

## 5. ブラウン運動の微視的導出 (森理論)

目標 射影演算子の方法を、閉じた系で線形ランジュバン方程式を導くことにより理解する。具体的には以下のことを分かる。

- 射影演算子の方法は、いろいろな動きが混ざっている中から、遅い動きだけを取り出す方法。
- 射影演算子はベクトルを部分空間に射影する演算子。
- 射影演算子の方法のポイントは、 $\dot{X}_\mu(t)$  を射影演算子を使って、①現在の  $\{X_\mu(t)\}$  に比例する部分と、②過去の  $\{X_\mu(t)\}$  に比例する部分と、③それ以外に分けること。③がランダム力になる。
- 一般化されたランジュバン方程式はマルコフ近似でランジュバン方程式になる。

- 目次 (1) はじめに  
(2) 射影演算子  
(3) 一般化されたランジュバン方程式の導出  
(4) マルコフ近似  
(5) まとめ

仮定 1. ある複数の物理量  $X_\mu (\mu = 1, 2, \dots)$  が閉じた系で定義されている。つまり、全ての粒子の位置と運動量  $\{q_l, p_l\}$  とすると、 $X_\mu = X_\mu(\{q_l, p_l\})$ 。また、時間発展は、次のニュートン方程式に従う。

$$\dot{q}_l(t) = \frac{p_l(t)}{m} \quad \dot{p}_l(t) = -\frac{\partial V(\{q_l(t)\})}{\partial q_l(t)} \quad (1)$$

2. マルコフ近似  
(a)  $X_\mu(t)$  の時間変化が充分遅い。  
(b) 充分時間がたっている。

結論 1. 仮定 1 から、一般化されたランジュバン方程式

$$\dot{X}_\mu(t) = \sum_\nu i\Omega_{\mu\nu} X_\nu - \int_0^t \sum_\nu M_{\mu\nu}(t-t') X_\nu(t') dt' + R_\mu(t) \quad (2)$$

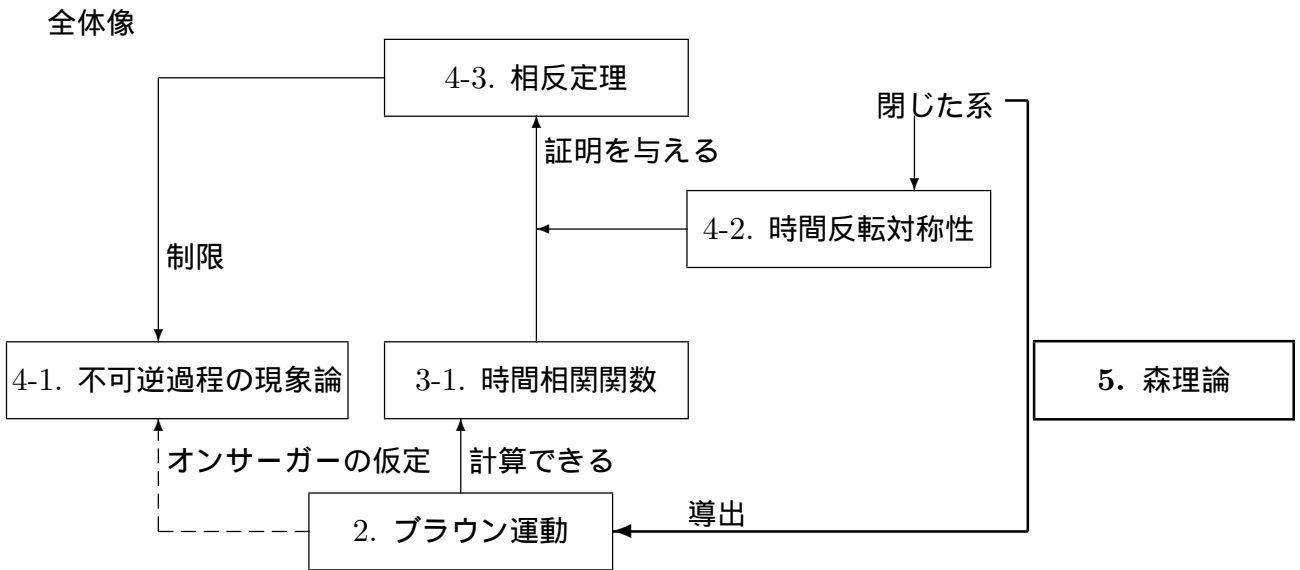
が厳密に導出できる。

2. 仮定 2 から、線形ランジュバン方程式 (1 変数)

