2004 年度非平衡物理学 授業ノート 9

2004.12.14 担当 吉森 明

## 3-3. 久保公式[*1]

**目標** 久保公式の導出とその仮定を理解する。具体的には以下のことを分かる。

- 久保公式はフォッカー・プランク (FP) 方程式から導ける。
- 遷移確率は、時刻 $t'$ に $x'$ だったものが時刻 $t$ に $x$ に遷移する確率を表す。
- $t > 0$ で時間変化しない外場をかけ、遷移確率を使うと、比較的簡単に導ける。
- 主な仮定は 3 つあり、その 3 つは重要。
- 久保公式は多くの現象に適応できる普遍的な関係。

**目次** (1) はじめに

(2) 準備 (遷移確率)

(3) 久保公式の導出

(4) 具体例

(5) まとめと物理的な意味

**仮定**

1. $X$ の分布は、外場をかける前は、**外場 0** の平衡状態。
2. 外場が時間変化しない時、平衡状態はカノニカル分布になる。つまり、$E(x)$ をエネルギーとすると、平衡分布は $\exp[-\beta E(x)]$ に比例する。
3. $f(t)$ を外場とすると、$E(x) = E_0(x) - xf(t)$

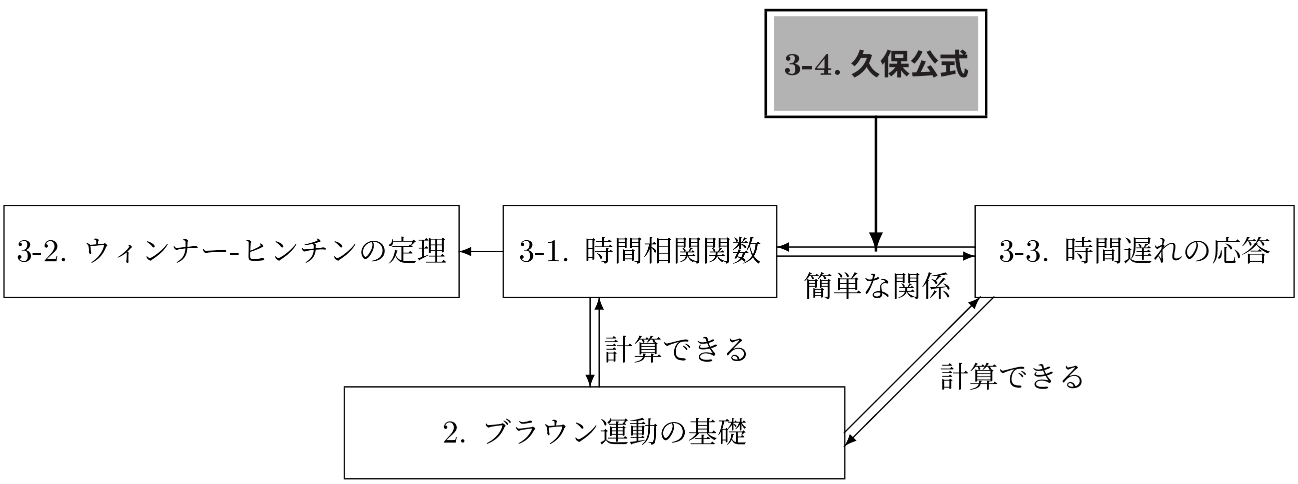
**結論** FP 方程式から

$$\text{久保公式} \qquad \alpha(t) = -\beta\langle \dot{X}(t)X(0)\rangle \tag{1}$$

が導ける。

### (1) はじめに

○ **流れ:**




[*1] 時間が無くて第 1 種揺動散逸定理は出来ないので、3-3 の標題を訂正して下さい。

○ **例: 熱雑音**

電圧が時間変化する電源 $E(t)$ を考えると、

$$q(t) = \langle Q(t) \rangle = \int_{-\infty}^{t} \alpha(t-t')E(t')dt' \tag{2}$$

