物理量 (状態量、遷移量、経路量) の関係

大上由人

2024 年 12 月 12 日

1　物理量の分類

ゆらぐ系の熱力学においては、基本的に以下の三種類の物理量が考えられる。

Def.state quantity/jump quantity/path quantity

state quantity $\hat{f}$ は、状態 j に対して、値 f_j をとる物理量である。また、この期待値は、

$$\left\langle \hat{f} \right\rangle_{\mathbf{p}} = \sum_j f_j p_j \tag{1.1}$$

で定義される。

jump quantity $\hat{g}$ は、状態 j から状態 k に遷移するとき、値 $g_{j\to k}$ をとる物理量である。また、この期待値は、

$$\langle \hat{g} \rangle_{\mathbf{p},R} = \sum_{j,k} R_{kj} p_j g_{j\to k} \tag{1.2}$$

で定義される。

path quantity $\hat{\hat{F}}$ は、経路 Γ に対して、値 $F(\Gamma)$ をとる物理量である。また、この期待値は、

$$\left\langle \left\langle \hat{\hat{F}} \right\rangle \right\rangle_{\Gamma} = \int \mathrm{d}\Gamma\, P(\Gamma) F(\Gamma) \tag{1.3}$$

で定義される。

2　物理量の関係

2.1　state quantity と path quantity の関係

時間に依存する state quantity $\hat{f}(t)$ について、対応する path quantity を考えることができる。対応する path quantity $\hat{\hat{f}}(t)$ は、経路 Γ に対して、値

$$f(\Gamma,t) = f_{\Gamma(t)} = \sum_{m=0}^{n} f_{j_m}(t)\chi[t \in [t_m, t_{m+1}]] \tag{2.1}$$

をとる物理量である。このとき、以下が成り立つ。

Prop.state quantity と path quantity の関係

state quantity $\hat{f}(t)$ と対応する path quantity $\hat{\hat{f}}(t)$ について、以下が成り立つ。

$$\left\langle \hat{f}(t) \right\rangle_{\mathbf{p}(t)} = \left\langle \left\langle \hat{\hat{f}}(t) \right\rangle_{\Gamma} \right\rangle \tag{2.2}$$

Prf.

2.2　jump quantity と path quantity の関係

時間に依存する jump quantity $\hat{g}(t)$ について、対応する path quantity を考えることができる。対応する path quantity $\hat{\hat{g}}(t)$ は、経路 Γ に対して、値

$$g(\Gamma,t) = \sum_{m=1}^{n} g_{j_{m-1}\to j_m}(t)\delta(t - t_m) \tag{2.3}$$

をとる物理量である。このとき、以下が成り立つ。

Prop.jump quantity と path quantity の関係

jump quantity $\hat{g}(t)$ と対応する path quantity $\hat{\hat{g}}(t)$ について、以下が成り立つ。

$$\langle \hat{g}(t) \rangle_{\mathbf{p}(t),R(t)} = \left\langle \left\langle \hat{\hat{g}}(t) \right\rangle \right\rangle_{\Gamma} \tag{2.4}$$

Prf.
離散のほうがやりやすいので、離散の場合を考える。右辺は以下のように書ける。

$$\int d\Gamma\, P(\Gamma) \sum_{m=1}^{n} g_{j_{m-1}\to j_m}(t)\delta_{t,t_m} = \sum_{j_0,\dots,j_N} \prod_{n=1}^{N} T^{j^n j^{n-1}} p^0_{j^0} \sum_{m=1}^{n} g_{j_{m-1}\to j_m}(t_m) \tag{2.5}$$

一番最後の Σ について考える。和の k 番目の項について、

$$
\begin{aligned}
(\text{第 k 項}) &= \sum_{j_0,\ldots,j_N} \prod_{n=1}^{N} T^{j^n j^{n-1}} p^0_{j^0} g_{j_{m-1}\to j_m}(t_m) && (2.6)\\
&\quad (j^0\text{から } j^{k-2}\text{まで計算して、})\\
&= \sum_{j_{k-1},j_k,\cdots,j_N} \prod_{n=k-1}^{N} T^{j^n j^{n-1}} p^{k-1}_{j^{k-1}} g_{j_{m-1}\to j_m}(t_m) && (2.7)\\
&\quad (j^{k+1}\text{から } j^N\text{まで計算すると、規格化条件より})\\
&= \sum_{j_{k-1},j_k} T^{j^k j^{k-1}} p^{k-1}_{j^{k-1}} g_{j_{m-1}\to j_m}(t_m) && (2.8)
\end{aligned}
$$

となる。これを連続極限に持っていくことで、

$$
\begin{aligned}
\int d\Gamma\, P(\Gamma) \sum_{m=1}^{n} g_{j_{m-1}\to j_m}(t)\delta_{t,t_m} &= \sum_{j\neq k} p_j R_{kj} g_{j\to k}(t) && (2.9)\\
&= \langle \hat{g}(t) \rangle_{\mathbf{p}(t),R(t)} && (2.10)
\end{aligned}
$$

となる。 □

また、path quantity の積分量

$$
\hat{\hat{G}} = \int_0^\tau \mathrm{d}t\, \hat{\hat{g}}(t) \tag{2.11}
$$

は、path に対して値

$$
G(\Gamma) = \int_0^\tau \mathrm{d}t\, g(\Gamma,t) = \sum_{m=1}^{n} g_{j_{m-1}\to j_m}(t_m) \tag{2.12}
$$

をとる物理量である。このとき、以下が成り立つ。

$$
\left\langle\left\langle \hat{\hat{G}} \right\rangle\right\rangle_\Gamma = \int \mathrm{d}t \left\langle\left\langle \hat{\hat{g}}(t) \right\rangle\right\rangle_\Gamma = \int \mathrm{d}t\, \langle \hat{g}(t) \rangle_{\mathbf{p}(t),R(t)} \tag{2.13}
$$