$$\dot{X}(t) = -\gamma X(t) + R(t) \quad (3)$$

が近似的に導出できる。

(1) 全体像と流れ



流れ

決定論から確率過程という数学的にまったく違うものが導ける不思議を味わって欲しい。

閉じた系での時間発展を表すニュートン方程式 (1) 式 (決定論)

↓ 厳密

一般化されたランジュバン方程式 (2) 式 (時間おくれの項=記憶項)

↓ マルコフ 近似

ランジュバン方程式 (3) 式 (確率過程)

## (2) 射影演算子

ヒルベルト (関数) 空間

次元が無限あるだけで、普通のベクトル空間と同じ。言葉が少しずつ違う。

ベクトル空間

関数空間

ベクトル  $A$

関数  $A(\{q_l, p_l\})$

行列  $P$

演算子  $P$

3次元のあるベクトル  $A$  を特定の平面  
( $x-y$  平面) に射影する。

ある関数  $A(\{q_l, p_l\})$  を特定の関数空間  
(部分空間) $\{X_\mu(\{q_l, p_l\})\}$  に射影する。

射影演算子の定義

$$PA = \sum_{\mu\nu} \langle AX_\mu \rangle (XX^{-1})_{\mu\nu} X_\nu \quad (4)$$

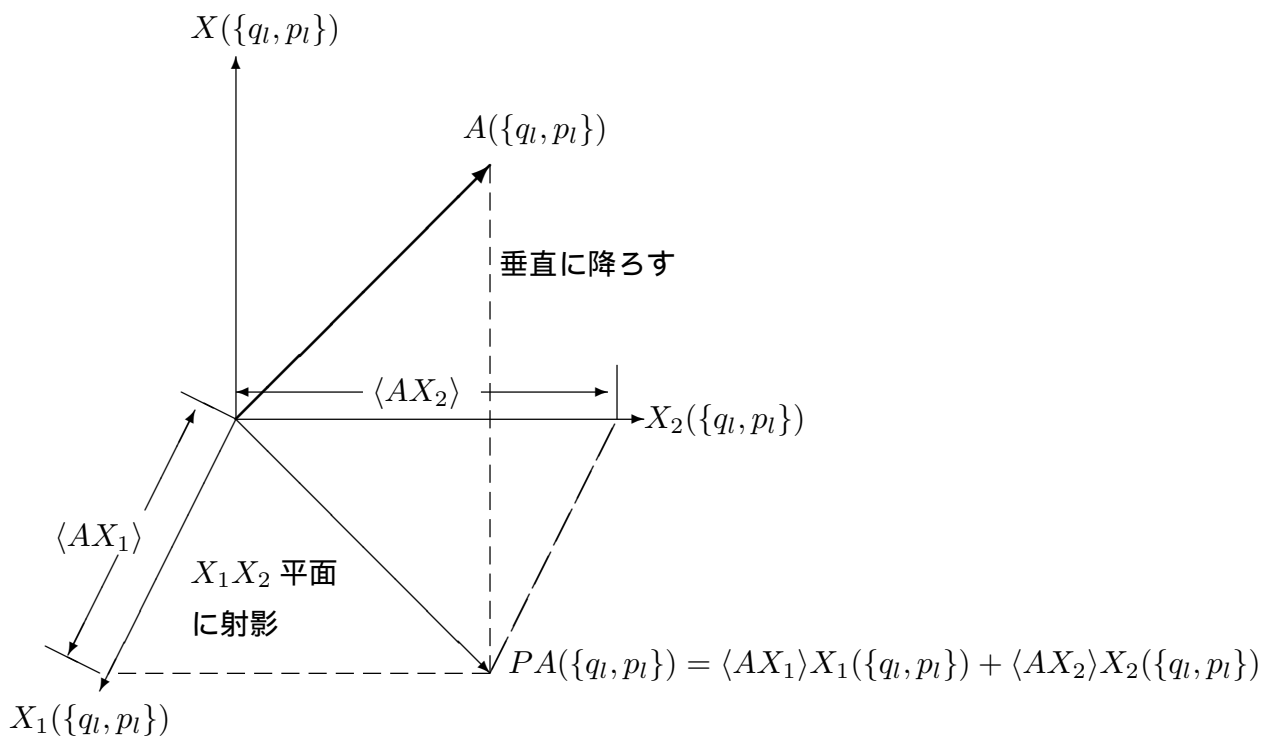
ただし、 $(XX^{-1})_{\mu\nu}$  は、 $\langle X_\mu X_\nu \rangle$  の逆行列。この逆行列がなぜ付くかは付録参照。また、

