2007 年度非平衡物理学 授業ノート 5

2005.10.31 担当 吉森 明

2-4. 遷移確率とブラウン運動の例 (2. のまとめ)

目標　遷移確率について定義、求め方、公式を理解する。§2. で説明した知識を具体例に応用できるようになる。具体的には以下のことを分かる。

- $X = X(t)$ が、不規則に時間変化する変数とすると、遷移確率は、時刻 t' に $X = x'$ という条件のもとで、時刻 t に X が $x \sim x + dx$ にある確率と関係している。
- 分布関数が FP 方程式にしたがえば、遷移確率も FP 方程式にしたがう。
- 分布関数は、ランダム力による分布と初期値の分布の 2 つの分布の要因があり、遷移確率は、ランダム力の分布のみを表す。

目次 (1) 遷移確率の定義と数学的な性質

(2) 2 種類の分布

(3) §2. 全体の具体例への応用

(4) まとめ

仮定 $X = X(t)$ は、ランジュバン方程式にしたがい、§2-2 の仮定をすべて満たしている。

結論 1. 遷移確率 $T(x, x', t, t')$ は、FP 方程式を満たす。

$$\frac{\partial T(x, x', t, t')}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\{F(x)T(x, x', t, t')\} + \frac{D}{2}\frac{\partial^2 T(x, x', t, t')}{\partial x^2} \tag{1}$$

ただし、$t = t'$ で $T(x, x', t, t) = \delta(x - x')$ をみたす。

2. $T(x, x', t, t') = T(x, x', t - t')$: 時間の差だけによる。

3. 任意の初期条件の分布関数 $P(x, t)$ は、$T(x, x', t)$ で表せる。$t = 0$ の分布を $P_0(x)$ とすると、

$$\boxed{P(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} T(x, x', t) P_0(x') dx'} \tag{2}$$

は、FP 方程式も初期条件も満たす。

問題 ブラウン運動で、$t = 0$ の速度が 0 だとわかっていなくて、分布が与えられたとき、$t > 0$ の速度の分布関数を求めなさい (宿題 27 参照)。

(1) 遷移確率の定義と数学的な性質

○ $X = X(t)$ が、不規則に時間変化する変数 (ランジュバン方程式にしたがう) として、

これまで、$t=0$ はいつも $X(0)$ で固定していた。しかし、$X(0)$ が分布していても、分布関数は条件を満たしていれば、FP 方程式にしたがう。

○**遷移確率の定義**: $X=X(t)$ が、不規則に時間変化する変数の時、

遷移確率 $T(x,x',t,t')$**:**	**時刻** t' **に** $X=x'$ **という条件のもとで、**
	時刻 t **に** X **が** x**〜**$x+dx$ **にある確率**
	$=T(x,x',t,t')dx$
	ただし、$t'\leq t$

つまり、x' から x に遷移する確率を表す。

○ **結論 1 の証明**

分布関数 $P(x,t)$ の定義は、「授業ノート 3」の P2 に与えられている。一方、遷移確率 $T(x,x',t,t')$ の上記の定義と比較すると、$T(x,x',t,t')$ は $P(x,t)$ で $t=t'$ の条件がついた特別なものと考えられる。つまり、$T(x,x',t,t')$ は $P(x,t)$ の集合に含まれる。一方、**仮定**を満たす X の分布関数は、過去のある時刻の関数形を指定しても FP 方程式を満たすことが分かっている。これらのことから、$T(x,x',t,t')$ **も FP 方程式を満たす。**(証明終り)

(2) 2 種類の分布

(2) 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、時刻 t では分布する: $T(x,x',t)$ (**ランダム力による分布**)
2. $t=0$ ですでに分布: $P_0(x')$ (**初期値による分布**)

特に平衡分布 P_{eq} は時間変化しないから、

$$\boxed{P_{\mathrm{eq}}(x)=\int_{-\infty}^{\infty}T(x,x',t)P_{\mathrm{eq}}(x')dx'} \tag{3}$$

(3) §2. 全体の具体例への応用

① ブラウン運動

ランジュバン方程式は、「授業ノート 2」の (7) 式、あるいは両辺を m で割って (13) 式で与えられる。FP 方程式は、「授業ノート 3」の (42) 式で与えられるが、第 2 種揺動散

