

经典世界：从封闭系统到非封闭系统

陈童

Abstract

首先是一个对封闭哈密顿系统的简单回顾。然后将非封闭系统和其所处的环境看成一个大的联合的封闭系统，进而系统地发展了非封闭系统的理论。尤其是提出了反映系统向其环境泄漏信息的辛形式泄漏概念，并导出了相应的数学公式。推导了子系统约化概率密度的演化方程。最后，利用这个方程把BBGKY级联方程的推导简化到了几乎一眼就可以看出来的地步。

Contents

1 世界图景：粒子加虚空	1
2 封闭系统	3
3 非封闭系统	6
4 BBGKY级联方程	12
5 举例	14

1 世界图景：粒子加虚空

经典物理的世界图景是，世界是由运动的粒子加上虚空组成的，粒子在虚空中运动，粒子之间通过虚空进行相互作用。至于这种穿越虚空的相互作用如何可能则超出了经典力学的解释范围。

这幅世界图景是如何形成的？(以下内容只是展示一个粗略的科学推理过程，真正的细节是要更微妙得多的) 为了理解这一点，我们不妨考虑食盐在水中的溶解过程，把一小瓶食盐倒入一杯水中，充分搅拌，你会发

现，食盐颗粒全部消失了，然而水面并没有上升。这怎么可能呢？你把一小瓶水倒入一杯水中，水面会上升，因为水的体积增加了。同样，你把一小瓶食盐倒入另一瓶食盐中，食盐占据的体积也会增加。但是，食盐倒入水中总体积却没有增加，那么食盐占据的体积消失到哪里去了呢？为了解释这种人们习以为常，细想却不可思议的情形，你绞尽脑汁，终于，你想到一种类似的情形，就是把一小瓶细沙倒入满满的一瓶豆子中，摇一摇，虽然原本豆子已经把瓶子装满了，但是细沙依然能倒进去，因为细沙颗粒都嵌入了豆子之间的空隙中。所以，水必然不可能是铁板一块，食盐颗粒也不可能是铁板一块，它们内部必然都充满了空隙。一杯水就像一杯豆子，组成这杯豆子的豆子颗粒人们通常称之为水分子，而水分子与水分子之间就充满了虚空，就好像豆子与豆子之间充满间隙，只是水分子这种豆子太小了，肉眼看不见，所以表面上看起来，水就是连续的一片。食盐颗粒也是类似的，它们也不可能完全实心，而必然是由细沙这样的小颗粒(称之为食盐分子)加上虚空构成的，只是同样，组成食盐颗粒的这细沙太小了，肉眼看不见，所以食盐颗粒看起来就是实实的一整颗。食盐溶解到水中的过程其实就是食盐分子嵌入到了水分子之间的间隙中！

推而广之，一切物质都是由微观小粒子加上虚空组成的。空气也是这样，组成空气的小粒子叫空气分子。之所以会刮风，就是这些空气分子在运动。所以，组成物质的微观小粒子是会运动的！对于这一推测的一个佐证是：你吹气球可以感受到气体的压力，这压力从何而来呢？回答是，来自于微观上大量气体分子持续不断的对气球膜的撞击，就好像水在宏观上看起来是连续的一片一样，微观上的这种持续撞击在宏观上感受起来就是一种连续的压力。所以，世界就是由一些在虚空中运动的粒子组成的。

考察一群运动在虚空中的粒子，如果它们和外界的粒子之间完全没有相互作用，只有内部粒子与粒子之间的相互作用，我们就称这群粒子构成了一个封闭系统。反之，如果它们还和外界粒子相互作用，那就是非封闭系统。很显然，对于任何非封闭系统，只要我们不断地扩大系统的范围，最后把所有参与相互作用的粒子都包括进行，就一定能够组成一个大的封闭系统。换言之，非封闭系统可以看成是某个更大的封闭系统的子系统。无论是封闭还是非封闭，如何描述这些经典力学系统请参见我的《初识经典力学（信息守恒版）》，本文是在了解了基本描述方法的基础上再做进一步理论探讨。

2 封闭系统

考察一个由 N 个经典粒子所构成的封闭系统，系统的状态记作 μ ，它可以用状态变量 $X = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N)$ 来刻画，其中 $\mathbf{x}_i$ 是第 i 粒子的位置矢量， $\mathbf{p}_i$ 是第 i 粒子的动量，常常也将这 $2 \times 3N = 6N$ 个状态变量记作 $X = (x_1, x_2, \dots, x_{3N}, p_1, p_2, \dots, p_{3N}) = (x_a, p_a)$ 。系统所有可能状态所构成的空间称作相空间，记为 $\mathcal{M}$ ，每一个状态 X 就是 $\mathcal{M}$ 中的一个点。 $3N$ 称作系统的自由度数，又时候也简记为 n ， $n = 3N$ 。很显然相空间 $\mathcal{M}$ 的维数是

$$\dim(\mathcal{M}) = 2n = 6N. \quad (1)$$

存在一个称之为系统能量的状态量 $H(X)$ ，由它可以给出封闭系统的状态演化方程

$$\frac{dx_a}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_a}, \quad \frac{dp_a}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_a}, \quad a = 1, 2, \dots, n. \quad (2)$$