§3-3 の結果から

$$\alpha(t) = \frac{1}{R}\exp[-\frac{t}{CR}] \tag{3}$$

一方、相関関数は、§3-1 の具体例から $\psi(t) = \langle Q(t)Q(0) \rangle = Ck_{\rm B}T\exp[-t/CR]$ だから、

$$\dot{\psi}(t) = -\frac{Ck_{\rm B}T}{CR}\exp[-\frac{t}{CR}] = -\frac{k_{\rm B}T}{R}\exp[-\frac{t}{CR}] \tag{4}$$

で、$\alpha(t) = -\beta\dot{\psi}(t)$ だから、(1) 式が成り立っていることがわかる。

**(2) 準備 (遷移確率)**

**①遷移確率の定義と物理的な意味**

○ 定義

**遷移確率 $T(x, x', t, t')$: 時刻 $t'$ で $X = x'$ という条件のもとで、**
**時刻 $t$ に $X = x$ となる確率**

つまり、$x'$ から $x$ に遷移する確率を表す。

○ $T(x, x', t, t')$ は、$FP$ 方程式を満たす。

$$\frac{\partial T(x, x', t, t')}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\{F(x)T(x, x', t, t')\} + \frac{D}{2}\frac{\partial^2 T(x, x', t, t')}{\partial x^2} \tag{5}$$

ただし、$t = t'$ は確定で $T(x, x', t, t) = \delta(x - x')$: 初期条件

○ 定常過程: $T(x, x', t, t') = T(x, x', t - t') \leftarrow$ 時間の差だけによる。

○ 任意の分布関数 $P(x, t)$ は、$T(x, x', t)$ で表せる。$t = 0$ の分布を $P_0(x)$ とすると、

$$\boxed{P(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} T(x, x', t)P_0(x')dx'} \tag{6}$$

は、FP 方程式も初期条件も満たす (宿題 37 参照)。

(6) 式は、$P(x, t)$ が 2 つの分布の要因があることを示している。

1. $t = 0$ で $X(0) = x'$ と確定しても、$\longrightarrow$ 時刻 $t$ では分布する: $T(x, x', t)$
2. $t = 0$ ですでに分布: $P_0(x')$

特に平衡分布 $P_{\rm eq}(x)$ は時間変化しないから、

$$\boxed{P_{\rm eq}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} T(x,x',t)P_{\rm eq}(x')dx'} \tag{7}$$

**②平均値と時間相関関数を遷移確率で表す。**

○ $\langle X(t)\rangle$ を $T(x,x',t)$ で表す。

$$\langle X(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} xP(x,t)dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \int_{-\infty}^{\infty} T(x,x',t)P_0(x')dxdx' \tag{8}$$

○ 時間相関関数 $\psi(t) \equiv \langle X(t)X(0)\rangle$

平均を 2 つに分ける。

1. $t=0$ で $X(0)=x'$ に確定しておいて (条件付き)、時刻 $t$ で平均: $\langle X(t)\rangle_{x'}$
2. $x'$ で平均

例えば、線形ランジュバン $\dot{X}(t) = -\gamma X(t) + R(t)$ を 1. で平均

$$\langle \dot{X}(t)\rangle_{x'} = -\gamma\langle X(t)\rangle_{x'} + \langle R(t)\rangle_{x'} \tag{9}$$

ランダム力は、$X(0)$ と独立に平均できるから $X(0)=x'$ と関係なく平均

$$\langle R(t)\rangle_{x'} = \langle R(t)\rangle = 0 \tag{10}$$

ゆえに $\langle \dot{X}(t)\rangle_{x'} = -\gamma\langle X(t)\rangle_{x'}$ となる。これを解くと、$\langle X(t)\rangle_{x'} = \langle X(0)\rangle_{x'}\exp[-\gamma t]$ が得られ、$\langle\cdots\rangle_{x'}$ は、$X(0)=x'$ という条件付きだから、

$$\langle X(t)\rangle_{x'} = x'\exp[-\gamma t] \tag{11}$$

つまり、**1. の平均はランダム力による平均を表す**。

$\psi(t)$ は、$x'$ をかけて $x'$ で平均

$$\langle X(t)X(0)\rangle = \langle\langle X(t)\rangle_{x'}x'\rangle = \langle x'^2\rangle e^{-\gamma t} \tag{12}$$