逸定理を使うと、

$$\frac{\partial P(v,t)}{\partial t} = \frac{D'}{2}\frac{\partial}{\partial v}\left\{\beta m v + \frac{\partial}{\partial v}\right\}P(v,t) \tag{4}$$

とまとめられる。ここで、$D' = D/m^2$、$\beta = 1/(k_\mathrm{B}T)$ で、T を温度、k_B ボルツマン定数を表す。

遷移確率は、(4) 式から

$$T(v,v',t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma(t)}}\exp[-\frac{(v-v_0(t))^2}{2\sigma(t)}] \tag{5}$$

ここで、

$$v_0(t) = v'e^{-\gamma t} \tag{6}$$

$$\sigma(t) = \frac{k_\mathrm{B}T}{m}(1-e^{-2\gamma}) \tag{7}$$

ただし、$\gamma = \lambda/m$ とする (宿題 26 参照)。

② 熱雑音の回路

ランジュバン方程式は、「授業ノート 2」の (16) 式で与えられる。FP 方程式は、「授業ノート 3」の (43) 式で与えられるが、ブラウン運動と同様に、第 2 種揺動散逸定理を使うと、

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = \frac{D}{2}\frac{\partial}{\partial q}\left\{\frac{\beta q}{C} + \frac{\partial}{\partial q}\right\}P(q,t) \tag{8}$$

とまとめられる。

遷移確率も同様に、

$$T(q,q',t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma(t)}}\exp[-\frac{(q-q_0(t))^2}{2\sigma(t)}] \tag{9}$$

ここで、

$$q_0(t) = q'\exp[-\frac{t}{CR}] \tag{10}$$

$$\sigma(t) = \frac{k_\mathrm{B}T}{m}(1-\exp[-\frac{2t}{CR}]) \tag{11}$$

③ レーザーにトラップされたコロイド粒子 (1 次元)

ランジュバン方程式は、非線形で「授業ノート 2」の (18) 式を 1 次元に直せば良い。

FP 方程式は、「授業ノート 3」の (44) 式だが、揺動散逸定理の応用はまだ説明していない。今、平衡分布は、

$$P_{\mathrm{eq}}(x) \propto e^{-\beta u(x)} \tag{12}$$

だから、

$$\frac{dS(x)}{dx} = -\beta \frac{du(x)}{dx} \tag{13}$$

$\langle R(t)R(t')\rangle = D\delta(t-t')$ とすると、第 2 種揺動散逸定理から、

$$-\frac{1}{\lambda}\frac{du(x)}{dx} = \frac{D}{2}\left(-\beta \frac{du(x)}{dx}\right) \tag{14}$$

これは、

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{D\beta}{2} \tag{15}$$

これを使うと、他の例と同じように FP 方程式をまとめる事が出来る。

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{D}{2}\frac{\partial}{\partial x}\left\{\beta u(x) + \frac{\partial}{\partial x}\right\} P(x,t) \tag{16}$$

以上の事から、実験的に λ を測定出来る事が分かる。まず、レーザーを消して $u(x)=0$ とすれば、D を測る事が出来る。さらに温度 T を測れば、(15) 式から λ が分かる。

宿題:

22 (10 点) ランジュバン方程式で表される過程は定常過程であることを使って、P1 の**結論**2 を示しなさい。つまり、定常過程ならば $T(x,x',t,t') = T(x,x',t-t')$ となることを示しなさい。ここで、定常過程とは、時刻の原点をずらしても分布が変わらないことを言う。

23 (10 点) P1 の**結論**3 を示しなさい。つまり、(2) 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。

24 (10 点) 授業で $P(x,t)$ が 2 つの分布の要因があることを説明した (P.2 参照)。ランダム力による分布が無い場合、遷移確率はどうなるか考えなさい。つまり、変数 $X = X(t)$ が

$$\dot{X}(t) = F(X(t)) \tag{17}$$

にしたがって、時間変化するとき、(17) 式の解 $X = f(t, X_0)$ を使って、遷移確率 $T(x,x',t,t')$ を表しなさい。ただし、X_0 は初期値とする。

25 (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、(1) 式を満たし、$t = t'$ で $T(x,x',t',t') = \delta(x-x')$ となる。

