2003.7.17 担当 吉森 明

§10. ブラウン運動の微視的導出 (森の理論)

目標 閉じた系で線形ランジュバン方程式を導くことにより、**ランダム力の正体を理解**すること。具体的には以下のことを分かる。

- 射影演算子はベクトルを部分空間に射影する演算子。
- 森理論は、射影演算子を使って、ニュートン方程式から一般化されたランジュバン方程式を導く厳密な理論。
- 導出の詳細は、射影演算子を使って、$\dot{X}_\mu(t)$ を $\{X_\mu(t)\}$ に比例する部分とそれ以外に分け、最終的には3つの部分にする。
- 3つの部分は、$\{X_\mu(t)\}$ に比例する項、過去の $\{X_\mu(t')\}$ に比例する項とランダム力となる。
- 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。その時、第2種揺動散逸定理も証明できる。
- ランダム力は注目している自由度以外からの寄与で、分布は、その自由度が初期分布しているために起こる。

目次

仮定

1. ある複数の物理量 $X_\mu(\mu = 1, 2, \ldots)$ 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。

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

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

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

が**厳密に**導出できる。

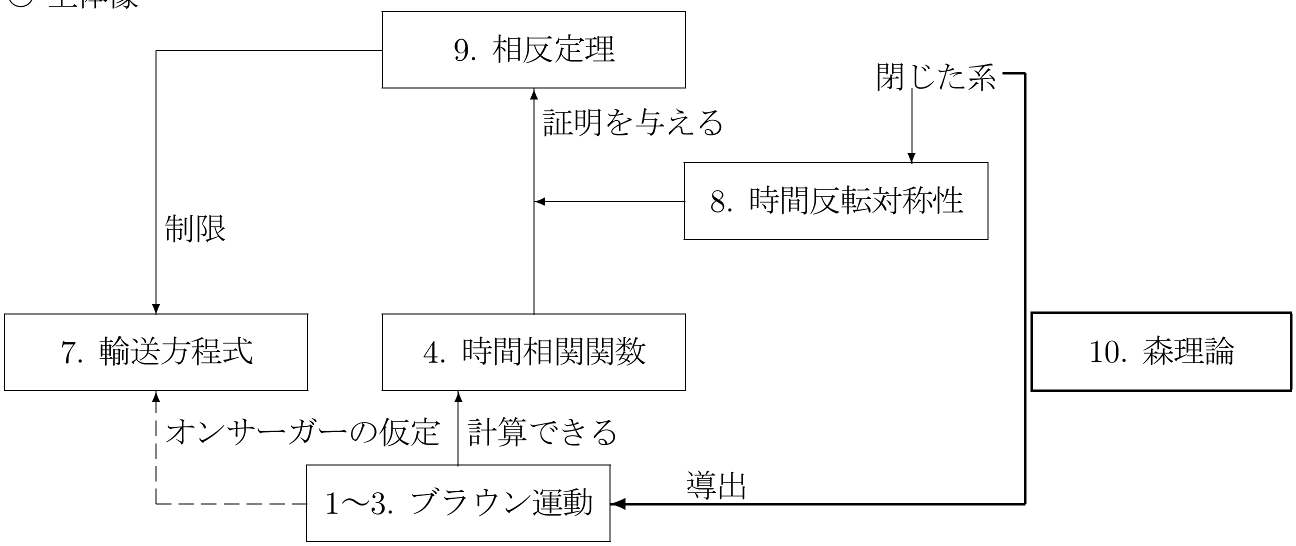
2. **仮定**2から、線形ランジュバン方程式(1変数)

