

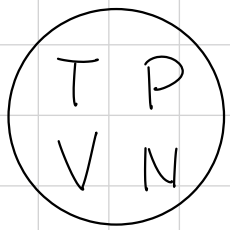
Part 2 Stochastic Mechanics.

kinetic theory : microscopic equation of motion 으로, macroscopic property 를 설명하는 것.

Microstate of N -particle system : $(q_i(t), p_i(t))$

$i \rightarrow$ index for particle

phase space is $6N$ dimension. $\Gamma = \prod_i^N \{ q_i, p_i \}$



thermodynamic
coordinates

phase space density $\rho(\{q\}, \{p\}, t)$ $\{\}$ 기호는 모든 입자의 물리량을 모은 tuple 임을 의미



normalization
Ensemble average

$$\int \prod_i^N d^3 p_i d^3 q_i \rho = 1$$

$$\langle O \rangle = \int \prod_i^N d^3 p_i d^3 q_i \rho(\{p_i\}, \{q_i\}) O(\{p_i\}, \{q_i\})$$

physical observable

Time evolution of density of state. Liouville theorem.

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\} = \frac{\partial A}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right) \\ &= \frac{\partial A}{\partial t} + \sum_i \left(\dot{q}_i \frac{\partial A}{\partial q_i} + \dot{p}_i \frac{\partial A}{\partial p_i} \right) \end{aligned}$$

이건 그저 해밀톤 방정식일 뿐.

연속체 방정식 $\rightarrow$ 물리적 의미:

한 자리 (*) 에서 시간에 대해 밀도 변화가 있다면 $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)$

그것은 밀도 흐름 $(\rho \mathcal{U})$ 이 그 자리에서 모이거나 흩어지기 때문이다. $(\nabla \cdot (\rho \mathcal{U}))$

흐름이 발산하면 ρ 는 줄어든다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathcal{U})$$

$$\mathcal{U}(\{q_i\}, \{p_i\}, t) = \sum_i \hat{q}_i \dot{\hat{q}}_i + \hat{p}_i \dot{\hat{p}}_i = \sum_i \hat{q}_i \frac{\partial H}{\partial p_i} - \hat{p}_i \frac{\partial H}{\partial q_i}$$

여기에서 해밀톤 방정식 $\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_i \left(\dot{q}_i \frac{\partial \rho}{\partial q_i} + \dot{p}_i \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \right)$ 을 유도할 수 있다.

□ 에서 ∇ 연산자 정의: $\nabla = \sum_i \left(\hat{q}_i \frac{\partial}{\partial q_i} + \hat{p}_i \frac{\partial}{\partial p_i} \right)$

$$\nabla \cdot (\rho \mathcal{U}) = (\nabla \rho) \cdot \mathcal{U} + \rho (\nabla \cdot \mathcal{U}) \quad \text{벡터 항등식 이용.}$$

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathcal{U} = \sum_i \left(\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial p_i} - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial q_i} \right) = 0 \\ \nabla \rho = \sum_i \left(\hat{q}_i \frac{\partial \rho}{\partial q_i} + \hat{p}_i \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \right) \end{cases}$$

$$\nabla \cdot (\rho \mathcal{U}) = \sum_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathcal{U}) \Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \right) = 0$$

해밀톤 방정식을 떠올리면, 연속체 방정식은 $\frac{d\rho}{dt} = 0$ 을 의미한다는 걸 알 수 있다.

$\frac{d\rho}{dt} = 0$ 은 ρ 의 총량은 시간이 지나도 변하지 않음을 의미 한다.

$$\frac{d}{dt} \int d^3 p_i d^3 q_i \rho = \int d^3 p_i d^3 q_i \frac{d\rho}{dt} = 0$$

즉, 상태가 Γ 의 한 점으로 존재할 때, 시간이 지나 점이 Γ 내 다른 좌표로 이동

하기는 하지만 $\left(\frac{d\rho}{dt} = 0\right)$ 그 점들의 개수가 사라지진 않는다는 것. $\left(\frac{d\rho}{dt} = 0\right)$

"연속체 방정식" 에서 '연속' 은 Γ 속 점 (state) 의 존재가 연속된다는 의미.

$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ 은 density distribution 이 변치 않는 것.