26 (10 点) ブラウン運動の遷移確率 (5) 式を示しなさい。

27 (20 点) ブラウン運動の遷移確率 (5) 式を使って、

$$P_0(v) = C\exp[-\frac{v^2}{v_0^2}] \tag{19}$$

の時、具体的に (2) 式 (x を v に変えたもの) を計算して、$P(v,t)$ の具体的な形を求めなさい。また、それが (4) 式を満たすことを示しなさい。ここで、v は微粒子の速度、C は規格化定数、v_0 は適当な定数とする。さらに、$P_{\mathrm{eq}}(v)$ がマクスウェル分布のとき、(3) 式を代入して、確かめなさい。ただし、第 2 種揺動散逸定理は満たしている。

28 (10 点) レーザーをかけていないコロイド粒子の 1 次元の拡散が、

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{D}{2}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} \tag{20}$$

で表されている。ここで、x はコロイド粒子の位置、$P(x,t)$ は時刻 t の分布関数を表す。この場合の遷移確率を求めなさい。また、それを使って、

$$P_0(x) = C\exp[-\frac{x^2}{x_0^2}] \tag{21}$$

の時、具体的に (2) 式を計算して、$P(x,t)$ の具体的な形を求め、$P(x,t)$ が (20) 式を満たすことを示しなさい。ここでも前問同様、C は規格化定数、x_0 は適当な定数とする。

29 (10 点) $t < t'$ の遷移確率も同様に定義できるが、これは FP 方程式を満たさない。FP 方程式は、未来の分布関数の形を指定して、過去の $P(x,t)$ を求める事が出来ないからだ。このことは、$P(x,t)$ の時間微分の定義

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} \equiv \lim_{\Delta t\to 0}\frac{P(x,t+\Delta t) - P(x,t)}{\Delta t} \tag{22}$$

で、$\Delta t < 0$ と出来ない事と関係している。2-2. で説明した証明で $\Delta t < 0$ とするとどこに矛盾が起きるかを説明しなさい。

30 (40 点) 宿題 13 の多変数のフォッカー・プランク方程式で、$F_\mu(\{x_\mu\}) = \sum_\nu^n L_{\mu\nu}\partial S(\{x_\mu\})/\partial x_\nu$ の時、次の詳細釣合の条件

$$P_{\rm eq}(\{x_\mu\})T(\{x_\mu\},\{x'_\mu\};t) = P_{\rm eq}(\{x'_\mu\})T(\{x'_\mu\},\{x_\mu\};t) \tag{23}$$

が成り立てば、$L_{\mu\nu} = D_{\mu\nu}/2$ となることが知られている。ただし、$T(\{x_\mu\},\{x'_\mu\};t)$ は多変数の遷移確率で、初期条件

$$T(\{x_\mu\},\{x'_\mu\};0) = \prod_\mu^n \delta(x_\mu - x'_\mu) \tag{24}$$

を満たす「授業ノート 3」(52) 式の解である。ここでは、

$$S(\{x_\mu\}) = -\sum_\mu^n \frac{k_\mu}{2}x_\mu^2 \tag{25}$$

で、$\sum_{\mu'}^n L_{\mu\mu'}k_{\mu'}$ が対角化出来る時に、$L_{\mu\nu} = D_{\mu\nu}/2$ を証明しなさい。この場合は、

$$T(\{x_\mu\},\{x'_\mu\};t) = C(t)\exp[-\sum_{\mu\nu}^n \frac{1}{2}\sigma_{\mu\nu}(t)(x_\mu - x_\mu(t))(x_\nu - x_\nu(t))] \tag{26}$$

となることを使っても良い。ここで、$C(t)$ は

$$\int_{-\infty}^\infty \prod_\mu^n dx_\mu T(\{x_\mu\},\{x'_\mu\};t) = 1 \tag{27}$$

となる様決められた規格化定数、$x_\mu(t)$ は、$x_\mu(0) = x'_\mu$ を満たす平均値、$\sigma_{\mu\nu}(t)$ は、宿題 17 で計算した $t = 0$ で 0 になる分散と $\sum_{\mu'}^n \langle X_\mu(t)X_{\mu'}(t)\rangle\sigma_{\mu'\nu}(t) = \delta_{\mu\nu}$ の関係にある。