2002.5.8 担当 吉森 明

§2. ブラウン運動の基礎II(フォッカー・プランク(FP)方程式)

(2) ランジュバン方程式からの導出(補足)

○ $P(x,t) = \langle h(x,t;\{R(t_i)\})\rangle$ のまとめ

今、1つのランダム力の時系列 $\{R(t_i)\}$ を考える。ここで、$\{R(t_i)\}$ は、$\{R(t_1), R(t_2), R(t_3), \ldots\}$ の意味で、§1で使ったように $\{R_i(t)\} = \{R_1(t), R_2(t), R_3(t), \ldots\}$ の意味ではない。つまり、サンプルを止めて時間変化を考えている。また、時刻は t_i と書いているが、これは分かり易いためで、特に離散かしているわけでなく、時刻は連続。

1つの $\{R(t_i)\}$ に1つの $X(t)$ が対応する。また、別の $\{R'(t_i)\}$ には、別の $X'(t)$ が対応するので、$X(t)$ は、t だけでなく、$\{R'(t_i)\}$ の関数と考えられる[1]。つまり、

$$X(t) = X(t, \{R(t_i)\}) \tag{1}$$

ただし、$t_i < t$ が成り立つ。

ここで、次の関数[2] $h(x,t;\{R(t_i)\})$ を定義する。

$$\boxed{h(x,t;\{R(t_i)\}) \equiv \delta(x - X(t, \{R(t_i)\}))} \tag{2}$$

○ $h(x,t;\{R(t_i)\})$ は、ランダム力の時系列 $\{R(t_i)\}$ を1つ決めると、決まるので、測定した回数だけ得られる。したがって、たくさん測定して全サンプルで足し合わせたものを、x から $x+\Delta x$ まで積分すると、時刻 t で、X が x〜$x+\Delta x$ になった測定の回数が得られる。つまり、全測定の回数を N とすると、

$$X\text{が } x\sim x+\Delta x \text{ だった測定の回数} = \int_x^{x+\Delta x} \sum_{n=1}^{N} h(x',t;\{R_n(t_i)\})dx' \tag{3}$$

X が x〜$x+\Delta x$ である確率は、これを N で割れば良いから、

$$X\text{が } x\sim x+\Delta x \text{ の確率} = \frac{1}{N}\sum_n^N \int_x^{x+\Delta x} h(x',t;\{R_n(t_i)\})dx' = \langle \int_x^{x+\Delta x} h(x',t;\{R(t_i)\})dx' \rangle \tag{4}$$

$P(x,t)$ は、$\Delta x \to 0$ にした極限で定義されるから、$\Delta x \to 0$ とすると、右辺は、$\langle h(x',t;\{R(t_i)\})\rangle \Delta x$ となる。したがって、結局

$$\boxed{P(x,t) = \langle h(x,t;\{R(t_i)\})\rangle} \tag{5}$$

[1] 時刻は連続なので、厳密には汎関数。

[2] これも汎関数。

§3. ブラウン運動の基礎III (第2種揺動散逸定理)

目標 第2種揺動散逸定理(2nd FDT)の理解。つまり、ランジュバン方程式の$F(X)$とDに関係が付く事を理解する。具体的には以下のことを分かる。

- 第2種揺動散逸定理(2nd FDT)は、平衡解が分かっている時、そこからくるFP方程式の制限
- 結論の具体的な形。(結論参照)
- 第2種揺動散逸定理(2nd FDT)をブラウン運動に応用するとアインシュタインの関係式が、熱雑音の回路に応用するとナイキストの定理が得られる。

目次 (1) はじめに
(2) 第2種揺動散逸定理(2nd FDT)の導出
(3) 具体例
(4) まとめ

仮定 ランジュバン方程式

$$\dot{X}(t) = F(X(t)) + R(t) \tag{6}$$
$$\langle R(t)\rangle = 0 \tag{7}$$
$$\langle R(t)R(t')\rangle = D\delta(t-t') \tag{8}$$

が、FP方程式と等価である条件を満たしている。かつ、**FP方程式の平衡解$P_{\mathrm{eq}}(x) = e^{S(x)}$が分かっている。**

結論

$$F(x) = \frac{D}{2}\frac{dS(x)}{dx} \tag{9}$$

特に$F(x) = LdS(x)/dx$と書ける時、

$$L = \frac{D}{2} \tag{10}$$

(2) 第2種揺動散逸定理の導出

$P(x,t)$は分布関数なので、確率が保存することから、連続の式

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x,t)}{\partial x} \tag{11}$$

を満たす。ここで流れ$J(x)$はFP方程式から

$$J(x,t) = -\{-F(x) + \frac{D}{2}\frac{\partial}{\partial x}\}P(x,t) \tag{12}$$

で与えられる。

今、**平衡解**$P_{\mathrm{eq}}(x)$**が分かっている**とする(仮定参照)。ここで、平衡解とは、

$$\frac{\partial P_{\mathrm{eq}}(x)}{\partial t} = 0 \tag{13}$$

だけでなく、系が閉じているという条件

$$x \to \pm\infty \qquad J(x) = -\{-F(x) + \frac{D}{2}\frac{\partial}{\partial x}\}P_{\mathrm{eq}}(x) = 0 \tag{14}$$