这组方程就是所谓的哈密顿正则方程，有时候人们也把它写成如下形式

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_i}, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (3)$$

根据这组方程，不难得出系统的总能量一定是守恒的，

$$\frac{dH}{dt} = \sum_a \left(\frac{\partial H}{\partial x_a} \frac{dx_a}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p_a} \frac{dp_a}{dt} \right) = \sum_a \left(\frac{\partial H}{\partial x_a} \frac{\partial H}{\partial p_a} - \frac{\partial H}{\partial p_a} \frac{\partial H}{\partial x_a} \right) = 0. \quad (4)$$

不仅如此，还可以证明系统的状态演化保持如下相空间的2阶微分形式 ω 不变

$$\omega \equiv \sum_a (dx_a \wedge dp_a). \quad (5)$$

ω 称之为相空间的辛形式。(注意，这是一个闭形式，满足 $d\omega = 0$.)

为了证明这一点，不妨考虑一个步长为 δt 的无穷小时间演化，则根据哈密顿正则方程，演化之后相比于演化之前，系统状态变量的改变量为

$$\delta x_a = \frac{\partial H}{\partial p_a} \delta t, \quad \delta p_a = -\frac{\partial H}{\partial x_a} \delta t. \quad (6)$$

则辛形式的改变量为

$$\begin{aligned}
\delta\omega &= \sum_a [d(\delta x_a) \wedge dp_a] + \sum_a [dx_a \wedge d(\delta p_a)] \\
&= \sum_a [d(\frac{\partial H}{\partial p_a}) \wedge dp_a] \delta t - \sum_a [dx_a \wedge d(\frac{\partial H}{\partial x_a})] \delta t \\
&= \sum_{a,b} [\frac{\partial^2 H}{\partial p_a \partial x_b} dx_b \wedge dp_a + \frac{\partial^2 H}{\partial p_a \partial p_b} dp_b \wedge dp_a] \delta t \\
&\quad - \sum_{a,b} [dx_a \wedge dx_b \frac{\partial^2 H}{\partial x_a \partial x_b} + dx_a \wedge dp_b \frac{\partial^2 H}{\partial x_a \partial p_b}] \delta t \\
&= \sum_{a,b} [\frac{\partial^2 H}{\partial p_a \partial x_b} dx_b \wedge dp_a] \delta t - \sum_{a,b} [\frac{\partial^2 H}{\partial x_a \partial p_b} dx_a \wedge dp_b] \delta t = 0. \quad (7)
\end{aligned}$$

反过来，也可以证明，如果系统的状态演化保持相空间辛形式不变，则它必定是按照某种哈密顿正则方程进行演化。具体的证明我们留给读者自行完全，或者请参见《初识经典力学（信息守恒版）》的相关部分。同样在这份讲义里，还论证说，保持相空间辛形式不变是所谓的微观信息守恒的必然要求，所以，封闭系统的状态演化是保持微观信息守恒的。

进一步，注意到对于 $2n$ 维相空间，其体积形式 Ω 由辛形式的 n 次方给出(乘法是外积乘法)，具体来说是

$$\Omega = \frac{1}{n!} \omega^n. \quad (8)$$

所以在无穷小时间演化之下，体积形式的改变量为

$$\delta\Omega = \frac{1}{(n-1)!} \omega^{n-1} \wedge \delta\omega = 0. \quad (9)$$

所以封闭系统的时间演化也保持相空间体积形式不变。进一步，假设考虑相空间某个任意区域，其内部的点随着时间演化，使得原区域在演化之后构成一个新的区域，则由于体积形式在时间演化之下保持不变，即知，新区域的相空间体积必定等于原区域的相空间体积。这就是所谓的刘维尔定理，《初识经典力学（信息守恒版）》中论证这是一种统计信息守恒，所以，封闭系统的时间演化也必定保持统计信息守恒。

封闭系统的任意一个物理可观测量都是相空间 $\mathcal{M}$ 上的某个函数，记作 $\mathcal{O}(X)$ 。根据哈密顿正则方程，不难得出，在时间演化之下 $\mathcal{O}(X)$ 的演化

规律为

$$\begin{aligned}\frac{d\mathcal{O}}{dt} &= \sum_a \left(\frac{\partial \mathcal{O}}{\partial x_a} \frac{dx_a}{dt} + \frac{\partial \mathcal{O}}{\partial p_a} \frac{dp_a}{dt} \right) = \sum_a \left(\frac{\partial \mathcal{O}}{\partial x_a} \frac{\partial H}{\partial p_a} - \frac{\partial \mathcal{O}}{\partial p_a} \frac{\partial H}{\partial x_a} \right) \\ &= \{\mathcal{O}, H\}.\end{aligned}\quad (10)$$

这个方程称作泊松运动方程，式中 $\{\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2\}$ 是一个记号，称作泊松括号，其定义为

$$\{\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2\} \equiv \sum_a \left(\frac{\partial \mathcal{O}_1}{\partial x_a} \frac{\partial \mathcal{O}_2}{\partial p_a} - \frac{\partial \mathcal{O}_1}{\partial p_a} \frac{\partial \mathcal{O}_2}{\partial x_a} \right). \quad (11)$$

