$\langle p_l(t)X(0)\rangle$ はどうか。ただし、$X(t)$ は $q_l$ だけの関数とする。

**60 (15 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、

$$\hat{U}X(\{q_l^0,p_l^0\}) \equiv \int U(\{q_l^0,p_l^0\},\{q_l,p_l\},t)X(\{q_l,p_l\})d\Gamma \tag{28}$$

とした時、$f(t,\{q_l^0,p_l^0\}) = \hat{U}X(\{q_l^0,p_l^0\})$ となるように $U(\{q_l^0,p_l^0\},\{q_l,p_l\},t)$ を定義する。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。$\hat{U}$ は時間推進演算子と呼ばれる。

**61 (15 点)** 宿題**??**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。

**ヒント:** リュービル演算子を使う。

**62 (15 点)** 3 ページの**定理**を証明しなさい。

**63 (20 点)** (21) 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。

**64 (15 点)** 4-1 で説明した現象論 (授業ノート 10 の (7) 式や (8) 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。

**65 (15 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(10) 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。