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

が**近似的に**導出できる。

(1) 全体像と流れ

○ 全体像



○ 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

○ **射影演算子の定義**

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

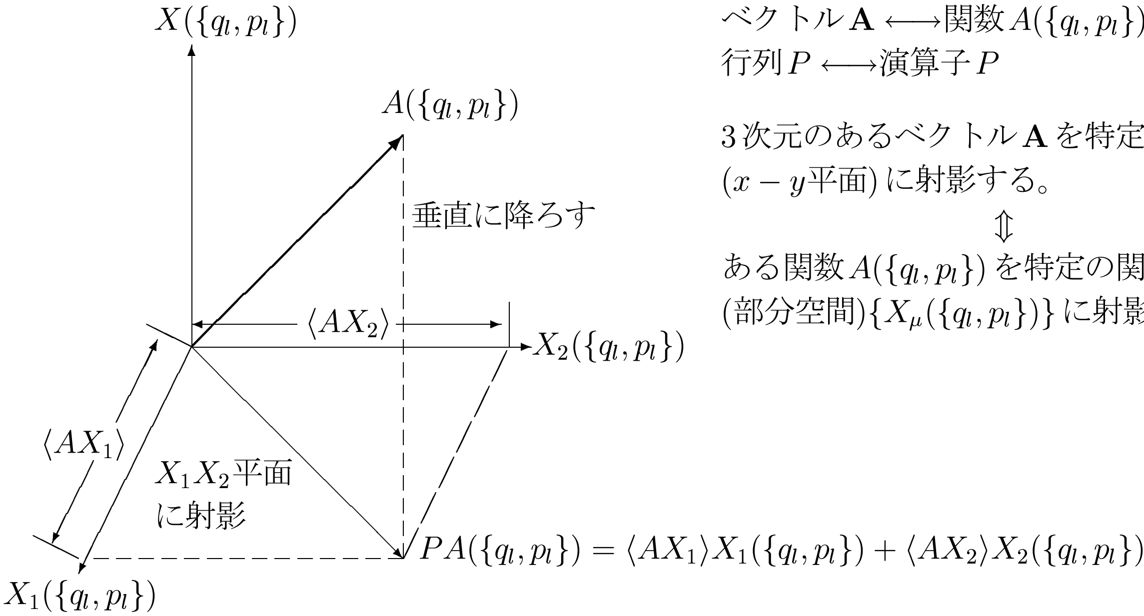
ただし、$(XX^{-1})_{\mu\nu}$は、$\langle X_\mu X_\nu \rangle$の逆行列。この逆行列がなぜ付くかは付録参照。また、

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

この射影演算子は、宿題56の様な性質を持っている。

○ 関数空間への射影

ヒルベルト空間 (関数空間) で $X_1(\{q_l,p_l\})$ と $X_2(\{q_l,p_l\})$ が正規直交系をなすとすると、



ベクトル $\mathbf{A} \longleftrightarrow$ 関数 $A(\{q_l,p_l\})$
行列 $P \longleftrightarrow$ 演算子 P

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

$\Updownarrow$

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。

(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、$A(t) = A(\{q_l(t),p_l(t)\})$ の時間発展を考える。チェーンルールを使うと、

$$\frac{dA(\{q_l(t),p_l(t)\})}{dt} = \sum_l \left\{ \dot{q}_l(t)\frac{\partial A(\{q_l(t),p_l(t)\})}{\partial q_l(t)} + \dot{p}_l(t)\frac{\partial A(\{q_l(t),p_l(t)\})}{\partial p_l(t)} \right\} \tag{6}$$

だから、

$$iL \equiv \sum_l \left\{ \dot{q}_l(t)\frac{\partial}{\partial q_l(t)} + \dot{p}_l(t)\frac{\partial}{\partial p_l(t)} \right\} \tag{7}$$

とすると、

$$\frac{dA(t)}{dt} = iLA(t) \tag{8}$$

と書ける。iL は、**リウヴィル演算子**と呼ばれる。(8) 式は、形式的に解くことができ、

$$A(t) = e^{iLt}A(0) \tag{9}$$

(宿題 59)。また、これ以後面倒なので、$A(0)$ を A と書く。今、$A(t)$ として、$\dot{X}(t)$ をとると、

$$\dot{X}(t) = iLX(t) = iLe^{iLt}X \tag{10}$$

これが出発点になる。

○ 導出の流れ

$$\dot{X}_\mu(t) = \underbrace{iLe^{iLt}}_{\text{交換可}} X_\mu = e^{iLt}\ \underbrace{iLX_\mu}_{\text{わける}}$$

$$\boxed{e^{iLt}PiLX_\mu} + \boxed{\underbrace{e^{iLt}}_{\text{ここだけ}} QiLX_\mu}$$

↓

さらにわける

$$\underbrace{-\sum_\nu \int_0^t M_{\mu\nu}(t-t')X_\nu(t')dt'}_{X_\nu(t')\text{に比例}} + \underbrace{R_\mu(t)}_{\text{それ以外}}$$