不难看出，它具有性质 $\{\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2\} = -\{\mathcal{O}_2, \mathcal{O}_1\}$ (从而 $\{\mathcal{O}, \mathcal{O}\} = 0$)，以及具有性质

$$\{\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2 \mathcal{O}_3\} = \{\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2\} \mathcal{O}_3 + \mathcal{O}_2 \{\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_3\}. \quad (12)$$

不仅如此，泊松括号还具有如下性质

$$\int_{\mathcal{M}} \{\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2\} \cdot \Omega = 0. \quad (13)$$

证明如下

$$\int_{\mathcal{M}} \{\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2\} \Omega = \sum_a \int_{\mathcal{M}} \left(\frac{\partial \mathcal{O}_1}{\partial x_a} \frac{\partial \mathcal{O}_2}{\partial p_a} - \frac{\partial \mathcal{O}_1}{\partial p_a} \frac{\partial \mathcal{O}_2}{\partial x_a} \right) \Omega \quad (14)$$

分部积分，并假设 $\mathcal{O}_1(X)$ 和 $\mathcal{O}_2(X)$ 中至少有一个在相空间边界上趋于零。从而即有

$$\int_{\mathcal{M}} \{\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2\} \Omega = - \sum_a \int_{\mathcal{M}} \left(\mathcal{O}_1 \frac{\partial^2 \mathcal{O}_2}{\partial p_a \partial x_a} - \mathcal{O}_1 \frac{\partial^2 \mathcal{O}_2}{\partial x_a \partial p_a} \right) \Omega = 0. \quad (15)$$

如果系统很大，我们常常不能精确确定它所处的状态，而只能估计它处在各个状态的概率，这时候我们就引入一个相空间概率分布 $\rho(X, t)$ 来描述系统。其定义是，对于系统的初始状态 X_0 ，我们先估计一个概率分布 $\rho(X_0)$ ，然后随着系统演化到 t 时刻，其 t 时刻的概率分布记作 $\rho(X_t, t)$ 。由于一个体积元之内的概率随着体积元的演化总是不变的，所以必定有

$$\rho(X_t, t) \Omega_t = \rho(X_0) \Omega_0, \quad (16)$$

然而根据刘维尔定理，体积元在时间演化之下是不变的，即 $\Omega_t = \Omega_0$ ，从而即有

$$\rho(X_t, t) \equiv \rho(X_0). \quad (17)$$

注意，一般来说， $\rho(X, t)$ 不仅依赖于状态 X ，而且还显含时间 t ，但是很显然

$$\frac{d}{dt}\rho(X_t, t) = 0. \quad (18)$$

所以即有

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(X, t) + \sum_a \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_a} \frac{dx_a}{dt} + \frac{\partial \rho}{\partial p_a} \frac{dp_a}{dt} \right) = 0. \quad (19)$$

代入哈密顿正则方程，即有

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(X, t) + \{\rho, H\} = 0. \quad (20)$$

这就是著名的刘维尔方程。

因此，对于任意物理量 $\mathcal{O}(X)$ ，我们可以计算它在 ρ 上的期望值

$$\langle \mathcal{O} \rangle \equiv \int_{\mathcal{M}} \mathcal{O}(X) \rho(X, t) \cdot \Omega. \quad (21)$$

特别的，由于概率密度的归一化，我们有

$$\langle 1 \rangle_\rho \equiv \int_{\mathcal{M}} \rho(X, t) \cdot \Omega = 1. \quad (22)$$

这个式子左边显含时间 t ，而右边是一个常数，所以还需要验证它在任意时刻都能成立，为此只需注意到

$$\frac{d}{dt}\langle 1 \rangle_\rho \equiv \int_{\mathcal{M}} \frac{\partial}{\partial t}\rho(X, t) \cdot \Omega = \int_{\mathcal{M}} \{H, \rho\} \cdot \Omega = 0. \quad (23)$$

其中我们代入了刘维尔方程，并利用了泊松括号的性质(13) (因为 ρ 在相空间边界上趋于零)。

3 非封闭系统

从一个大的封闭系统出发，我们把它分成 A 、 B 两部分，那么由于 A 、 B 之间的相互作用，子系统 A 就是一个非封闭系统。反过来，对于任何非封闭系

统，我们都可以把它看作 A ，把它所处的外部环境看作 B ，从而将这个非封闭系统看成是某个更大的封闭系统的子系统。我们记 A 的状态为 X_A ， B 的状态为 X_B ，整个封闭系统的状态为 $X = (X_A, X_B)$ 。记 A 的相空间为 $\mathcal{M}_A$ ， B 的相空间为 $\mathcal{M}_B$ ，那么整个封闭系统的相空间 $\mathcal{M}$ 就是 $\mathcal{M}_A$ 与 $\mathcal{M}_B$ 的笛卡尔积，即 $\mathcal{M} = \mathcal{M}_A \times \mathcal{M}_B$ 。现在，我们的关注重点是非封闭系统 A 。