このように平均を 2 つに分ければ、時間相間関数を遷移確率で表すことができる。まず、1. の平均は、

$$\langle X(t)\rangle_{x'} = \int_{-\infty}^{\infty} xT(x,x',t)dx \tag{13}$$

これは、遷移確率 $T(x,x',t)$ が $X(0)=x'$ の条件の下での確率分布になっていることから分かる。

2. の平均は、$x'$ の平均だから

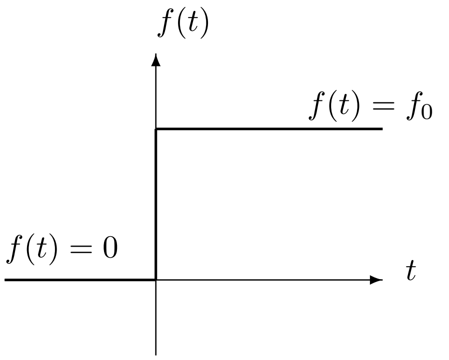
$$\langle X(t)X(0)\rangle = \langle\langle X(t)\rangle_{x'}x'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} xT(x,x',t)dxx'P_{\rm eq}(x')dx' \tag{14}$$

**(3) 久保公式の導出**

準備が出来たので、久保公式を導出する。

**③ 遷移確率の摂動展開**

**問題設定:** $\alpha(t)$ は、外場 $f(t)$ によらないので、特別な $f(t)$ で計算しても良いから、ここでは次の外場を考える。




$$f(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ f_0 & t \geq 0 \end{cases} \tag{15}$$

この外場の場合、$x(t) = \langle X(t) \rangle$ は、$f_0$ の関数になっていると考えられる。そこで、$f_0$ でテーラー展開をすると、

$$x(t) = \Psi(t) f_0 + a_2 f_0^2 + a_3 f_0^3 + \cdots \tag{16}$$

ここで、$f = 0$ で $x(t) = 0$ とし、$\alpha(t) = \dot{\Psi}(t)$ が成り立つ。

$x(t) = \langle X(t) \rangle$ は、遷移確率で表されるが、遷移確率は、$f_0$ の関数になっている。これを $T(x, x', t; f_0)$ と書くことにする。また、$\boxed{\textbf{仮定 1}}$から、$t = 0$ の確率分布は、平衡分布 $P_{\mathrm{eq}}(x')$ だから、

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x \int_{-\infty}^{\infty} T(x, x', t; f_0) P_{\mathrm{eq}}(x') dx dx' \tag{17}$$

つまり、遷移確率 $T(x, x', t; f_0)$ を $f_0$ で展開すれば良い。

---

**宿題:**

**35 (30 点)** 熱雑音の回路で電源電圧が交流の時、つまり、$E(t) = E_\omega e^{-i\omega t}$ の時、$\langle Q(t) \rangle$ の具体的な式を計算しなさい。

**36 (30 点)** 授業で説明した例以外に、線形応答の具体例を次の点にしたがって、挙げなさい。① どういう状況で、② 何の外場をかけると、③ どういう変数が、④ どう応答するか、⑤ 線形応答の式を書いて具体的に説明しなさい。また、応答に時間後れがある場合、その原因を論じなさい。

**37 (10 点)** 遷移確率 $T(x, x', t, t')$ が (5) 式を満たし、$t = t'$ で $T(x, x', t', t') = \delta(x - x')$ となる時、(6) 式で表される $P(x, t)$ が、FP 方程式を満たし、$t = t'$ で $P(x, t) = P_0(x)$ となることを示しなさい。

**38 (20 点)** 単位時間あたり $S(t)$ の割合で粒子が増える系を考える。系の中ではランジュバン方程式にしたがい、§2-2 で説明した仮定が全て成り立っているとすると、粒子の位置 $x$ についての分布関数は、

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\{F(x) P(x,t)\} + \frac{D}{2} \frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} + S(t) \tag{18}$$

にしたがって時間変化する。$t = 0$ で $P(x, 0) = 0$ の時、$P(x, t)$ を遷移確率 $T(x, x', t, t')$ で表せ。ただし、$T(x, x', t, t')$ は、(5) 式を満たし、$t = t'$ で $T(x, x', t', t') = \delta(x - x')$ となる。