$$\langle \dots \rangle \equiv \langle \dots \rangle_{eq} = \int d\Gamma \dots \rho_{eq}(\{q_l, p_l\}) \quad (5)$$

この射影演算子は、宿題 61 の様な性質を持っている。

簡単のために、 $X_1 = X_1(\{q_l, p_l\})$  と  $X_2 = X_2(\{q_l, p_l\})$  が正規直交系をなすとすると、 $\langle X_\mu X_\nu \rangle = \delta_{\mu\nu}$  だから、

$$PA = \sum_{\mu=1}^2 \langle AX_\mu \rangle X_\mu \quad (6)$$



(3) 一般化されたランジュバン方程式の導出

リウヴィル演算子

ニュートン方程式 (1) のもとで、 $X(t) = X(\{q_l(t), p_l(t)\})$  の時間発展を考える。チェーンルールから、

$$\frac{dX(\{q_l(t), p_l(t)\})}{dt} = \sum_l \left\{ \dot{q}_l(t) \frac{\partial X(\{q_l(t), p_l(t)\})}{\partial q_l(t)} + \dot{p}_l(t) \frac{\partial X(\{q_l(t), p_l(t)\})}{\partial p_l(t)} \right\} \quad (7)$$

右辺は、長くて面倒なので、

$$iL \equiv \sum_l \left\{ \dot{q}_l(t) \frac{\partial}{\partial q_l(t)} + \dot{p}_l(t) \frac{\partial}{\partial p_l(t)} \right\} \quad (8)$$

という記号を定義すると、

$$\frac{dX(t)}{dt} = iLX(t) \quad (9)$$

と書ける。

$iL$  は、リウヴィル演算子と呼ばれる演算子を表す。(9) 式は、形式的に解くことができ、

$$X(t) = e^{iLt} X(0) \quad (10)$$

(宿題 64)。また、これ以後面倒なので、 $X(0)$  を  $X$  と書く。(9) 式を  $t$  で微分すると、

$$\dot{X}(t) = e^{iLt} iLX \quad (11)$$

これが出発点になる。

導出の流れ

全部で 3 つに分ける

$$\begin{aligned} \dot{X}_\mu(t) &= e^{iLt} \underbrace{iLX_\mu}_{\text{わけ} \text{る}} \\ &= \boxed{\text{① } e^{iLt} P iLX_\mu} + \boxed{\text{② } e^{iLt} Q iLX_\mu} \\ &\quad \begin{array}{c} \text{ここだけ} \\ \downarrow \\ \text{さらにわけ} \end{array} \\ &= \underbrace{- \sum_\nu \int_0^t M_{\mu\nu}(t-t') X_\nu(t') dt'}_{\text{② - 1 } X_\nu(t') \text{ に比例}} + \underbrace{R_\mu(t)}_{\text{② - 2 それ以外}} \end{aligned}$$

## 導出の詳細

射影演算子を使って、 $e^{iLt}iLX_\mu$  を2つの項に分ける。

$$e^{tiL}iLX_\mu = \underbrace{e^{tiL}PiLX_\mu}_{\textcircled{1}} + \underbrace{e^{tiL}QiLX_\mu}_{\textcircled{2}} \quad (12)$$