を満たす。

(11) 式と (13) 式から

$$\frac{\partial P_{\mathrm{eq}}(x)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x)}{\partial x} = 0 \tag{15}$$

積分すると、

$$J(x) = C \tag{16}$$

ところが、$x \to \pm\infty$ で、$J(x) = 0$ だから $C = 0$。

$P_{\mathrm{eq}}(x) = e^{S(x)}$ とする。ただし、$S(x) \equiv \ln P_{\mathrm{eq}}(x)$。これを、(12) 式に代入

$$J(x) = -\{-F(x) + \frac{D}{2}\frac{\partial}{\partial x}\}P_{\mathrm{eq}}(x) = -\{-F(x) + \frac{D}{2}\frac{dS(x)}{dx}\}P_{\mathrm{eq}}(x) = 0 \tag{17}$$

つまり

$$\boxed{F(x) = \frac{D}{2}\frac{dS(x)}{dx}} \tag{18}$$

$F(x)$ の形が $S(x)$ により、完全に与えられる。

特に $F(x) = LdS(x)/dx$ と書ける時、つまり、$\dot{X} = LdS(x)/dx + R(t)$ の時

$$\boxed{L = \frac{D}{2}} \tag{19}$$

これが、第 2 種揺動散逸定理 (FDT) である。

(3) 具体例

① 微粒子

$P_{\mathrm{eq}}(v)$ はボルツマン分布になるので、$S(v) = -(m/2k_BT)v^2 + \ln\sqrt{k_BT/2\pi m}$。一方、ランジュバン方程式は、

$$\dot{V}(t) = -\gamma V(t) + R'(t) \tag{20}$$

ここで、

$$R'(t) = \frac{R(t)}{m} \tag{21}$$

$$\langle R'(t)R'(t')\rangle = D'\delta(t-t') \tag{22}$$

$$D' = \frac{D}{m^2} \tag{23}$$

$dS(v)/dv = -(m/k_BT)v$ だから、

$$\dot{V}(t) = -\gamma\frac{k_BT}{m}\frac{dS(V)}{dV} + R'(t) = -L\frac{dS(V)}{dV} + R'(t) \tag{24}$$

とすると、

$$L = \gamma\frac{k_BT}{m} \tag{25}$$

第2種揺動散逸定理から、

$$\gamma\frac{k_BT}{m} = \frac{D'}{2} = \frac{D}{2m^2} \tag{26}$$

$\gamma = \lambda/m$ だから、

$$\boxed{\lambda k_BT = \frac{D}{2}} \tag{27}$$

これは、アインシュタインの関係式と呼ばれる。

②熱雑音の回路

$P_{\rm eq}(q) \propto e^{-\beta E(q)}$(証明略)。ここで、$\beta = 1/(k_BT)$。$E(q)$ は q の電荷を持っているコンデサーの自由エネルギーで、

$$E(q) = \frac{q^2}{C}\text{だから} \qquad \frac{dS(q)}{dq} = -\frac{\beta}{C}q \tag{28}$$

一方ランジュバン方程式は、

$$\dot{Q}(t) = -\frac{Q(t)}{CR} + R(t) = \frac{1}{CR}\frac{C}{\beta}\frac{dS(Q)}{dQ(t)} + R(t) \tag{29}$$

だから、$L = 1/(R\beta)$。第2種揺動散逸定理から、

$$\frac{1}{R\beta} = \frac{D'}{2} \tag{30}$$

ここで、$\langle R(t)R(t')\rangle = D\delta(t-t')$ とした。$R(t) = V(t)/R$、$\langle V(t)V(t')\rangle = D_V\delta(t-t')$ とすると、

$$D = \frac{D_V}{R^2} \qquad \text{ゆえに } \frac{k_BT}{R} = \frac{D_V}{2R^2} \qquad \boxed{2Rk_BT = D_V} \tag{31}$$

これは、ナイキストの定理と呼ばれる。

宿題の訂正: 問題2に間違えがありました。申し訳ありません。

2(20点) 誤 ただし、$V(t)$ は微粒子の速度、m は質量で、$R(t)$ はランダム力を表し、(4) 式と (5) 式の線形の条件を満たす。
正 ただし、$V(t)$ は微粒子の速度、m は質量で、$R(t)$ はランダム力を表し、(3) 式と (4) 式、および (5) 式の線形の条件を満たす。

宿題:

7(20点) 授業(4月24日)では不規則な運動として、次の2点の性質を挙げた。

1. 軌道がガタガタしている。(いたるところ微分不能)
2. 同じ初期条件から始めても違う運動。つまり予測できない。

今、2次元上の粒子の運動を考える。軌道がガタガタしていても、毎回まったく同じ軌道を描き、ただし、速度が毎回違う運動は、上の2つの性質を満たす。しかし、この運動は規則的な感じがしてしまう[3]。この不都合を解消するよう、不規則な運動の妥当な定義を考えなさい。