Steady state 를 의미

Ensemble theory 로 정의되는 steady 는 두 가지가 있다.

microcanonical ensemble uniform density distribution

Canonical ensemble Boltzmann distribution

Reduced density : kind of coarse graining

1-particle density : 입자 하나에 대한 정보 이외는 적분해서 없애 버림
그리고 모든 입자는 구분 불가하다고 취급함.

$$f_1(x, p, t) = \sum_j \int \prod_{i \neq j}^N (d^3x_i d^3p_i) \rho(\{x\}, \{p\}, t) \\ = N \int \prod_{i \neq 1}^N (d^3x_i d^3p_i) \rho(\{x\}, \{p\}, t)$$

2-particle density : 한 쌍의 입자에 대한 정보 이외는 적분해서 없앤다.

C : 순서를 구분하지 않는, 가능한 모든 입자 쌍의 집합.

원소 개수는 $\frac{1}{2}N(N-1)$

$$f_2(x_1, p_1, x_2, p_2, t) = \sum_{(a,b)} \int \prod_{i \neq a \text{ or } b}^N (d^3x_i d^3p_i) \rho(\{x\}, \{p\}, t) \\ = \frac{N(N-1)}{2} \int \prod_{i \neq 1 \text{ or } 2}^N (d^3x_i d^3p_i) \rho(\{x\}, \{p\}, t)$$

m-particle density

$$f_m(x_1, p_1, \dots, x_m, p_m) = \frac{N!}{m! (N-m)!} \int \prod_{\substack{i \neq 1 \text{ or } 2 \\ \dots m}}^N (d^3x_i d^3p_i) \rho(\{x\}, \{p\}, t)$$

Density field : f_1 에서 운동량 정보를 적분해 얻는다.

$$n(x, t) = \int d^3p f_1(x, p, t)$$

$n(x, t)$ 를 x 에 대해 적분하면 그냥 입자수다.

$$N(t) = \int d^3x n(x, t)$$

Momentum density : $(x, t) \rightarrow$ momentum 으로 mapping 하는 vector field

$$\pi(x, t) = m \cdot n(x, t) u(x, t) = \int d^3p f_1(x, p, t) p$$

Energy density : 이것으로 temperature field 를 정의한다.

$$\int d^3p \frac{p^2}{2m} f_1 = \frac{3}{2} k_B n(x, t) T(x, t)$$

Boltzmann's H-theorem and Irreversibility

미시적으로는 분명 time reversal symmetry 가 있는 충돌 과정이,
어떻게 거시적인 irreversibility 를 만드는가?

Definition of H - function - 엔트로피와 직결

$$H(t) = \int d^3x d^3p f_1(x, p, t) \ln f_1(x, p, t)$$

$$h(x, t) = \int d^3p f \ln f$$

$$H(t) = \int d^3x h(x, t)$$

$H(t)$ 가 단조증가함을 증명할 것이다.

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \int d^3p \left(\frac{\partial f_1}{\partial t} \ln f + f_1 \frac{1}{f_1} \frac{\partial f_1}{\partial t} \right) = \int d^3p \frac{\partial f_1}{\partial t} (1 + \ln f_1)$$

$$\frac{dH}{dt} = \int d^3x d^3p \frac{\partial f_1}{\partial t} \ln f_1 + \frac{\partial f_1}{\partial t} = \int d^3x d^3p \frac{\partial f_1}{\partial t} (\ln f_1 + 1)$$

Collision 이 없는 경우 : 완전 결정론적. Liouville theory

t 시간에 (x, p) 에 있던 점이 δt 시간 뒤에는 $(x + v \delta t, p + F_{ext} \delta t)$ 로 이동한다.

$$f_1(x, p, t) = f_1(x + v \delta t, p + F_{ext} \delta t, t + \delta t)$$

이것이 리우빌 정리와 같음을 보일 수 있다. 무변을 테일러 전개

$$\begin{aligned} f_1(x + v \delta t, p + F_{ext} \delta t, t + \delta t) &= f_1(x, p, t) + \frac{\partial f_1}{\partial x} \cdot (v \delta t) + \frac{\partial f_1}{\partial p} \cdot (F_{ext} \delta t) + \frac{\partial f_1}{\partial t} \delta t \\ &= f_1(x, p, t) + \delta t \left(\frac{\partial f_1}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial p} - \frac{\partial f_1}{\partial p} \cdot \frac{\partial x}{\partial x} + \frac{\partial f_1}{\partial t} \right) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial p} - \frac{\partial f_1}{\partial p} \cdot \frac{\partial x}{\partial x} + \frac{\partial f_1}{\partial t} = 0, \quad \frac{df_1}{dt} = 0$$

Collision이 있는 경우, 위와 같이 움직이지 않고, 충돌에 의해 확률적으로 다른 위상이 된다.