○ **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。

$$e^{tiL}iLX_\mu = e^{tiL}PiLX_\mu + e^{tiL}QiLX_\mu \tag{11}$$

① (11) 式の1項目:

$$PiLX_\mu = \sum_{\nu\lambda} \langle (iLX_\mu)X_\nu \rangle (XX^{-1})_{\nu\lambda} X_\lambda = \sum_\nu i\Omega_{\mu\nu} X_\nu \tag{12}$$

ここで、

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

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

$$e^{tiL}PiLX_\mu = e^{tiL}\sum_\nu i\Omega_{\mu\nu}X_\nu = \sum_\nu i\Omega_{\mu\nu}e^{tiL}X_\nu = \sum_\nu i\Omega_{\mu\nu}X_\nu(t) \tag{14}$$

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

$$e^{tiL} = \int_0^t e^{t'iL}PiLe^{(t-t')QiL}dt' + e^{tQiL} \tag{15}$$

(宿題60参照)。ここで、PiL と QiL は交換しないから、単純に、$e^{iLt} = e^{QiLt}e^{PiLt}$ **とはならない**事に注意しなさい。これを使って、

$$e^{tiL}QiLX_\mu = \int_0^t e^{t'iL}PiLe^{(t-t')QiL}QiLX_\mu dt' + e^{tQiL}QiLX_\mu \tag{16}$$

②-1

今、$\boxed{R_\mu(t) \equiv e^{tQiL}QiLX_\mu}$ とすると、(16) 式の右辺2項目は、$R_\mu(t)$ となる。

②-2

1項目は、計算すると (宿題61参照)

$$\int_0^t e^{t'iL}PiLe^{(t-t')QiL}QiLX_\mu dt' = -\int_0^t \sum_\nu M_{\mu\nu}(t-t')X_\nu(t')dt' \tag{17}$$

となることが分かる。ここで

$$M_{\mu\nu}(t) = \sum_\lambda \langle R_\mu(t)R_\lambda \rangle (XX^{-1})_{\lambda\nu} \tag{18}$$

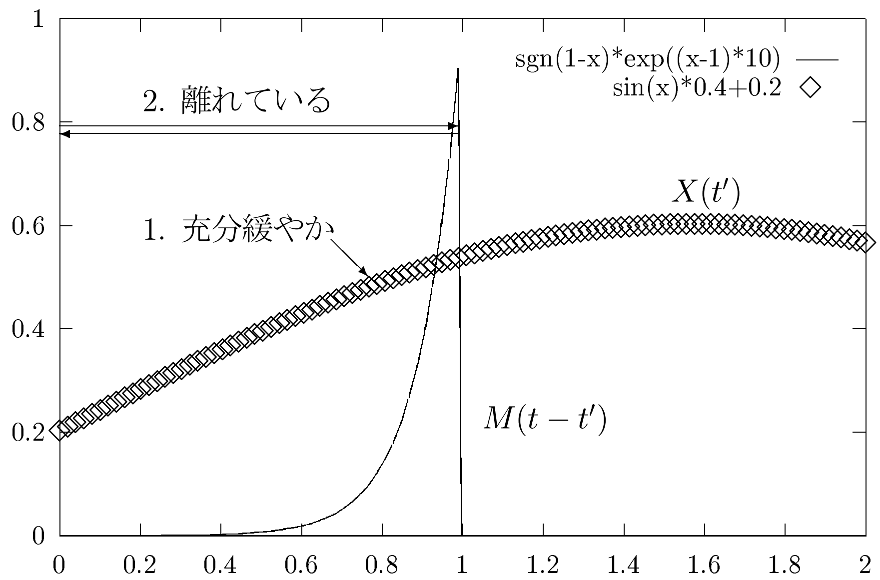


図 1: マルコフ近似:記憶関数 $M(t)$ と、$X(t)$

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62)、

$$\dot{X} = -\int_0^t M(t-t')X(t')dt' + R(t) \tag{19}$$

(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、

$$\int_0^t M(t-t')X(t')dt' \simeq X(t)\int_0^t M(t-t')dt' \tag{20}$$

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、

$$= X(t)\int_0^t M(\tau)d\tau \tag{21}$$

仮定 2bから

$$\simeq X(t)\int_0^\infty M(\tau)d\tau = \gamma X(t) \tag{22}$$

ここで、$\gamma = \int_0^\infty M(\tau)d\tau$。つまり、ランジュバン方程式 (3) が導けた。また、$M(t) = \langle R(t)R\rangle\langle X^2\rangle^{-1}$ だから、

$$\gamma = \int_0^\infty \langle R(t)R\rangle\langle X^2\rangle^{-1}dt = \frac{D}{2\langle X^2\rangle} \tag{23}$$