① (12) 式の1項目:

$$PiLX_\mu = \sum_{\nu\lambda} \langle (iLX_\mu)X_\nu \rangle (XX^{-1})_{\nu\lambda} X_\lambda = \sum_{\nu} i\Omega_{\mu\nu} X_\nu \quad (13)$$

ここで、

$$i\Omega_{\mu\nu} \equiv \sum_{\lambda} \langle (iLX_\mu)X_\lambda \rangle (XX^{-1})_{\lambda\nu} \quad (14)$$

$i\Omega_{\mu\nu}$  は、 $\{q_l, p_l\}$  の関数でないので、演算子は作用しないから、

$$e^{tiL}PiLX_\mu = e^{tiL} \sum_{\nu} i\Omega_{\mu\nu} X_\nu = \sum_{\nu} i\Omega_{\mu\nu} e^{tiL} X_\nu = \sum_{\nu} i\Omega_{\mu\nu} X_\nu(t) \quad (15)$$

② (12) 式の2項目:  $e^{tiL}$  を分ける。 $iL = QiL + PiL$  だから、

$$e^{tiL} = \int_0^t e^{t'iL} PiL e^{(t-t')QiL} dt' + e^{tQiL} \quad (16)$$

(宿題 65 参照)。ここで、 $PiL$  と  $QiL$  は交換しないから、単純に、 $e^{iLt} = e^{QiLt} e^{PiL}$  とはならない事に注意しなさい。これを使って、

$$e^{tiL}QiLX_\mu = \underbrace{\int_0^t e^{t'iL} PiL e^{(t-t')QiL} QiLX_\mu dt'}_{\textcircled{2-1}} + \underbrace{e^{tQiL} QiLX_\mu}_{\textcircled{2-2}} \quad (17)$$

②-2

今、 $R_\mu(t) \equiv e^{tQiL} QiLX_\mu$  とすると、(17) 式の右辺2項目は、 $R_\mu(t)$  となる。

②-1

1項目は、計算すると

$$\int_0^t e^{t'iL} PiL e^{(t-t')QiL} QiLX_\mu dt' = \int_0^t e^{t'iL} PiL R_\mu(t-t') dt' \quad (18)$$

$P$  の定義 (4) 式から

$$\int_0^t e^{t'iL} PiL R_\mu(t-t') dt' = \int_0^t e^{t'iL} \sum_{\mu\lambda} \langle [iLR_\mu(t-t')]X_\nu \rangle (XX^{-1})_{\nu\lambda} X_\lambda dt' \quad (19)$$

$e^{t'iL}$  は、最後の  $X_\lambda$  にしかかからないから、

$$\begin{aligned} & \int_0^t e^{t'iL} \sum_{\mu\lambda} \langle [iLR_\mu(t-t')]X_\nu \rangle (XX^{-1})_{\nu\lambda} X_\lambda dt' \\ &= \int_0^t \sum_{\mu\lambda} \langle [iLR_\mu(t-t')]X_\nu \rangle (XX^{-1})_{\nu\lambda} X_\lambda(t') dt' \end{aligned} \quad (20)$$

ここで、(宿題 66)

$$\langle [iLR_\mu(t)]X_\nu \rangle = -\langle R_\mu(t)[iLX_\nu] \rangle = \langle R_\mu(t)R_\nu \rangle \quad (21)$$

結局、

$$\int_0^t e^{t'iL} P i L e^{(t-t')Q i L} Q i L X_\mu dt' = - \int_0^t \sum_\nu M_{\mu\nu}(t-t') X_\nu(t') dt' \quad (22)$$

ここで

$$M_{\mu\nu}(t) = \sum_\lambda \langle R_\mu(t)R_\lambda \rangle (X X^{-1})_{\lambda\nu} \quad (23)$$