리무벌 정리에 보정항이 붙는다.

$$f_1(x + v\delta t, p + F_{ext}\delta t, t + \delta t) = f_1 + \left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{coll} \delta t.$$

$$\sum, \left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{coll} \text{의 정체를 정리하면, } \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial}{\partial t}\right) f_1 = \left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{coll}$$

원래 가야 할 위상 공간 속 궤적에서, 벗어나는 것을 out flux, 다른 위상이 궤적으로 끼여든 것을 in flux 라고 부른다.

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{coll} = J_+ - J_- = J \quad J_+ : \text{in flux}, \quad J_- : \text{out flux}, \quad J : \text{net flux}.$$

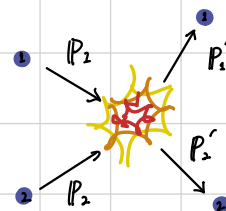
충돌 이전의 입자가 (x_1, p_1, t) 였다고 가정하자. 충돌이 없었더라면, 이것은 $(x_1 + v\delta t, p_1 + F_{ext}\delta t, t + \delta t)$ 가 되었어야 했다. 그러나 충돌로 인해 예정되지 않은 위상 $(x'_1, p'_1, t + \delta t)$ 이 되는 것이 out flux 이다.

반대로, 아주 다른 위상이었던 게 충돌로 여기치 않게 $(x_1 + v\delta t, p_1 + F_{ext}\delta t, t + \delta t)$ 와 같은 위상이

되는 것이 in flux 이다. 일단은 위치보단 운동량 변환에 신경쓰자. 두 입자가 만나서

충돌하는 지점을 x 로 잡고, 충돌 직전과 직후를 보아서 x 가 거의 변하지 않고 운동량만 변환다면,

충돌로 인해 '여기치 않은' 운동량 전환의 빈도를 $W(p_1, p_2 | p'_1, p'_2)$ 라고 쓰자.



$$\{\text{In flux: 충돌로 인해 } p_1 \text{ 이 생기는 흐름}\} = \int d^3p_2 d^3p'_1 d^3p'_2 \left\{ \text{충돌이 일어날 때 } (p'_1, p'_2) \rightarrow (p_1, p_2) \text{ 전환률} \right\} \cdot \left\{ \text{어떤 두 입자가 같은 위치에서 } (p'_1, p'_2) \text{ 일 확률} \right\}$$

충돌전입자 1: (x, p_1) , 입자 2: (x, p_2) 이라는 "조건부" 확률.

$$J_+(x, p_1, t) = \int d^3p_2 d^3p'_1 d^3p'_2 W(p'_1, p'_2 | p_1, p_2) f_2(x, x, p'_1, p'_2)$$

비슷한 원리로, out flux는

$$\{\text{충돌로 인해 } p_2 \text{ 이 없어지는 흐름}\} = \int d^3p_2 d^3p'_1 d^3p'_2 \left\{ \text{충돌이 일어날 때 } (p_1, p_2) \rightarrow (p'_1, p'_2) \text{ 전환률} \right\} \cdot \left\{ \text{어떤 두 입자가 같은 위치에서 } (p_1, p_2) \text{ 일 확률} \right\}$$

$$J_-(x, p_1, t) = \int d^3p_2 d^3p'_1 d^3p'_2 W(p_1, p_2 | p'_1, p'_2) f_2(x, x, p'_1, p'_2)$$

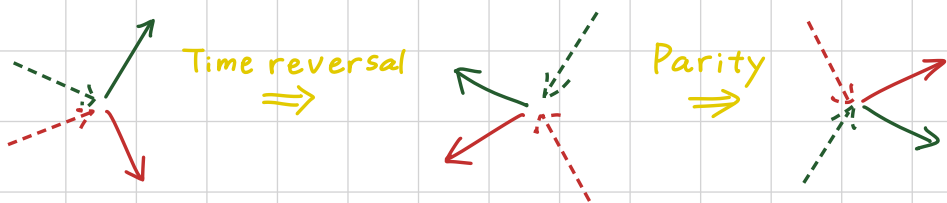
J_+ 에 대한 식에 $W(p'_1, p'_2 | p_1, p_2)$ 가 아니라 $W(p_1, p_2 | p'_1, p'_2)$ 가 있다면

$J = J_+ - J_-$ 식을 깔끔하게 쓸 수 있을 텐데!

