2006 年度非平衡物理学 授業ノート 3

2006.10.18 担当 吉森 明

## 2-2. フォッカー・プランク (FP) 方程式

**目標** FP 方程式の導出における仮定を理解し、ランジュバン方程式から FP 方程式を自分でたてれるようにする。具体的には以下のことを分かる。

- 分布関数 $P(x,t)$ は時刻 $t$ に $X$ が $x \sim x+dx$ にある確率と関係し、FP 方程式は、その時間変化を表す。
- $X(t)$ がランジュバン方程式を満たす時、任意関数 $f(x)$ を $t$ でテーラー展開すると、1 次のオーダーまでに $x$ に関する **2 階微分**が含まれる。
- FP 方程式は下の仮定 1、2、3 を満たした時ランジュバン方程式から導ける。
- ランジュバン方程式が与えられた時の FP 方程式の形。

**目次** (1) 分布関数と FP 方程式

(2) ランジュバン方程式からの導出のポイント

(3) ランジュバン方程式からの導出の詳細

(4) 具体例

(5) まとめ

**仮定**

1. $X(t)$ と $R(t')$ が $t < t'$ で統計的に独立。
2. $\langle R(t)\rangle = 0, \langle R(t)R(t')\rangle = D\delta(t-t')$
3. $R(t)$ がガウス過程。
4. (余分) 考えている領域は無限で、$P(x,t)$ を分布関数とすると、
   $x \to \pm\infty$ で、$P(x,t) \to 0, \partial P(x,t)/\partial x \to 0$

**結論** 非線形ランジュバン方程式

$$\dot{X}(t) = F(X(t)) + R(t) \tag{1}$$

と FP 方程式

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

は、等価。

**問題** (2-2 が終わった段階で解ける様になる問題。宿題ではない。) ブラウン運動で、微粒子の速度分布の時間変化を表す式をたてなさい。

参考文献: 宗像豊哲著「物理統計学」朝倉書店

## (1) 分布関数と FP 方程式

○ 不規則に変化する変数 $X$ に対して、

| |
|---|
| 分布関数 $P(x,t)$: |
| 時刻 $t$ に $X$ が $x$〜$x+dx$ にある確率 $= P(x,t)dx$ |

FP 方程式は、$P(x,t)$ の時間変化を与える式。

○ 平均

任意関数 $f(X)$ の平均 $\langle f(X)\rangle$ は、

$$\langle f(X)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)P(x,t)dx \tag{3}$$

これは、$P(x,t)$ の定義から、測定ごとにランダム力で平均するのと同じになる。

## (2) ランジュバン方程式からの導出のポイント

○ 非線形ランジュバン方程式 (1) 式を $t$ から $t+\Delta t$ 間で積分する (差分化)。$\Delta t$ が充分小さい時、

$$\Delta X(t) = F(X(t))\Delta t + \Delta W \tag{4}$$

ここで、 $\Delta X(t) \equiv X(t+\Delta t) - X(t)$ および、

$$\Delta W \equiv \int_t^{t+\Delta t} R(t_1)dt_1 \tag{5}$$

とした。$\Delta W$ については、**仮定**2 から

$$\langle \Delta W\rangle = 0 \tag{6}$$

$$\boxed{\left\langle \Delta W^2\right\rangle = D\Delta t} \tag{7}$$

(7) 式は、次のように示せる。

$$\left\langle \Delta W^2\right\rangle = \left\langle \int_t^{t+\Delta t} R(t_1)dt_1 \int_t^{t+\Delta t} R(t_2)dt_2 \right\rangle \tag{8}$$

$$= \int_t^{t+\Delta t}\int_t^{t+\Delta t} \langle R(t_1)R(t_2)\rangle\, dt_1dt_2 \tag{9}$$

**仮定**2 の $\langle R(t)R(t')\rangle = D\delta(t-t')$ から

$$= \int_t^{t+\Delta t}\int_t^{t+\Delta t} D\delta(t_1-t_2)dt_1dt_2 \tag{10}$$

$$= \int_t^{t+\Delta t} Ddt_2 = D\Delta t \tag{11}$$

○ $f(x)$ を任意関数にして、$f(X(t+\Delta t))$ をテーラー展開する。まず $\Delta X(t)$ について展開する。

$$f(X(t+\Delta t)) = f(X(t)) + \left.\frac{df}{dX}\right|_{X=X(t)} \Delta X(t) + \frac{1}{2} \left.\frac{d^2 f}{dX^2}\right|_{X=X(t)} \Delta X(t)^2 + \dots \quad (12)$$