根据能量的可加性，整个封闭系统的能量 $H(X)$ 将由 A 的能量 $H_A(X_A)$ 加上 B 的能量 $H_B(X_B)$ 再加上两者之间相互作用的能量 $V(X_A, X_B)$ 给出。即

$$H(X) = H_A(X_A) + H_B(X_B) + V(X_A, X_B). \quad (24)$$

并且，通常来说，当 A, B 两部分的空间距离趋于无穷远时，相互作用能量 V 将趋于零。进一步，一般来说可以假设，相互作用能量只依赖于空间坐标，而和动量无关，所以可以记作

$$V(X_A, X_B) = V(x_A, x_B), \quad (25)$$

式中 x_A, x_B 分别表示 A, B 部分各粒子的空间坐标。

假设子系统 A 所包含的粒子数为 N_A ，相应的自由度数 $n_A = 3N_A$ ，假设 B 所包含的粒子数为 N_B ，相应的自由度数 $n_B = 3N_B$ 。则根据整个封闭系统的哈密顿正则方程，不难导出 A 部分的状态演化方程，为

$$\frac{dx_{Aa}}{dt} = \frac{\partial H_A}{\partial p_{Aa}}, \quad \frac{dp_{Aa}}{dt} = -\frac{\partial H_A}{\partial x_{Aa}} - \frac{\partial V}{\partial x_{Aa}}, \quad a = 1, 2, \dots, n_A. \quad (26)$$

为了导出这个方程，我们只需注意到 V 与动量无关。

类似的，根据整个封闭系统的泊松运动方程，我们可以导出 A 部分任何物理量 $\mathcal{O}_A(X_A)$ 所满足的运动微分方程，为

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{O}_A}{dt} &= \{\mathcal{O}_A, H\} = \{\mathcal{O}_A, H\}_A = \{\mathcal{O}_A, H_A + V\}_A \\ &= \{\mathcal{O}_A, H_A\}_A + \{\mathcal{O}_A, V\}_A. \end{aligned} \quad (27)$$

式中泊松括号的下标 A 表示这个泊松括号使用子系统 A 的变量定义的。

特别的， H_A 满足如下演化方程

$$\frac{dH_A}{dt} = \{H_A, V\}_A = -\sum_a \frac{\partial V}{\partial x_{Aa}} \frac{\partial H_A}{\partial p_{Aa}} = -\sum_a \frac{\partial V}{\partial x_{Aa}} \frac{dx_{Aa}}{dt}. \quad (28)$$

通常会定义 $-\frac{\partial V}{\partial x_{Aa}} \equiv F_{Aa}^B$ 为 B 部分对 A 的作用力，并记速度 $\frac{dx_{Aa}}{dt}$ 为 v_{Aa} ，则上式就是

$$\frac{dH_A}{dt} = \sum_a F_{Aa}^B v_{Aa}. \quad (29)$$

也即是说， A 的能量并不守恒，通常称等式右边为 B 对 A 的外力做功的功率，所以这个结果就是所谓的功能原理。或者，把时间微元 dt 乘到等式右边，得到

$$dH_A = \sum_a F_{Aa}^B dx_{Aa} \equiv W_{B \rightarrow A}, \quad (30)$$

等式右边称作 B 对 A 的做功一形式，记作 $W_{B \rightarrow A}$ 。上面这个式子是功能原理的另一种写法，它告诉我们 B 对 A 做的功等于 A 能量的增加量。

由于 $W_{B \rightarrow A}$ 依赖于 x_B ，而一般来说， x_B 会随时间剧烈变化，从而使得 dH_A 时正时负。这意味着，与 B 的耦合通常会使得 A 的能量不断波动。当 B 是一个宏观热库时，这种能量交换的微观表现就是热传导。

由于作用力 F_{Aa}^B 不仅依赖于 x_A ，还依赖于 x_B ，而 x_B 并不是事先给定的，而也是动力学变量(因此是与 $x_A p_A$ 有动力学依赖的)，所以不难看出 $W_{B \rightarrow A}$ 不是一个闭形式，而是等于

$$dW_{B \rightarrow A} = - \sum_{a,b} \frac{\partial^2 V}{\partial x_{Aa} \partial x_{Bb}} dx_{Bb} \wedge dx_{Aa} \neq 0. \quad (31)$$

由此可见，由于动力学变量 x_B 的存在，所以 A 受到的外力 F_{Aa}^B 一般来说并不是一个保守力(保守力的功一形式必定是闭形式)，这使得子系统 A 并不是一个真正的哈密顿系统，不存在一个哈密顿量使得它的状态演化方程可以写成标准的哈密顿正则方程。另外，很显然，交换 A, B 的地位，即有

$$dW_{A \rightarrow B} = -dW_{B \rightarrow A}. \quad (32)$$

这个结果可以称之为广义牛顿第三定律，注意，它不要求有空间平移对称性，从而即使 A, B 之间的相互作用力不满足通常的牛顿第三定律它也依然成立。

辛形式泄漏与相空间混合

记 A 的辛形式为 ω_A , B 的辛形式为 ω_B , 整个封闭系统总的辛形式为 $\omega = \omega_A + \omega_B$ 。很显然, 根据前面对封闭系统的讨论, 在整个封闭系统的时间演化之下, ω 是不变的, 即

$$\delta\omega = 0. \quad (33)$$

但是, 由于 A, B 之间的耦合, ω_A 和 ω_B 各自均非不变, 只是它们各自的变化相互补偿, 使得最后总的 ω 不变。

为了考察 ω_A 在整个封闭系统时间演化之下的改变, 我们考虑一个无穷小时间步 δt , 根据方程(26), 我们有

$$\delta x_{Aa} = \frac{\partial H_A}{\partial p_{Aa}} \delta t, \quad \delta p_{Aa} = -\frac{\partial H_A}{\partial x_{Aa}} \delta t - \frac{\partial V}{\partial x_{Aa}} \delta t. \quad (34)$$