이때 detailed balance를 이용. $W(p_1, p_2 | p'_1, p'_2) = W(p'_1, p'_2 | p_1, p_2)$

Time reversal symmetry 와 parity symmetry 로 증명 가능

---	: 충돌 전
—	: 충돌 후
●	: 첫 번째 입자
●	: 두 번째 입자



$$J_+(x, p_2, t) = \int d^3p_2 d^3p'_1 d^3p'_2 W(p_2, p_2 | p'_1, p'_2) f_2(x, x, p'_1, p'_2)$$

$$J(x, p_2, t) = J_+ - J_- = \int d^3p_2 d^3p'_1 d^3p'_2 W(p_2, p_2 | p'_1, p'_2) \{ f_2(x, x, p'_1, p'_2) - f_2(x, x, p_1, p_2) \}$$

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \int d^3p_2 d^3p'_1 d^3p'_2 W(p_2, p_2 | p'_1, p'_2) \{ f_2(x, x, p'_1, p'_2) - f_2(x, x, p_1, p_2) \}$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \int d^3p \frac{\partial f_1}{\partial t} (1 + \ln f_1) \quad \frac{\partial f_1}{\partial t} = J + \left(\frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \right) f_1$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \int d^3p \left[J - F_{\text{ext}} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial p} - \frac{p}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial x} \right] (1 + \ln f_1)$$

$$\int d^3p F_{\text{ext}} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial p} (1 + \ln f_1) \quad F_{\text{ext}} \text{ 가 } p \text{ 에 독립이라면,}$$

$$= F_{\text{ext}} \cdot \int d^3p \frac{\partial f_1}{\partial p} (1 + \ln f_1) \quad 1 + \ln f_1 = \frac{\partial}{\partial f_1} f_1 \ln f_1$$

$$= F_{\text{ext}} \cdot \frac{\partial}{\partial f_1} \int d^3p \frac{\partial}{\partial p} f_1 \ln f_1$$

$$= F_{\text{ext}} \frac{\partial}{\partial f_1} \left[f_1 \ln f_1 \right]_{p=-\infty}^{p=\infty} = 0$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial x} (1 + \ln f_1) = \frac{\partial f_1}{\partial x} \frac{\partial}{\partial f_1} f_1 \ln f_1 = \frac{\partial}{\partial x} f_1 \ln f_1$$

$$\int d^3p J = 0 \quad \text{충돌해도 입자수는 보존된다.}$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \int d^3p \frac{p}{m} f_1 \ln f_1 + \int d^3p J \ln f_1$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \int d^3p \frac{p}{m} f_1 \ln f_1 + \int d^3p J \ln f_1$$

$$J_0 \text{의: } j_1(x, t) = \int d^3p \frac{p}{m} f_1 \ln f_1 \quad \left(\frac{dh}{dt} \right)_{coll} = \int d^3p J \ln f_1$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial j_1}{\partial x} = \left(\frac{dh}{dt} \right)_{coll} \quad \text{이것은 } h \text{ 에 대한 continuity equation 이다.}$$

Dilute gas approximation

two-body collision 만 일어나고,

3개 이상의 입자가 동시에 한 자리에 모일 확률은
지극히 낮다 가정.

충돌 이전 : p_1 과 p_2 의 correlation이 없다 가정. 둘이 독립임. 그래서 f_2 를 f_1 의 곱으로 나타낼 수 있다.

$$f_2(x, p_1, x, p_2) = f_1(x, p_1) f_1(x, p_2)$$

$$J_+ \text{ 정의할 때는 } p_1', p_2' \text{ 가 충돌 전이었다. } f_2(x, x, p_1', p_2') = f_1(x, p_1') f_1(x, p_2')$$

$$J_+(x, p_1, t) = \int d^3p_2 d^3p_1' d^3p_2' W(p_1, p_2 | p_1', p_2') f_1(x, p_1') f_1(x, p_2')$$

$$J_- \text{ 정의할 때는 } p_1, p_2 \text{ 가 충돌 전 이었다. } f_2(x, x, p_1, p_2) = f_1(x, p_1) f_1(x, p_2)$$

$$J_-(x, p_1, t) = \int d^3p_2 d^3p_1' d^3p_2' W(p_1, p_2 | p_1', p_2') f_1(x, p_1) f_1(x, p_2)$$

$$J = \int d^3p_2 d^3p_1' d^3p_2' W(p_1, p_2 | p_1', p_2') \{ f_1(x, p_1') f_1(x, p_2') - f_1(x, p_1) f_1(x, p_2) \}$$

