揺動の回転とPath Probability

富田博之
富田和久，太田隆夫

非平衡定常状態では，平衡状態とちがって一般に時間反転対称性が破れており，確率分布函数（pdf）の定常性は，detailed balanceでなく，cyclic balanceで成立していると考えられる。我々はこのことを，マスター方程式から出発し，フォッカー・プランク方程式における揺動の回転として表現した。[1] すなわち，定常状態での揺動の記述にはpdfだけでは不十分で，時間依存性を特徴づける，この回転量が重要な役割を果たす。ここでは，揺動のこの特徴が，2－gate pdfあるいはPath Probabilityの方法において，どのように現われるかを考えてみる。[2] 以下で見るように，2－gate pdfを考える時には，巨視変数に対する運動方程式の時間反転形が必然的に現われ，時間反転対称性を浮きぼりにできるのである。

簡単のため安定な定常状態のまわりの小さな揺動 $\{\xi_i\}$ だけを扱うことにし，次のフォッカー・プランク方程式から出発する。（揺動を線型で扱っていいかどうかは，平衡状態に近いか遠いかとは別の問題であり，Systemsize展開が妥当な場合には線型方程式を用いても本質を損うことはない。）

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\vec{\xi},\ t) = -\frac{\partial}{\partial \vec{\xi}} \cdot \left(\mathbf{K} \cdot \vec{\xi} - \frac{1}{2} \mathbf{D} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}} \right) P(\vec{\xi},\ t)\ . \tag{1}$$

これは一般にGaussian解

$$P(\vec{\xi},\ t) = [\det(\mathbf{g}(t)/2\pi)]^{1/2} \exp\{-\frac{1}{2}(\vec{\xi} - \vec{\mu}(t)) \cdot \mathbf{g}(t) \cdot (\vec{\xi} - \vec{\mu}(t)\}, \tag{2}$$

$$\dot{\vec{\mu}}(t) = \mathbf{K} \cdot \vec{\mu}(t)\ , \tag{3}$$

$$\mathbf{g}(t) = \boldsymbol{\sigma}(t)^{-1}\ ,\ \dot{\boldsymbol{\sigma}}(t) = \mathbf{K}\boldsymbol{\sigma}(t) + \boldsymbol{\sigma}(t)\widetilde{\mathbf{K}} + \mathbf{D} \tag{4}$$

を持つ。定常分布は(3), (4)の定常解

$$\boldsymbol{\mu}_s = 0\ ,\ \mathbf{g}_s = \boldsymbol{\sigma}_s^{-1}\ ,\ \boldsymbol{\sigma}_s = \int_0^{\infty} \exp(t\mathbf{K})\,\mathbf{D} \exp(t\widetilde{\mathbf{K}})\,dt \tag{5}$$

を用いて

$$p_s(\vec{\xi}) \propto \exp(-\phi(\vec{\xi})), \quad \phi(\vec{\xi}) \equiv \frac{1}{2}\vec{\xi}\cdot\mathbf{g}_s\cdot\vec{\xi} \tag{6}$$

で表わされ，また，条件付確率 $P\left(\begin{smallmatrix}\vec{\xi}\\ t\end{smallmatrix}\middle|\begin{smallmatrix}\vec{\xi}_0\\ t_0\end{smallmatrix}\right)$ の初期条件 $\vec{\mu}(t_0)=\vec{\xi}_0$，$\boldsymbol{\sigma}(t_0)=0$ に対する(3)，(4)の解を(2)に代入したものとなる。

ここで，Onsager-Machlup[3] の議論を今の場合に適用すれば，後者は，

$$P\left(\begin{smallmatrix}\xi\\ t\end{smallmatrix}\middle|\begin{smallmatrix}\xi_0\\ t_0\end{smallmatrix}\right) \propto \int dD[\vec{\xi}(s)]\exp\{-\int_{t_0}^{t} O(\dot{\vec{\xi}},\vec{\xi})\,ds\}, \tag{7}$$

$$O(\dot{\vec{\xi}},\vec{\xi}) \equiv \frac{1}{4}(\dot{\vec{\xi}}-\mathbf{K}\cdot\vec{\xi})\cdot\mathbf{R}\cdot(\dot{\vec{\xi}}-\mathbf{K}\cdot\vec{\xi}), \quad \mathbf{R}\equiv 2\mathbf{D}^{-1} \tag{8}$$