代入 $\delta\omega_A = \sum_a d(\delta x_{Aa}) \wedge dp_{Aa} + \sum_a dx_{Aa} \wedge d(\delta p_{Aa})$, 很显然, 由于 H_A 相关项的贡献和一个标准的哈密顿正则系统一样, 所以这些项对 $\delta\omega_A$ 的贡献必定为零, 所以最终只需考虑 V 相关项的贡献, 从而有

$$\delta\omega_A = -\sum_a dx_{Aa} \wedge d\left(\frac{\partial V}{\partial x_{Aa}}\right) \delta t = -\sum_{a,b} dx_{Aa} \wedge dx_{Bb} \frac{\partial^2 V}{\partial x_{Aa} \partial x_{Bb}} \delta t. \quad (35)$$

换言之,

$$\frac{d\omega_A}{dt} = -\sum_{a,b} \frac{\partial^2 V}{\partial x_{Aa} \partial x_{Bb}} dx_{Aa} \wedge dx_{Bb} = -dW_{B \rightarrow A}. \quad (36)$$

类似的, 当然也有

$$\frac{d\omega_B}{dt} = -dW_{A \rightarrow B} = dW_{B \rightarrow A}. \quad (37)$$

很显然, 这个正好与 $\frac{d\omega_A}{dt}$ 抵消, 使得最后总的 ω 不变。

我们称以上结果为辛形式泄漏, 它的意思是, 因为与 B 的耦合, 导致 A 的辛形式泄漏到了 B 中去。根据《初识经典力学(信息守恒版)》, 辛形式的守恒就是信息的守恒, 因此, 辛形式泄漏的物理本质就是信息的泄漏, 即, 因为与 B 的耦合, 导致 A 的信息泄漏到了 B 中去。

注意到辛形式的泄漏率虽然不等于零, 但却是一个恰当形式, 而辛形式本身又是一个闭形式, 所以可知, ω_A 的辛形式泄漏不会改变它的上同调类。换言之, 假设在总的相空间 $\mathcal{M}$ 中取一个闭合两维曲面 Σ , 则它上面的 ω_A 通量不会时间改变, 即

$$\int_{\Sigma} \omega_A \quad (38)$$

是不变的。但是，假设所取的二维曲面不闭合，而是一个带边曲面，不妨记作 D 吧，则根据(36)式，有

$$\frac{d}{dt} \int_D \omega_A = - \int_D dW_{B \rightarrow A} = - \oint_{\partial D} W_{B \rightarrow A}. \quad (39)$$

式中 ∂D 表示曲面 D 的边界，它是一条一维闭合曲线。当然，因为 A, B 辛泄漏的相互补偿，所以必然有

$$\frac{d}{dt} \int_D \omega_A = - \frac{d}{dt} \int_D \omega_B. \quad (40)$$

即曲面 D 失去的 A 辛面积，必然等于它增加的 B 辛面积。换言之，在曲面 D 上， A, B 各自的辛面积发生了混合。

辛形式泄漏的存在也说明了子系统一般来说不是哈密顿正则系统，因为哈密顿正则系统的时间演化必定是保持辛形式不变的。

不仅如此，辛形式泄漏的存在也必定使得整个封闭系统的时间演化不能保持子系统的相空间体积形式。以 A 的体积形式 Ω_A 为例，很显然有

$$\frac{d}{dt} \Omega_A = \frac{1}{(n_A - 1)!} \omega_A^{n_A - 1} \wedge \frac{d\omega_A}{dt} = - \frac{1}{(n_A - 1)!} \omega_A^{n_A - 1} \wedge dW_{B \rightarrow A} \neq 0. \quad (41)$$

利用 $d\omega_A = 0$ ，进而也可以把上式写作

$$\frac{d}{dt} \Omega_A = - \frac{1}{(n_A - 1)!} \omega_A^{n_A - 1} \wedge dW_{B \rightarrow A} = - \frac{1}{(n_A - 1)!} d(\omega_A^{n_A - 1} \wedge W_{B \rightarrow A}). \quad (42)$$

也即是说，子系统辛体积的变化率也是一个恰当形式。这个结果也说明，辛泄漏不改变子系统体积形式的上同调类。

类似的，假设在相空间 $\mathcal{M}$ 中取一个 $2n_A$ 维的子流形 $\mathcal{S}$ ，其边界为 $\partial \mathcal{S}$ ，则根据上面的结果有