(4) 式を代入すると、

$$\begin{aligned} f(X(t+\Delta t)) = f(X(t)) &+ \left.\frac{df}{dX}\right|_{X=X(t)} \{F(X(t))\Delta t + \Delta W\} \\ &+ \frac{1}{2} \left.\frac{d^2 f}{dX^2}\right|_{X=X(t)} \{F(X(t))\Delta t + \Delta W\}^2 + \Delta X \text{ の 3 次以上の項} \end{aligned} \quad (13)$$

両辺の**平均**を考える。

$$\begin{aligned} \langle f(X(t+\Delta t))\rangle = \langle f(X(t))\rangle &+ \left\langle \left.\frac{df}{dX}\right|_{X=X(t)} \{F(X(t))\Delta t + \Delta W\} \right\rangle \\ &+ \frac{1}{2} \left\langle \left.\frac{d^2 f}{dX^2}\right|_{X=X(t)} \{F(X(t))\Delta t + \Delta W\}^2 \right\rangle + \langle \Delta X \text{ の 3 次以上の項 } \rangle \end{aligned} \quad (14)$$

○ $\Delta t$ **のオーダーでも** (14) **式の右辺に** $d^2 f/dx^2$ **が残ることを示す。**

怪しいのは、右辺 3 項目から出る $\Delta W^2$ の項、つまり

$$\left\langle \frac{1}{2} \left.\frac{d^2 f}{dX^2}\right|_{X=X(t)} \Delta W^2 \right\rangle \quad (15)$$

$\Delta W \equiv \int_t^{t+\Delta t} R(t_1) dt_1$ だから、$\Delta W$ の中にある $R(t_1)$ の時間は、$t_1 \geq t$ となる。その時、**仮定**1 が使えて[*1]、

$$\left\langle \frac{1}{2} \left.\frac{d^2 f}{dX^2}\right|_{X=X(t)} \Delta W^2 \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2} \left.\frac{d^2 f}{dX^2}\right|_{X=X(t)} \right\rangle \langle \Delta W^2 \rangle \quad (16)$$

(7) 式から

$$= \left\langle \frac{1}{2} \left.\frac{d^2 f}{dX^2}\right|_{X=X(t)} \right\rangle D\Delta t \quad (17)$$

---

[*1] $t_1 = t$ が問題になるが、「被積分関数が発散しない 1 点を積分範囲から除いても、積分の値は変わらない」という積分の性質を使えば、(16) 式が成り立つのがわかる。

これは、$\Delta t$ **のオーダーになっている。**

### (3) ランジュバン方程式からの導出の詳細

### ①平均値の方程式

(14) の他の項を計算する。

まず、右辺の 2 項目は、

$$\left\langle \left.\frac{df}{dX}\right|_{X=X(t)} \{F(X(t))\Delta t + \Delta W\} \right\rangle = \left\langle \left.\frac{df}{dX}\right|_{X=X(t)} F(X(t))\Delta t \right\rangle + \left\langle \left.\frac{df}{dX}\right|_{X=X(t)} \Delta W \right\rangle \tag{18}$$

(18) 式の右辺 2 項目は、(16) 式と同様に**仮定 1** から、

$$\left\langle \left.\frac{df}{dX}\right|_{X=X(t)} \Delta W \right\rangle = \left\langle \left.\frac{df}{dX}\right|_{X=X(t)} \right\rangle \langle \Delta W \rangle = 0 \tag{19}$$

次に (14) 式の右辺 3 項目は、(17) 式を使えば、簡単な計算で

$$\frac{1}{2}\left\langle \left.\frac{d^2 f}{dX^2}\right|_{X=X(t)} \{F(X(t))\Delta t + \Delta W\}^2 \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2} \left.\frac{d^2 f}{dX^2}\right|_{X=X(t)} F(X(t))^2 \Delta t^2 \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} \left.\frac{d^2 f}{dX^2}\right|_{X=X(t)} \right\rangle D\Delta t \tag{20}$$