まとめると、(2) 式が求まる。特に、1 変数  $X(t)$  の場合は、 $i\Omega = 0$  だから (宿題 67)、

$$\dot{X}(t) = - \int_0^t M(t-t') X(t') dt' + R(t) \quad (24)$$

#### (4) マルコフ近似

簡単のため 1 変数で考える。もし、仮定 2a を満たしていると、

$$\int_0^t M(t-t') X(t') dt' \simeq X(t) \int_0^t M(t-t') dt' \quad (25)$$

つまり、仮定 2a は、 $X(t)$  の時間変化は、 $M(t)$  に比べて遅い事を示している。 $\tau = t - t'$  として、

$$= X(t) \int_0^t M(\tau) d\tau \quad (26)$$

仮定 2b から

$$\simeq X(t) \int_0^\infty M(\tau) d\tau = \gamma X(t) \quad (27)$$

ここで、

$$\gamma = \int_0^\infty M(\tau) d\tau \quad (28)$$

つまり、ランジュバン方程式 (3) が導けた。

また、この  $\gamma$  の形から 第 2 種揺動散逸定理 (2ndFDT) も証明できる。それを見るために、まず線形ランジュバン方程式 (3) 式の 2ndFDT を導く。線形ランジュバン方程式の平衡分布は、 $P_{\text{eq}}(x) \propto \exp[-x^2/(2\langle X^2 \rangle)]$  だから、 $S(x) = \ln P_{\text{eq}}(x)$  で、

$$S(x) = -\frac{x^2}{2\langle X^2 \rangle} + \text{定数} \quad \frac{dS(x)}{dx} = -\frac{x}{\langle X^2 \rangle} \quad (29)$$

だから  $\gamma = L/\langle X^2 \rangle$  とすると、(3) 式は、 $\dot{X}(t) = LdS(x)/dx + R(t)$  の形にかける。2ndFDT によると、 $L = D/2$  だから、

$$\gamma = \frac{D}{2\langle X^2 \rangle} \quad (30)$$

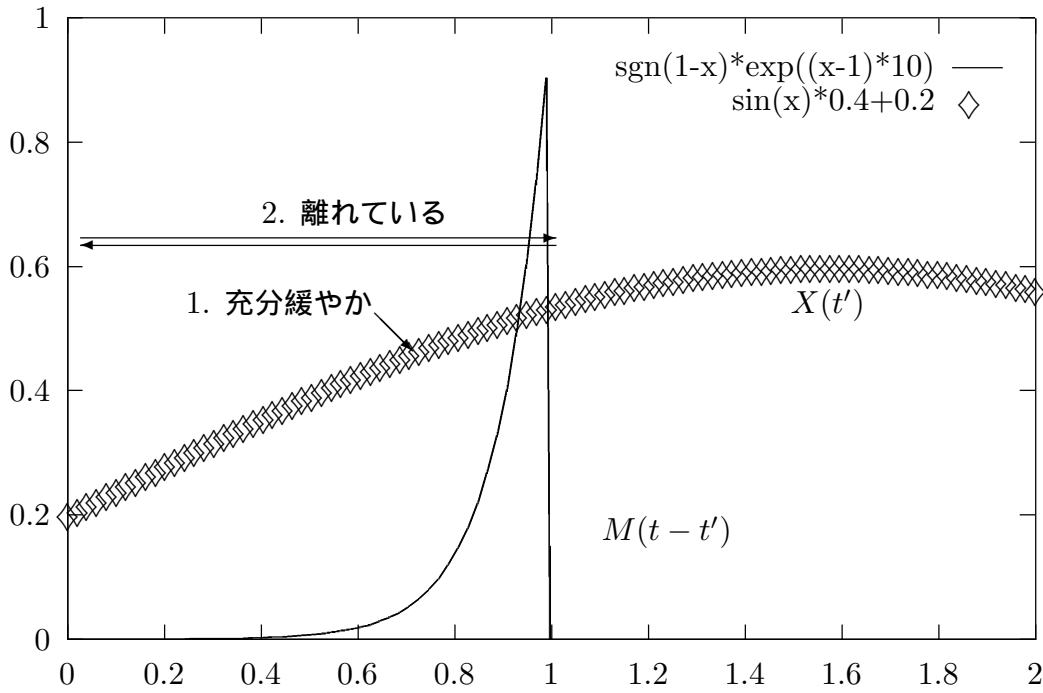


図1 マルコフ近似:記憶関数  $M(t)$  と、 $X(t)$

一方、射影演算子の方法では、(23) 式から  $M(t) = \langle R(t)R \rangle \langle X^2 \rangle^{-1}$  だから、(28) 式に代入して

$$\gamma = \int_0^\infty \langle R(t)R \rangle \langle X^2 \rangle^{-1} dt = \frac{D}{2\langle X^2 \rangle} \quad (31)$$