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{S}} \Omega_A = - \frac{1}{(n_A - 1)!} \int_{\partial \mathcal{S}} (\omega_A^{n_A - 1} \wedge W_{B \rightarrow A}). \quad (43)$$

特别的，如果 $\mathcal{S}$ 是一个闭合流形，则其上的 Ω_A 通量将保持不变。当然也有

$$\frac{d}{dt} \Omega_B = - \frac{1}{(n_B - 1)!} d(\omega_B^{n_B - 1} \wedge W_{A \rightarrow B}). \quad (44)$$

约化概率密度

假设记整个封闭系统的相空间概率密度为 $\rho(X, t) = \rho(X_A, X_B, t)$, 我们可以定义子系统 A 的约化概率密度为

$$\rho_A(X_A, t) = \int_{\mathcal{M}_B} \rho(X_A, X_B, t) \cdot \Omega_B. \quad (45)$$

$\rho(X, t)$ 满足刘维尔方程, 但是约化概率密度 ρ_A 所满足的可不是刘维尔方程。

为了看清 ρ_A 满足的方程, 我们可以进行如下推导

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = \int_{\mathcal{M}_B} \frac{\partial \rho}{\partial t} \cdot \Omega_B = \int_{\mathcal{M}_B} \{H, \rho\} \cdot \Omega_B. \quad (46)$$

式中我们代入了 ρ 所满足的刘维尔方程。利用 $H = H_A + H_B + V$, 以及泊松括号的分解 $\{\cdot, \cdot\} = \{\cdot, \cdot\}_A + \{\cdot, \cdot\}_B$, 即有

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_A}{\partial t} &= \int_{\mathcal{M}_B} \{H, \rho\} \cdot \Omega_B \\ &= \int_{\mathcal{M}_B} \{H_A, \rho\}_A \cdot \Omega_B + \int_{\mathcal{M}_B} \{H_B, \rho\}_B \cdot \Omega_B \\ &\quad + \int_{\mathcal{M}_B} \{V, \rho\}_A \cdot \Omega_B + \int_{\mathcal{M}_B} \{V, \rho\}_B \cdot \Omega_B. \end{aligned} \quad (47)$$

利用泊松括号的性质(13)可知, $\int_{\mathcal{M}_B} \{H_B, \rho\}_B \cdot \Omega_B = 0$, $\int_{\mathcal{M}_B} \{V, \rho\}_B \cdot \Omega_B = 0$ 。所以上面的式子可以简化成

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = \int_{\mathcal{M}_B} \{H_A, \rho\}_A \cdot \Omega_B + \int_{\mathcal{M}_B} \{V, \rho\}_A \cdot \Omega_B. \quad (48)$$

又注意到对子系统 A 进行的泊松括号运算与对子系统 B 的相空间积分无关, 从而 $\int_{\mathcal{M}_B} \{H_A, \rho\}_A \cdot \Omega_B = \{H_A, \int_{\mathcal{M}_B} \rho \cdot \Omega_B\}_A = \{H_A, \rho_A\}_A$, 代入上式, 即有

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \{\rho_A, H_A\}_A = \int_{\mathcal{M}_B} \{V, \rho\}_A \cdot \Omega_B. \quad (49)$$

注意, 等式右边对 B 的相空间积分不能提到泊松括号内部去, 因为 V 也依赖于 x_B 。这个结果就是子系统约化概率密度所满足的基本方程。

4 BBGKY级联方程

全同粒子体系

现在，假设我们封闭系统由 N 个全同粒子组成，即系统中的这 N 个粒子都是同一种粒子，也就是相互之间不可区分的全同粒子。所谓全同粒子系统，我们指的是描述这个系统的所有物理可观测量在 N 粒子的任意置换下保持不变，特别的哈密顿量 $H(X)$ 在 N 粒子的任意置换之下保持不变。

对于这种全同粒子系统，在进行相空间积分时还要稍作处理，具体来说，就是要额外除以一个 $N!$

$$\frac{1}{N!} \int_{\mathcal{M}} [\mathcal{O}(X)] \cdot \Omega. \quad (50)$$

式中 $[\mathcal{O}(X)]$ 表示某个被积函数。特别的，全同粒子体系相空间概率密度 $\rho(X, t)$ 的归一化条件为

$$\frac{1}{N!} \int_{\mathcal{M}} \rho(X, t) \cdot \Omega = 1. \quad (51)$$

这样处理的原因如下：假设记第 i 个粒子的位置和动量为 $(\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_i)$ ，则如果这些都是全同粒子，那相点 $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N)$ 与粒子任意置换以后的相点 $(\mathbf{x}_{P(1)}, \mathbf{x}_{P(2)}, \dots, \mathbf{x}_{P(N)}, \mathbf{p}_{P(1)}, \mathbf{p}_{P(2)}, \dots, \mathbf{p}_{P(N)})$ (式中 P 代表置换操作)就要等同为同一点，因为由于粒子间不可区分，它们描述同一个系统状态。由于 N 个粒子共有 $N!$ 种不同的置换，所以我们实际上要把 $N!$ 个相点进行这样的等同。如此一样，系统的相空间就不再是原来的 $\mathcal{M}$ 了，而是进行这样的等同以后的 $\mathcal{M}/S_N$ ，这里 S_N 代表 $N!$ 个不同置换的集合。如此一来，计算相空间积分的时候，就应该是像下面这样积

$$\int_{\mathcal{M}/S_N} [\dots] \cdot \Omega. \quad (52)$$

如果为了方便我们依然将积分区域保持为原来的 $\mathcal{M}$ ，那我们就多算了 $N!$ 倍，从而要额外除以 $N!$ ，即

$$\int_{\mathcal{M}/S_N} [\dots] \cdot \Omega = \frac{1}{N!} \int_{\mathcal{M}} [\dots] \cdot \Omega. \quad (53)$$