結局

$$\begin{aligned}\langle f(X(t+\Delta t))\rangle &= \langle f(X(t))\rangle + \left\langle \left.\frac{df}{dX}\right|_{X=X(t)} F(X(t))\Delta t \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} \left.\frac{d^2 f}{dX^2}\right|_{X=X(t)} F(X(t))^2 \Delta t^2 \right\rangle \\ &\quad + \left\langle \frac{1}{2} \left.\frac{d^2 f}{dX^2}\right|_{X=X(t)} \right\rangle D\Delta t + \langle \Delta X \text{ の 3 次以上の項 } \rangle\end{aligned} \tag{21}$$

ここで、**仮定 3** を使う。$R(t)$ がガウス過程というのは、ここでは $\Delta W$ が**ガウス分布**をしているのと等価になっている。したがって、$n \geq 3$ の時 $\langle \Delta W^n \rangle$ は $\Delta t^2$ 以上が示せる。$\Delta X$ の 3 次の項は、$\Delta t^k \Delta W^{n-k}, n \geq 3, k \leq n$ に比例するので、結局、

$$\langle \Delta X \text{ の 3 次以上の項 } \rangle \propto \Delta t^2 \text{以上} \tag{22}$$

となる。したがって、

$$\frac{d}{dt}\langle f(X(t))\rangle \equiv \lim_{\Delta t\to 0}\frac{f(X(t+\Delta t))-f(X(t))}{\Delta t} \tag{23}$$

$$= \left\langle \frac{df}{dX}F(X(t))\right\rangle + \frac{D}{2}\left\langle \frac{d^2 f}{dX^2}\right\rangle \tag{24}$$

$f=f(X)$ の微分は、微分した後に $X=X(t)$ を代入する。(24) 式は、任意関数 $f(X)$ の**平均値の方程式**を表している。

### ② FP 方程式

平均値は、分布関数を使い、

$$\langle f(X(t))\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)P(x,t)dx \tag{25}$$

と表せる。したがって、

$$\frac{d}{dt}\langle f(X(t))\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}dx \tag{26}$$

また、(24) 式の右辺も分布関数で表せて、1 項目は、

$$\left\langle \frac{df}{dX}F(X(t))\right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{df}{dx}F(x)P(x,t)dx \tag{27}$$

だから、**部分積分**すると、

$$\left\langle \frac{df}{dX}F(X(t))\right\rangle = [f(x)F(x)P(x,t)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\frac{\partial}{\partial x}\{F(x)P(x,t)\}dx \tag{28}$$

**仮定** 4 から、

$$\left\langle \frac{df}{dX}F(X(t))\right\rangle = -\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\frac{\partial}{\partial x}\{F(x)P(x,t)\}dx \tag{29}$$

平均値の方程式の 2 項目は、

$$\frac{D}{2}\left\langle \frac{d^2 f}{dX^2}\right\rangle = \frac{D}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^2 f}{dx^2}P(x,t)dx \tag{30}$$

これも**部分積分**すると、

$$= \frac{D}{2}\left[\frac{df}{dx}P(x,t)\right]_{-\infty}^{\infty} - \frac{D}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{df}{dx}\frac{\partial}{\partial x}P(x,t)dx \tag{31}$$

**仮定** 4 から、

$$= -\frac{D}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{df}{dx}\frac{\partial}{\partial x}P(x,t)dx \tag{32}$$

もう 1 度**部分積分**

$$= -\frac{D}{2}\left[f(x)\frac{\partial P(x,t)}{\partial x}\right]_{-\infty}^{\infty} + \frac{D}{2}\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2}dx \tag{33}$$

**仮定** 4

$$= \frac{D}{2}\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2}dx \tag{34}$$

結局

$$\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}dx = -\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\frac{\partial}{\partial x}\{F(x)P(x,t)\}dx + \frac{D}{2}\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2}dx \tag{35}$$

これが、任意の $f(x)$ で成り立つためには、

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\{F(x)P(x,t)\} + \frac{D}{2}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} \tag{36}$$

これは、FP 方程式。

### (4) 具体例

① ブラウン粒子 (問題参照)

ランジュバン方程式は、線形で $m\dot{V}(t) = -\lambda V(t) + R(t)$ だから、$X = V$ で、$\gamma = \lambda/m$ とすると、$F(V) = -\gamma V$ となる。$\langle R(t)R(t')\rangle = D\delta(t-t')$ の時、仮定がすべて満たされているとすると、FP 方程式は、

$$\frac{\partial P(v,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v}\{\gamma v P(v,t)\} + \frac{D'}{2}\frac{\partial^2 P(v,t)}{\partial v^2} \tag{37}$$