これは、第 2 種揺動散逸定理に他ならない (授業ノート 8 の (20) 式参照)。

(5) 具体例

レーザーにトラップされたブラウン粒子

○ $i\Omega_{\mu\nu}$ の計算

$$i\Omega_{11} = i\Omega_{22} = 0 \tag{24}$$
$$i\Omega_{12} = 1 \tag{25}$$
$$i\Omega_{21} = -\frac{k}{M} \tag{26}$$

(宿題64)。つまり、

$$\dot{X} = V_x - \sum_\nu \gamma_{1\nu} X_\nu + R_1(t) \tag{27}$$

$$\dot{V}_x = -\frac{k}{M} X - \sum_\nu \gamma_{2\nu} X_\nu + R_2(t) \tag{28}$$

○ $R_\mu(0)$ の計算

$R_\mu(t)$ を一般に計算するのは難しいので、$R_\mu(0) = QiLX_\mu$を計算する。

$$iLX_1 = iLX = V_x, \qquad iLX_2 = iLV_x = -\frac{k}{M} X - \frac{F}{M} \tag{29}$$

また、恒等式、$QX_\mu = 0$ を使えば、

$$R_1(0) = QiLX_1 = QX_2 = 0 \tag{30}$$

$$R_2(0) = QiLX_2 = -\frac{1}{M} QF = -\frac{F}{M} \tag{31}$$

(宿題64)。$R_1(0) = 0$ と第2種揺動散逸定理から$\gamma_{11} = \gamma_{12} = \gamma_{21} = 0$(宿題64)。

○ 結局

$$\dot{X} = V_x \tag{32}$$

$$M\dot{V}_x = -kX - M\gamma_{22} V_x + MR_2(t) \tag{33}$$

ここで、$MR_2(t)$ はランダム力で $MR_2(0) = F$: 水分子からの力。

(7) まとめ

閉じた系: ニュートン方程式

$$\dot{X}_\mu(t) = \underbrace{e^{iLt} iLX_\mu}$$

$\boxed{\{X_\mu\}\text{ に比例する部分+それ以外}}$

↓

$\sum_\nu i\Omega_{\mu\nu} X_\nu(t)$

時間発展 e^{iLt}

↓

$\boxed{\{X_\mu\}\text{ に比例+それ以外}}$

↓ ↓

記憶項 ランダム力 $R_\mu(t)$

$\underline{\sum_\nu \int_0^t M_{\mu\nu}(t-t') X_\nu(t') dt'}$

以前の時間の $X_\mu(t')$ に比例

一般化されたランジュバン方程式(**厳密**)

↓ マルコフ近似

ランジュバン方程式

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 $\mathbf{X}_1, \ldots, \mathbf{X}_n$を使うと、任意のベクトル $\mathbf{A}$ は、

$$\mathbf{A} = a_1 \mathbf{X}_1 + a_2 \mathbf{X}_2 + \cdots + a_n \mathbf{X}_n + \mathbf{Y} \tag{34}$$

というように必ず書ける。ただし、$\mathbf{Y}$は、$\mathbf{X}_1, \ldots, \mathbf{X}_n$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)、

$$\mathbf{A}=(\mathbf{A}\cdot\mathbf{e}_x)\mathbf{e}_x+(\mathbf{A}\cdot\mathbf{e}_y)\mathbf{e}_y+(\mathbf{A}\cdot\mathbf{e}_z)\mathbf{e}_z \tag{35}$$