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial h}{\partial t}\right)_{\text{coll}} &= \int d^3 p_1 \, J \ln f_1 \\
&= \int d^3 p_1 \, d^3 p_2 \, d^3 p'_1 \, d^3 p'_2 \, W(p_1, p_2 | p'_1, p'_2) \{f_1(x, p'_1) f_2(x, p'_2) - f_1(x, p_1) f_2(x, p_2)\} \ln f_1(x, p_1) \\
&\quad \text{무가 첫번째 인자이고 두번째 인자는 상관없음. 1과 2 index 바꿈.} \\
&= \int d^3 p_2 \, d^3 p_1 \, d^3 p'_2 \, d^3 p'_1 \, W(p_2, p_1 | p'_2, p'_1) \{f_1(x, p'_2) f_2(x, p'_1) - f_1(x, p_2) f_2(x, p_1)\} \ln f_1(x, p_2) \\
&= \frac{1}{2} \int d^3 p_1 \, d^3 p_2 \, d^3 p'_1 \, d^3 p'_2 \, W(p_1, p_2 | p'_1, p'_2) \{f_1(x, p'_1) f_2(x, p'_2) - f_1(x, p_1) f_2(x, p_2)\} \{\ln f_1(x, p_1) + \ln f_1(x, p_2)\} \\
&\quad \text{프라이미가 붙었는지 아닌지로 dummy index 구분함.} \\
&= \frac{1}{2} \int d^3 p_1 \, d^3 p_2 \, d^3 p'_1 \, d^3 p'_2 \, W(p_1, p_2 | p'_1, p'_2) \{f_1(x, p_1) f_2(x, p_2) - f_1(x, p'_1) f_2(x, p'_2)\} \{\ln f_1(x, p'_1) + \ln f_1(x, p'_2)\} \\
&= \frac{1}{4} \int d^3 p_1 \, d^3 p_2 \, d^3 p'_1 \, d^3 p'_2 \, W(p_1, p_2 | p'_1, p'_2) \{f_1(x, p'_1) f_2(x, p'_2) - f_1(x, p_1) f_2(x, p_2)\} \cdot \ln \frac{f_1(x, p_2) f_2(x, p_2)}{f_1(x, p'_1) f_2(x, p'_2)}
\end{aligned}$$

Inequality for $x > 0, y > 0, (y-x) \ln \frac{x}{y} \leq 0$

이 케이스에서는, $x = f_1(x, p_1) f_2(x, p_2), y = f_1(x, p'_1) f_2(x, p'_2)$

따라서! $h \leq 0$ at every x .

$H = \int d^3 x \, h(x, t)$ 이니, $H(t)$ 는 모든 시간 에 감소.

$h(x, t)$ never increase for x and t .

그리고 $h(x, t)$ 는 x 에 대해 평균 증가할 수. 아니.

for $H(t)$ never increases in time.

$$\frac{dH}{dt} \leq 0.$$

Entropy density : $\Delta(x, t) = -k_B h(x, t)$

total entropy $\rightarrow$ density 를 공간에 대해 적분 한 것.

$$S_B(t) = \int d^3x \Delta(x, t) = -k_B H(t).$$

We can explain the irreversibility now.

* Shannon entropy (information entropy)

$$H_S = - \sum_i P(x_i) \log_2 P(x_i) = - \langle \log_2 1 \rangle$$

Gibbs Entropy

$$S = -k_B \sum_i p_i \ln p_i.$$

엔트로피가 충돌로 인해 계속, 시간이 지나니가
늘어나. . . .

충돌이 일어나기 전의 정보를

잃어버리게 (molecular chaos)

가 보기에 영감을 받는다.

EQ properties at $t \rightarrow \infty$

$$f_1(p'_1) f_1(p'_2) - f_1(p) f_1(p')$$

부분이 0 이 된다?

H가 상수가 됨.

$$f_1(x, p_1, t) f_1(x, p_2, t) = f_1(x, p'_1, t) f_1(x, p'_2, t).$$

충돌전

충돌후

??

어디서부터

time reversal

Symmetry가 사라지지?

At $t \rightarrow \infty$ no time, position dependence.

$$\ln f_1^0(p) + \ln f_1^0(p_2) = \ln f_1^0(p_1) + \ln f_1^0(p_2)$$

$$= \text{const} - \underbrace{\vec{\alpha} \cdot \vec{p}}_{\text{momentum}} - \underbrace{\beta \frac{p^2}{2m}}_{\text{energy}}$$

collision conservation.

$$\vec{\alpha} = 2\vec{h} \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

이것은 상수라.

→ HW.

Eq distribution 이 Maxwell-Boltzmann distribution 일 것을 유도하기.

$$f_1^0(p) = \frac{n \rightarrow \text{density of particle. } p^2}{(2\pi m k_B T)^{3/2}} e^{-\frac{p^2}{2m k_B T}}$$

↓ 입자 수가 p 를 가질 확률 → 아님.

↳ p 를 가지는 입자의 평균적인 개수 → 맞음.