付録: 射影演算子の定義 (4) 式に何故  $(XX^{-1})_{\mu\nu}$  がつくのか。

簡単のため  $N$  次元のベクトル空間を考える ( $N$  は有限)。  $n$  個の独立のベクトル  $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_n$  を使うと、任意のベクトル  $\mathbf{A}$  は、

$$\mathbf{A} = a_1\mathbf{X}_1 + a_2\mathbf{X}_2 + \dots + a_n\mathbf{X}_n + \mathbf{Y} \quad (32)$$

というように必ず書ける。ただし、 $\mathbf{Y}$  は、 $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_n$  の全てのベクトルと直交している。

例  $N = 3$ 、 $\mathbf{X}_1 = \mathbf{e}_x$ 、 $\mathbf{X}_2 = \mathbf{e}_y$  の時 (正規直交系)、

$$\mathbf{A} = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{e}_x)\mathbf{e}_x + (\mathbf{A} \cdot \mathbf{e}_y)\mathbf{e}_y + (\mathbf{A} \cdot \mathbf{e}_z)\mathbf{e}_z \quad (33)$$

ここで、 $\mathbf{Y} = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{e}_z)\mathbf{e}_z$  である。

(32) 式のように書いたとき、射影演算子は、

$$P\mathbf{A} = a_1\mathbf{X}_1 + a_2\mathbf{X}_2 + \dots + a_n\mathbf{X}_n \quad (34)$$

となる。

この時、 $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_n$  が例と違って正規直交系でないならば、 $a_1 \dots a_n$  をどうやって決めたら良いだろうか。答えは、 $\mathbf{Y}$  に直交していて、

$$(\mathbf{x}_\mu \cdot \mathbf{X}_\nu) = \delta_{\mu\nu} \quad (35)$$

を満たす  $n$  個のベクトル  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$  があれば良い。(32) 式の両辺と  $\mathbf{x}_\mu$  との内積をとると、

$$(\mathbf{A} \cdot \mathbf{x}_\mu) = a_\mu \quad (36)$$

こうして、 $\mathbf{x}_\mu$  から、 $a_\mu$  が計算できる。

正規直交系の時は、 $\mathbf{x}_\mu = \mathbf{X}_\nu$  とすれば良いが、そうでないときは、

$$\mathbf{x}_\mu = \sum_{\nu} \mathbf{X}_\nu (XX^{-1})_{\nu\mu} \quad (37)$$

とすれば良い。ただし、 $(XX^{-1})$  は  $(\mathbf{X}_\mu \cdot \mathbf{X}_\nu)$  の逆行列である。このベクトルは、確かに  $\mathbf{Y}$  と直交しているし、

$$(\mathbf{x}_\mu \cdot \mathbf{X}_\nu) = \sum_{\lambda} (XX^{-1})_{\lambda\mu} (\mathbf{X}_\lambda \cdot \mathbf{X}_\nu) = \delta_{\mu\nu} \quad (38)$$

で、(35) 式を満たしている。

以上のことから結局、 $P\mathbf{A} = \sum_{\nu\mu} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{X}_\nu) (XX^{-1})_{\nu\mu} \mathbf{X}_\mu$  と書くことができる。

宿題:

61 (20 点)  $PA = \sum_{\mu\nu} \langle AX_\mu \rangle (XX^{-1})_{\mu\nu} X_\nu$  の時、

(a)  $P^2 = P$

(b)  $A = A(\{y_l\})$ 、 $B = B(\{y_l\})$  の時、 $P(A+B) = PA + PB$  (線形)

