2006 年度非平衡物理学 授業ノート 5

2005.11.1 担当 吉森 明

2-4. 遷移確率

目標　遷移確率について、定義、物理的な意味、数学的な性質を理解する。具体的には以下のことを分かる。

- 遷移確率は、時刻 t' に x' という条件のもので、時刻 t に x に遷移する確率を表す。
- 遷移確率は、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) 定義と物理的な意味

(2) 数学的な性質

(3) まとめ

仮定　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。

結論　1. $T(x, x', t, t') = T(x, x', t - t')$ ← 時間の差だけによる。

2. 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 21 参照)

(1) 定義と物理的な意味

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' 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。

(2) 数学的な性質

結論の証明は、宿題 19 を参照すること。ここでは、 (2) 式の物理的な意味を議論する。
(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 $P_{\mathrm{eq}}(x)$ は時間変化しないから、

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

宿題:

18 (15 点) 変数が 2 個以上ある時 $(\{x_1,x_2,\ldots,x_n\}=\{x_\mu\})$、フォッカー・プランク方程式が次の様に書けるとする。

$$\frac{\partial P(\{x_\mu\},t)}{\partial t}=-\sum_{\mu}^{n}\frac{\partial J_\mu(\{x_\mu\},t)}{\partial x_\mu} \tag{4}$$

$$J_\mu(\{x_\mu\},t)=-\left\{-F_\mu(\{x_\mu\})+\sum_{\nu}^{n}\frac{D_{\mu\nu}}{2}\frac{\partial}{\partial x_\nu}\right\}P(\{x_\mu\},t) \tag{5}$$

$P_{\mathrm{eq}}(\{x_\mu\})=e^{S(\{x_\mu\})}$ の時、$S(\{x_\mu\})$ と $F_\mu(\{x_\mu\})$ の関係を求めなさい。ただし、$P_{\mathrm{eq}}(\{x_\mu\})$ は、フォッカー・プランク方程式の平衡解で、(5) 式に代入すると、$\sum_\mu^n \partial J(\{x_\mu\})/\partial x_\mu=0$、$x_\mu\to\pm\infty$ で $J(\{x_\mu\})=0$ を満たす。
また、$F_\mu(\{x_\mu\})=\sum_\nu^n L_{\mu\nu}\partial S(\{x_\mu\})/\partial x_\nu$ の場合に、任意の $S(\{x_\mu\})$ で成り立つためには、$L_{\mu\nu}$ と $D_{\mu\nu}$ の間にどんな関係が必要か導きなさい。

19 (5 点) P1 の**結論**1、2 を示しなさい。つまり、遷移確率 $T(x,x',t,t')$ が (1) 式を満たし、$t=t'$ で $T(x,x',t',t')=\delta(x-x')$ となる時、$T(x,x',t,t')=T(x,x',t-t')$ および、(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。

20 (10 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、

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\{F(x)P(x,t)\} + \frac{D}{2}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} + S(t) \tag{6}$$

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。

21 (15 点) ブラウン運動のランジュバン方程式で、遷移確率を文献で調べ求めなさい。それを使って、

$$P_0(v) = C\exp[-\frac{v^2}{v_0^2}] \tag{7}$$

の時、具体的に (2) 式 (x を v に変えたもの) を計算して、$P(v,t)$ がブラウン運動の FP 方程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。また、$P_{\rm eq}(v)$ 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。使った文献は明記しなさい。

22 (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、

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{D}{2}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} \tag{8}$$

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、

$$P_0(v) = C\exp[-\frac{x^2}{x_0^2}] \tag{9}$$

の時、具体的に (2) 式を計算して、$P(x,t)$ が (8) 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。

23 (30 点) 宿題 18 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

$$P_{\rm eq}(\{x_\mu\})T(\{x_\mu\},\{x'_\mu\};t) = P_{\rm eq}(\{x'_\mu\})T(\{x'_\mu\},\{x_\mu\};t) \tag{10}$$

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

$$T(\{x_\mu\},\{x'_\mu\};0) = \prod_\mu^n \delta(x_\mu - x'_\mu) \tag{11}$$

を満たす (4) 式の解である。ここでは、

$$S(\{x_\mu\}) = -\sum_\mu^n \frac{k_\mu}{2} x_\mu^2 \tag{12}$$

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、

$$T(\{x_\mu\}, \{x'_\mu\}; t) = C(t) \exp[-\sum_{\mu\nu}^n \frac{1}{2} \sigma_{\mu\nu}(t)(x_\mu - x_\mu(t))(x_\nu - x_\nu(t))] \tag{13}$$

となることを使っても良い。ここで、$C(t)$ は

$$\int_{-\infty}^{\infty} \prod_\mu^n dx_\mu T(\{x_\mu\}, \{x'_\mu\}; t) = 1 \tag{14}$$

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。