と，Path integral 形に表わされる。これから $(t_0, \vec{\xi}_0)$，$(t, \vec{\xi})$ を結ぶ most Probable Path を決める方程式

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial O}{\partial\dot{\vec{\xi}}}-\frac{\partial O}{\partial\vec{\xi}} = \mathbf{R}\cdot\ddot{\vec{\xi}}-(\mathbf{R}\mathbf{K}-\widetilde{\mathbf{K}}\mathbf{R})\cdot\mathring{\vec{\xi}}-(\widetilde{\mathbf{K}}\mathbf{R}\mathbf{K})\cdot\vec{\xi}=0 \tag{9}$$

が得られるが，この解としては次の２種の，evolution が可能である。

$$\left.\begin{array}{ll}(A) & \dot{\vec{\xi}} = \mathbf{K}\cdot\vec{\xi}\\ (B) & \mathring{\vec{\xi}} = (\mathbf{K}+\mathbf{D}\mathbf{g}_s)\cdot\vec{\xi} = -(\mathbf{K}+2\boldsymbol{\alpha}\mathbf{g}_s)\cdot\vec{\xi}\ 。\end{array}\right\} \tag{10}$$

ここで文献１で定義された，detailed balance の破れに対応する回転量 $\boldsymbol{\alpha}\equiv(\boldsymbol{\sigma}_s\widetilde{\mathbf{K}}-\mathbf{K}\boldsymbol{\sigma}_s)/2$ を使った。(A)，(B)の意味は２－gate paf

$$P_2(\vec{\xi}_0, t_0; \vec{\xi}, t) = P\left(\begin{smallmatrix}\vec{\xi}\\ t\end{smallmatrix}\middle|\begin{smallmatrix}\vec{\xi}_0\\ t_0\end{smallmatrix}\right)P_s(\vec{\xi}_0)$$

を終状態 $\vec{\xi}$ について，及び始状態 $\vec{\xi}_0$ について変分すれば各々，(A)及び(B)が得られることから，(A)は average regression evolution，(B)はその時間反転形で，一般の２－gate Path はその一次結合となる。回転量 $\boldsymbol{\alpha}$ は，ここではこの両者の対称性の破れに対応していることが分る。これは，一般化された力 $\vec{X}\equiv-\partial\phi/\partial\vec{\xi}=-\mathbf{g}_s\cdot\vec{\xi}$ を用いて

$$(A)\quad \dot{\vec{\xi}} = [(\mathbf{D}/2)+\boldsymbol{\alpha}]\cdot\vec{X}\equiv\mathbf{L}\cdot\vec{X}$$

(B) $\dot{\vec{\xi}} = -\left[(D/2) - \boldsymbol{\alpha} \right] \cdot \vec{X} \equiv -\tilde{L} \cdot \vec{X}$

と表わすこともでき，$\boldsymbol{\alpha}$はこの場合のOnsager係数の反対称部分に相当することになる。

Onsager係数の反対称部分は，平衡系においても，($\boldsymbol{\alpha}$, β)変数間，あるいは，磁場の存在する場合等，運動学的な原因で現われることがある。今回の結果も形式上は，これらの場合と同じになるが，原因は，定常状態の非平衡性，すなわち，熱力学第二法則による，巨視的な時間反転対称性の破れにある。平衡状態に近い定常状態では，回転量$\boldsymbol{\alpha}$が，系の非平衡性に対応する巨視的な″流れ量″に比例することを示すことができる。

文　　献

1) K. Tomita and H. Tomita, Prog. Theor. Phys. 51 (1974), 1731.

2) K. Tomita, T. Ohta and H. Tomita, 同上 52 (1974), No. 2. (to be Published)

3) L. Onsager and S. Machlup, Phys. Rev. 91 (1953), 1505.