对于这样封闭的全同粒子体系，假设我们把它任意分子 A, B 两个部分，则可以定义 A 部分的约化分布函数 $f_A(X_A, t)$ 为，

$$f_A(X_A, t) \equiv \frac{1}{N_B!} \int_{\mathcal{M}_B} \rho(X, t) \cdot \Omega_B. \quad (54)$$

根据 ρ 的归一化条件，不难得出 f_A 归一化为

$$\frac{1}{N_A!} \int_{\mathcal{M}_A} f_A(X_A, t) \cdot \Omega_A = \frac{N!}{N_A! N_B!}. \quad (55)$$

注意，不是归一为1，这就是我们称 f_A 为分布函数，而不称之为概率密度的原因，但是，当然它的实质就是约化概率密度。所以，根据(49)式，我们有

$$\frac{\partial f_A}{\partial t} + \{f_A, H_A\}_A = \frac{1}{N_B!} \int_{\mathcal{M}_B} \{V, \rho\}_A \cdot \Omega_B. \quad (56)$$

BBGKY级联方程

现在，我们假设全同粒子间的相互作用都是两体相互作用，从而

$$V(x_A, x_B) = \sum_{i,j} U(\mathbf{x}_{Ai}, \mathbf{x}_{Bj}). \quad (57)$$

代入上面的(56)式，并注意到，由于 B 内所有粒子的置换对称性，

$$\frac{1}{N_B!} \sum_{i,j} \int_{\mathcal{M}_B} \{U(\mathbf{x}_{Ai}, \mathbf{x}_{Bj}), \rho\}_A \cdot \Omega_B \quad (58)$$

对 B 部分求和中每一项的贡献都是相同的，从而

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N_B!} \sum_{i,j} \int_{\mathcal{M}_B} \{U(\mathbf{x}_{Ai}, \mathbf{x}_{Bj}), \rho\}_A \cdot \Omega_B \\ &= \frac{1}{(N_B - 1)!} \sum_i \int_{\mathcal{M}_B} \{U(\mathbf{x}_{Ai}, \mathbf{x}_{B1}), \rho\}_A \cdot \Omega_B. \end{aligned} \quad (59)$$

注意到 $\Omega_B = \Omega_{B-1} \wedge \Omega_{B1}$ ，式中 $\Omega_{B1} = d^3 \mathbf{x}_{B1} d^3 \mathbf{p}_{B1}$ 为单独一个 $B1$ 粒子的相空间体积形式，而 Ω_{B-1} 为 B 中除这第1个粒子之外其它粒子的相空间体积形式。显然，对这 $N_B - 1$ 个粒子的相空间积分可以提到泊松括号的内部去，利用

$$f_{A+1}(X_A, X_{B1}) \equiv \frac{1}{(N_B - 1)!} \int_{\mathcal{M}_{B-1}} \rho(X, t) \cdot \Omega_{B-1}. \quad (60)$$

(式中 f_{A+1} 表示原来的 A 部分再额外加上一个原 B 1粒子所构成的总分布函数) 即可以得到

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(N_B - 1)!} \sum_i \int_{\mathcal{M}_B} \{U(\mathbf{x}_{Ai}, \mathbf{x}_{B1}), \rho\}_A \cdot \Omega_B \\ &= \sum_i \int \{U(\mathbf{x}_{Ai}, \mathbf{x}_{B1}), f_{A+1}\}_A \Omega_{B1}. \end{aligned} \quad (61)$$

综合以上所有结果, 代入(56)式, 即可以得到

$$\frac{\partial f_A}{\partial t} + \{f_A, H_A\}_A = \sum_i \int \{U(\mathbf{x}_{Ai}, \mathbf{x}_{B1}), f_{A+1}\}_A \cdot \Omega_{B1}. \quad (62)$$

这就是著名的BBGKY级联方程。注意这个方程的结构: 如果 A 中只含一个粒子, 则 f_1 的演化方程右边出现了 f_2 ; 而如果写出 f_2 的方程, 右边又会出现 f_3 。如此环环相扣, 直至包含全部 N 个粒子信息的 ρ 本身。这正是信息守恒在分布函数语言中的面貌: 总信息不多不少地存在, 只是它会从 f_1 流向 f_2 , 再从 f_2 流向 f_3逐级向更高阶的关联函数中渗透。用本文的语言说, 这就是辛形式泄漏在统计层面的表现: 低阶分布函数的“有效信息”在减少, 但它并没有消失, 而是泄漏进了高阶关联之中。