8(20点) ランジュバン方程式からFP方程式を導くには、(8)が重要だが、もしこれを

$$\langle R(t)R(t')\rangle = \begin{cases} D & t=t' \\ 0 & t\neq t' \end{cases} \tag{32}$$

に変えると、どんな式が導けるか。ただし、後の条件はまったく同じとする。

9(20点) 次の多成分のランジュバン方程式

$$\dot{\mathbf{S}} = \gamma\mathbf{S}\times\mathbf{H} - \mathbf{\Gamma}(\mathbf{S}-\mathbf{S}_0) + \mathbf{R}(t) \tag{33}$$

を考える。$\mathbf{S}(t)$のすべての成分が、$\mathbf{R}(t')$のすべての成分と、それぞれ$t<t'$で独立で、ランダム力$\mathbf{R}(t)$は

$$\langle R_\alpha(t)\rangle = 0 \tag{34}$$

$$\langle R_\alpha(t)R_\beta(t')\rangle = D\delta_{\alpha\beta}\delta(t-t') \tag{35}$$

を満たしガウス過程だとする。ここで、$R_\alpha(t)$は、$\mathbf{R}(t)$のα番目の成分($\alpha=x,y,z$)。この時、FP方程式

$$\frac{\partial P(\mathbf{s},t)}{\partial t} = \left\{-\frac{\partial}{\partial\mathbf{s}}\gamma\mathbf{s}\times\mathbf{H} + \frac{\partial}{\partial\mathbf{s}}\mathbf{\Gamma}(\mathbf{s}-\mathbf{S}_0) + \frac{\partial^2}{\partial\mathbf{s}^2}\frac{D}{2}\right\}P(\mathbf{s},t) \tag{36}$$

を導きなさい。ただし、$s=|\mathbf{s}|$で、

$$\frac{\partial}{\partial\mathbf{s}} = \frac{\mathbf{e}_\theta}{s}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\mathbf{e}_\phi}{s\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{37}$$

θ、ϕは、$\mathbf{s}=s\mathbf{e}_r$とした時の極座標で、$\mathbf{e}_r,\mathbf{e}_\theta,\mathbf{e}_\phi$は、単位ベクトルを示す。

10(20点) 第2種揺動散逸定理を満たしている次のFP方程式

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\{-\frac{D}{2}\frac{dS(x)}{dx} + \frac{D}{2}\frac{\partial}{\partial x}\}P(x,t) \tag{38}$$

で、$x\to\pm\infty$で$\partial P(x,t)/\partial x=0$の時、

$$G(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\{P(x,t)\ln(P(x,t)/e) - S(x)P(x,t)\} \tag{39}$$

の時間微分が常に負か0($dG(t)/dt\le 0$)になる事を示せ。また、$dG(t)/dt=0$になるのが、

$$P(x) = e^{S(x)} \tag{40}$$

の時だけである事を示して、(38)式を満たす任意の$P(x,t)$は、$t\to\infty$で、(40)式になる事を証明しなさい。

[3]これは、基礎粒子専攻の永末勇治さんの指摘です。(www参照のこと) どうも有り難う御座いました。

11(20点) ポテンシャル$U(x,a)$の上で運動するブラウン粒子は、$S(x) = -\beta U(x,a)$とおく事が出来る。ただし、aはポテンシャルを制御するパラメータで、$\beta = 1/k_B T$である。この場合、$k_B T G(t)$は、ヘルムホルツの自由エネルギーと解釈する事が出来る。aを時間変化させて、$a = a(t)$とした時、次の熱力学的な関係式

$$\int_{t_i}^{t_f} \langle \frac{\partial U(x,a)}{\partial a} \rangle \dot{a}(t) dt \geq k_B T \{G(t_f) - G(t_i)\} \tag{41}$$

を問題7の結果を使って、証明せよ。ただし、

$$\langle \frac{\partial U(x,a)}{\partial a} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x,t) \frac{\partial U(x,a)}{\partial a} \tag{42}$$

左辺は、$a(t_i)$から$a(t_f)$に変化させるのに必要な仕事と解釈されるので、(41)式は、この仕事が自由エネルギーの変化と同じか、それより大きくなるという、最小仕事の原理を表している。

12(20点) 水中の花粉の微粒子の運動が以下のランジュバン方程式に従う場合を考えよう。

$$\dot{x} = v \tag{43}$$

$$m\dot{v} = -\gamma v + R(t) \tag{44}$$

ここで、ランダム力は、$\langle R(t) \rangle = 0$、$\langle R(t)R(t') \rangle = D\delta(t-t')$を満たす。この時、$\gamma$が十分大きければ、(44)式の左辺の慣性項は、無視できて、

$$-\gamma v + R(t) = 0 \tag{45}$$

と出来るので、これをvについて解いて、(43)式に代入すると、

$$\dot{x} = \frac{R(t)}{\gamma} \tag{46}$$

この式を新たにランジュバン方程式とみなす事が出来る。この時、第2種揺動散逸定理をがどうなっているかを論じなさい。