(c)  $P^\dagger = P$  (自己共役)

となる事を示せ。ただし、一般の演算子  $O$  の共役  $O^\dagger$  とは、

$$\langle (OA)B \rangle = \langle A(O^\dagger B) \rangle \quad (39)$$

で、定義される。

62 (20 点) 3次元のベクトル空間において、 $PA = \sum_{\nu\mu} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{X}_\nu) (XX^{-1})_{\nu\mu} \mathbf{X}_\mu$  で、 $P$  が定義されているとする。 $\mathbf{X}_1 = (1, 1, 1)$ 、 $\mathbf{X}_2 = (1, 2, 1)$  の成分を持つベクトルがつくる部分空間に、 $\mathbf{A} = (1, 3, 0)$  を射影する時、 $PA$  を求めなさい。

63 (20 点) 関数空間において、(4) 式で  $P$  が定義されているとする。ただし、 $X_1 = x$ 、 $X_2 = x^3$ 。さらに、 $\rho_{eq}(x) = (1/\sqrt{2\pi})e^{-x^2/2}$ 、すなわち、 $A = A(x)$ 、 $B = B(x)$  の時、

$$\langle AB \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} A(x)B(x)\rho_{eq}(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} A(x)B(x)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-x^2/2}dx \quad (40)$$

で内積を与える。 $A(x) = x^5$  の時、 $PA$  を求めなさい。

64 (50 点) (9) 式が、 $X(t) = e^{iLt}X(0)$  の様な形式解を持つことは、自明ではない。なぜなら、(9) 式の  $iL$  は、 $\{q_l(t), p_l(t)\}$  に作用するが、 $X(t) = e^{iLt}X(0)$  は、



$\{q_l(0), p_l(0)\}$  に作用するからである。  $X(t) = e^{iLt} X(0)$  が形式解であることを証明せよ。

65 (40 点) (16) 式を導きなさい。

66 (40 点)  $iL$  と  $Q$  の定義から (21) 式を示しなさい。ただし、  $q_l \rightarrow \pm\infty$ 、  $p_l \rightarrow \pm\infty$  で、  $\rho_{\text{eq}}(\{q_l, p_l\}) \rightarrow 0$  が仮定されているとする。

67 (30 点) 1 変数  $X(t)$  の場合は、

$$i\Omega = \langle (iLX)X \rangle \langle X^2 \rangle^{-1} = 0 \quad (41)$$

となることを示しなさい。

68 (50 点)  $X_1 = \rho(\mathbf{k}) = \sum_i e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i)}$ 、  $X_2 = \mathbf{J}(\mathbf{k}) = \sum_i \mathbf{v}_i e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i)}$  として、(14) 式の  $i\Omega_{\mu\nu}(\mu, \nu = 1, 2)$  を計算しなさい。ただし、  $\mathbf{r}_i$  と  $\mathbf{v}_i$  は  $i$  番目の粒子の位置と速度ベクトルを表す。また、  $S(k) = \langle \rho(\mathbf{k})\rho(-\mathbf{k}) \rangle / N$  を使っても良い。ここで、  $N$  は粒子の総数を表す。平均は、カノニカル集団で取れ。

69 (20 点) 射影演算子法を感染のモデルに応用しよう。格子を考えて、  $I_i(t)$ 、  $S_i(t)$  を、感染している人と、していない人の  $i$  番目のサイトの数とする。それぞれの時間変化が、

$$\frac{dI_i(t)}{dt} = f(\{I_j(t), S_i(t)\}) \quad (42)$$

$$\frac{dS_i(t)}{dt} = g(\{I_j(t), S_i(t)\}) \quad (43)$$

で与えられている時、  $X(t) = \sum_i I_j(t)$  について、射影演算子を使って、一般化されたランジュバン方程式を計算しなさい。ただし、  $f$  や  $g$  は、モデルに依存する関数で、定常分布  $\rho_{\text{eq}}(\{I_j, S_i\})$  の存在は仮定する。  $X(t)$  が非常に遅い時、マルコフ近似をするとどうなるか。