5 举例

本节是举两个关于 A, B 两个子系统通过相互作用进行耦合的例子。当然, 本节考察的都是最简单的情况, 但也足以说明一些物理效应。

耗散力的起源

假设 A, B 均只有一个自由度, 相应的位置坐标分别记作 q_A, q_B 。再假设 B 的运动很快, 总是近似处于由 A 决定的瞬时平衡位置:

$$q_B = Q(q_A),$$

满足

$$\frac{\partial V}{\partial q_B}(q_A, Q(q_A)) = 0.$$

定义有效势能

$$V_{\text{eff}}(q_A) = V(q_A, Q(q_A)).$$

它的梯度是

$$\frac{\partial V_{\text{eff}}}{\partial q_A} = \frac{\partial V}{\partial q_A} + \frac{\partial V}{\partial q_B} \frac{\partial Q}{\partial q_A}.$$

由于平衡条件给出 $\partial V / \partial q_B = 0$ ，所以

$$\frac{\partial V_{\text{eff}}}{\partial q_A} = \frac{\partial V}{\partial q_A}.$$

而 A 的真实受力正是

$$\dot{p}_A = -\frac{\partial H_A}{\partial q_A} - \frac{\partial V}{\partial q_A}.$$

因此

$$\dot{p}_A = -\frac{\partial}{\partial q_A} [H_A + V_{\text{eff}}(q_A)].$$

结论就是，在严格的绝热极限下， B 的反作用只表现为势能重整化； A 的有效动力学仍然保持 ω_A ，是一个真正的哈密顿正则系统。

但是，耗散来自 B 对 A 的“滞后响应”，若把滞后展开为

$$q_B(t) = Q(q_A) - \chi(q_A)\dot{q}_A + \cdots,$$

则

$$F_A^B = -\frac{\partial V}{\partial q_A}(q_A, Q - \chi\dot{q}_A) \approx -\frac{\partial V_{\text{eff}}}{\partial q_A} + K\chi\dot{q}_A.$$

式中 $K = \frac{\partial^2 V}{\partial q_A \partial q_B}$ 。于是出现一阶耗散力

$$F_{\text{diss}} \sim K\chi\dot{q}_A.$$

这说明摩擦系数本质上由“耦合矩阵 K ”和“ B 的响应滞后 χ ”共同决定。

一个精确的例子

考虑 A 是一个粒子， B 是一组谐振子：

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(q) + \sum_{\alpha} \left[\frac{P_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2}{2} - c_{\alpha} q x_{\alpha} \right].$$

此时

$$dW_{B \rightarrow A} = -\sum_{\alpha} c_{\alpha} dq \wedge dx_{\alpha} \neq 0.$$

运动方程为

$$\begin{aligned} m\ddot{q} &= -U'(q) + \sum_{\alpha} c_{\alpha} x_{\alpha}, \\ \ddot{x}_{\alpha} &= -\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha} + \frac{c_{\alpha}}{m_{\alpha}} q. \end{aligned}$$

第二个方程可严格解出：

$$x_{\alpha}(t) = x_{\alpha}(0) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{\dot{x}_{\alpha}(0)}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t + \frac{c_{\alpha}}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}} \int_0^t \sin[\omega_{\alpha}(t-s)] q(s) ds.$$

代回 A 的方程，并定义

$$\xi(t) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \left[x_{\alpha}(0) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{\dot{x}_{\alpha}(0)}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t \right],$$

得到

$$m\ddot{q} = -U'(q) + \xi(t) + \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}} \int_0^t \sin[\omega_{\alpha}(t-s)] q(s) ds.$$

对最后一项分部积分：

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}} \int_0^t \sin[\omega_{\alpha}(t-s)] q(s) ds \\ &= K(0)q(t) - q(0)K(t) - \int_0^t K(t-s) \dot{q}(s) ds, \end{aligned}$$

其中

$$K(\tau) = \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2} \cos(\omega_{\alpha} \tau).$$

把 $K(0)q(t)$ 吸收进重整化势能，得到广义Langevin 方程：

$$m\ddot{q} = -U'_{\text{ren}}(q) - \int_0^t K(t-s) \dot{q}(s) ds + \xi(t) - q(0)K(t).$$

若谐振子热浴的初态取温度为 T 的热平衡分布，则

$$\langle x_{\alpha}(0) x_{\beta}(0) \rangle = \delta_{\alpha\beta} \frac{k_B T}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2}, \quad \langle \dot{x}_{\alpha}(0) \dot{x}_{\beta}(0) \rangle = \delta_{\alpha\beta} \frac{k_B T}{m_{\alpha}},$$

于是

$$\langle \xi(t) \xi(s) \rangle = k_B T K(t-s).$$

这正是经典涨落—耗散关系。

结论就是：辛形式从 A 泄漏到 B ，在谐振热浴模型中具体表现为：1. 记忆摩擦项

$$- \int_0^t K(t-s) \dot{q}(s) ds;$$

2. 噪声项 $\xi(t)$. 二者由

$$\langle \xi(t) \xi(s) \rangle = k_B T K(t-s)$$

精确联系在一起。所以，对谐振子热浴，可以直接推出记忆摩擦和涨落—耗散关系。