ここで、$D' = D/m^2$ とした。

② 熱雑音の回路

この場合もランジュバン方程式は、線形で $R\dot{Q}(t) = -Q(t)/C + V(t)$ だから、$X = Q$ で、$F(Q) = -Q/CR$ となる。$\langle V(t)V(t')\rangle = D_V\delta(t-t')$ の時、仮定がすべて満たされているとすると、FP 方程式は、

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial q}\left\{\frac{q}{CR}P(q,t)\right\} + \frac{D}{2}\frac{\partial^2 P(q,t)}{\partial q^2} \tag{38}$$

ここで、$D = D_V/R^2$ とした。

---

**宿題:**

**5 (10 点)** 前回の授業で、ランダム力 $R(t)$ は撃力になることを説明した。つまり無限大の力がパルス状に働くと考えられる。そこで、$d_i$ と $t_i$ を $i$ 番目のパルスの力積の大きさと作用する時間とすると、ランダム力は、$R(t) = \sum_i d_i \delta(t - t_i)$ で表せる。ただし、$d_i$ も $t_i$ も確率的に分布する。今、$d_i$ について、$\langle d_i \rangle = 0$、$\langle d_i d_j \rangle = \delta_{ij}$ を仮定し、$t_i$ は、単位時間あたりパルスの数が平均で $n$ 個の一様分布とし、さらに、$d_i$ と $t_i$ は独立だとすれば、**仮定**2 が導けることを示しなさい。

**6 (10 点)** 授業で扱った例以外に、ランジュバン方程式で記述できる現象を一つ以上探し、**ランジュバン方程式を書いて説明しなさい**。その場合のランダム力の実態は何か。ただし、ここで言うランジュンバン方程式は、「授業ノート 2」の**仮定**に書いてある式を指す。

**7 (10 点)** ランダム力についての仮定 2 のかわりに、

$$\langle R(t)R(t')\rangle = \begin{cases} D & t = t' \\ 0 & t \neq t' \end{cases} \tag{39}$$

の時、FP 方程式はどうなるか考えなさい。ただし、後の条件はまったく同じとする。

**8 (15 点)** 伊藤積分について調べてレポートにしなさい。定義と性質は何か。

**9 (10 点)** FP 方程式の導出で授業では、考える範囲を $-\infty$ から $\infty$ とした。これを 0 から $L$ までにして周期境界条件 $P(x,t) = P(x+L,t)$ を考える。$f(x) = x$ とした時、平均値の方程式から FP 方程式 (2) が導けるか答えなさい。もし、導けない時は、その物理的な理由を論じなさい。ただし、$F(x)$ は周期境界条件 $F(x) = F(x+L)$ を満たす。

**10 (5 点)** 宿題 6 で挙げたランジュバン方程式に対応した FP 方程式を書き下せ。

**11 (20 点)** $\gamma = \lambda/m$ が充分に大きい 3 次元のブラウン運動は、

$$\dot{\mathbf{X}}(t) = \mathbf{R}(t) \tag{40}$$

のように書ける。ここで、$\mathbf{X}(t)$ は、ブラウン粒子の位置ベクトルを表す。今、次の 4 つの仮定:①$\mathbf{X}(t)$ は $\mathbf{R}(t')$ と $t < t'$ で独立、②ベクトル $\mathbf{R}(t)$ の成分を $R_x(t), R_y(t), R_z(t)$ と書くと、$\langle R_\alpha(t)\rangle = 0$、$\langle R_\alpha(t) R_{\beta(t')}\rangle = D\delta_{\alpha\beta}\delta(t-t')$、 ③$\mathbf{R}(t)$ はガウス過程、④$\mathbf{x} \to \pm\infty$ で、

$$P(\mathbf{x}, t) \to 0, \qquad \frac{\partial P(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}} \to 0 \tag{41}$$

を満たす時、 FP 方程式を導いたのと同じように拡散方程式

$$\frac{\partial P(\mathbf{X}, t)}{\partial t} = \frac{D}{2} \nabla^2 P(\mathbf{X}, t) \tag{42}$$

を導きなさい。また、この拡散方程式の解を、$t = 0$ で $P(\mathbf{X}, 0) = \delta(\mathbf{X})$ の初期条件で求めなさい。それを使って、時刻 $t$ に微粒子が $r \sim r + \Delta r$ だけ動く確率を求めなさい。ただし、$r = |\mathbf{X}|$ で、$\Delta r$ は充分小さいとする。