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

(34) 式の様に書いたとき、射影演算子は、

$$P\mathbf{A}=a_1\mathbf{X}_1+a_2\mathbf{X}_2+\cdots+a_n\mathbf{X}_n \tag{36}$$

となる。

この時、$\mathbf{X}_1,\ldots,\mathbf{X}_n$が例と違って正規直交系でないならば、$a_1\ldots a_n$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、

$$(\mathbf{x}_\mu\cdot\mathbf{X}_\nu)=\delta_{\mu\nu} \tag{37}$$

を満たすn個のベクトル$\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_n$があれば良い。(34) 式の両辺と$\mathbf{x}_\mu$との内積をとると、

$$(\mathbf{A}\cdot\mathbf{x}_\mu)=a_\mu \tag{38}$$

こうして、$\mathbf{x}_\mu$から、a_μ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、

$$\mathbf{x}_\mu=\sum_\nu\mathbf{X}_\nu(XX^{-1})_{\nu\mu} \tag{39}$$

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、

$$(\mathbf{x}_\mu\cdot\mathbf{X}_\nu)=\sum_\lambda(XX^{-1})_{\lambda\mu}(\mathbf{X}_\lambda\cdot\mathbf{X}_\nu)=\delta_{\mu\nu} \tag{40}$$

で、(37) 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:

56(30 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、

$$\langle(OA)B\rangle=\langle A(O^\dagger B)\rangle \tag{41}$$

で、定義される。

57(20 点) 3次元のベクトル空間において、$P\mathbf{A}=\sum_{\nu\mu}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{X}_\nu)(XX^{-1})_{\nu\mu}\mathbf{X}_\mu$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、$P\mathbf{A}$を求めなさい。

58(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、

$$\langle AB \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} A(x)B(x)\rho_{eq}(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} A(x)B(x)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-x^2/2}dx \tag{42}$$

で内積を与える。$A(x) = x^5$の時、PAを求めなさい。

59(40 点) (8) 式が、$A(t) = e^{iLt}A(0)$ の様な形式解を持つことは、自明ではない。なぜなら、(8) 式のiLは、$\{q_l(t), p_l(t)\}$ に作用するが、$A(t) = e^{iLt}A(0)$ は、$\{q_l(0), p_l(0)\}$ に作用するからである。$A(t) = e^{iLt}A(0)$ が形式解であることを証明せよ。

60(30 点) (15) 式を導きなさい。

61(30 点) (17) 式を次の手順で導け。

(a) $R_\mu(t)$ の定義とPの定義式 (4) を使って、

$$\int_0^t e^{t'iL}PiLe^{(t-t')QiL}QiLX_\mu dt' = \int_0^t \sum_{\mu\lambda}\langle[iLR_\mu(t-t')]X_\nu\rangle(XX^{-1})_{\nu\lambda}X_\lambda(t')dt' \tag{43}$$

を示しなさい。

(b) iLの定義から

$$\langle[iLR_\mu(t)]X_\nu\rangle = -\langle R_\mu(t)[iLX_\nu]\rangle \tag{44}$$

を示しなさい。ただし、$q_l \to \pm\infty$、$p_l \to \pm\infty$ で、$\rho\mathrm{eq}(\{q_l, p_l\}) \to 0$ が仮定されているとする。

(c)

$$\langle R_\mu(t)[iLX_\nu]\rangle = \langle R_\mu(t)[QiLX_\nu]\rangle = \langle R_\mu(t)R_\nu\rangle \tag{45}$$

を示し、それから、(17) 式を得よ。

62(20 点) 1変数$X(t)$ の場合は、

$$i\Omega = \langle(iLX)X\rangle\langle X^2\rangle^{-1} = 0 \tag{46}$$

となることを示しなさい。

63(40 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、(13) 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。

64(20 点) レーザーで補足されているブラウン粒子が、運動方程式

$$M\dot{V}_x = -kX - F(\{\mathbf{r}_l - \mathbf{R}\}) \tag{47}$$

に従うものとする。ここで、V_xは、ブラウン粒子の速度のx成分、Mは、ブラウン粒子の質量を表す。$-kX$は、レーザーから受ける力、$F(\{\mathbf{r}_l - \mathbf{R}\})$ は、水分子から受ける力で、$\mathbf{r}_l$と$\mathbf{R}$は水分子とブラウン粒子の位置を表す。これに森理論を応用すると、(32) 式と (33) 式になることを示せ。