外場駆動される粒子の非線形ランジュバン方程式の数値的決定と有効温度の検討

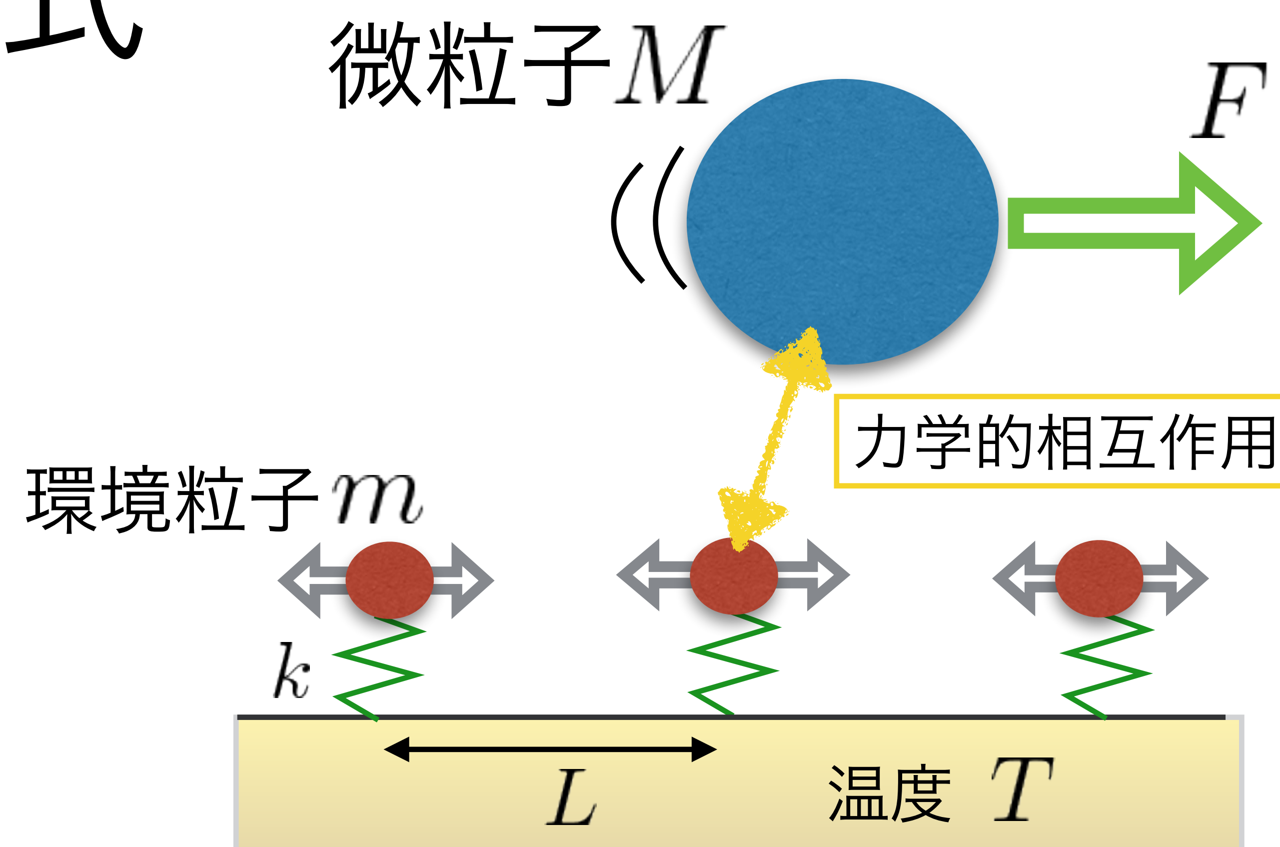
茨城大学大学院
青柳　達也　中川　尚子

研究の目的

ブラウン運動する微粒子の運動から、
非線形ランジュバン方程式
を数値的に決定する。

得られた非線形ランジュバン方程式を用いて
有効温度(非平衡系での温度)について検討する。

モデルと運動方程式



微粒子 M

$$M\ddot{X} = -\underbrace{\frac{\partial H_{int}}{\partial X}}_{}+F$$

環境粒子mとの
相互作用

$$H_{int} = \cos\left(\frac{2\pi}{L}(X-x)\right)$$

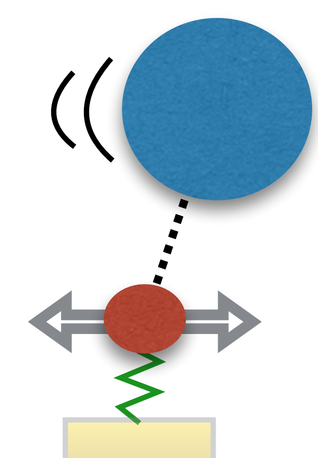
環境粒子 m

$$m\ddot{x} = \underbrace{-\gamma'\dot{x}+\sqrt{2\gamma' k_B T}\xi(t)} - kx - \underbrace{\frac{\partial H_{int}}{\partial x}}$$

温度 T で熱運動する

微粒子Mとの
相互作用

γ' 環境粒子の粘性抵抗
$\langle \xi(t)\xi(t')\rangle = \delta(t-t')$
$\langle \xi(t)\rangle = 0$

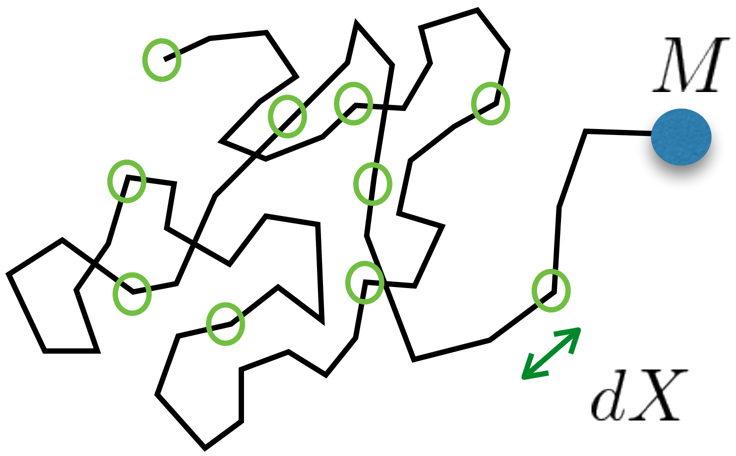


2体の相互作用に
簡略化

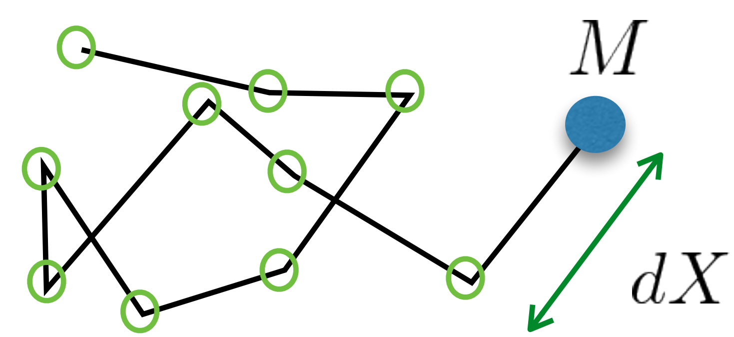
粗視化

質量 $m \ll M$ → M の運動は、
m の運動と比べて非常に遅い

観測時間間隔を長くする　微粒子 M の動く時間スケールでみる



粗視化



観測時間間隔 dt　　$V = \dfrac{dX}{dt}$

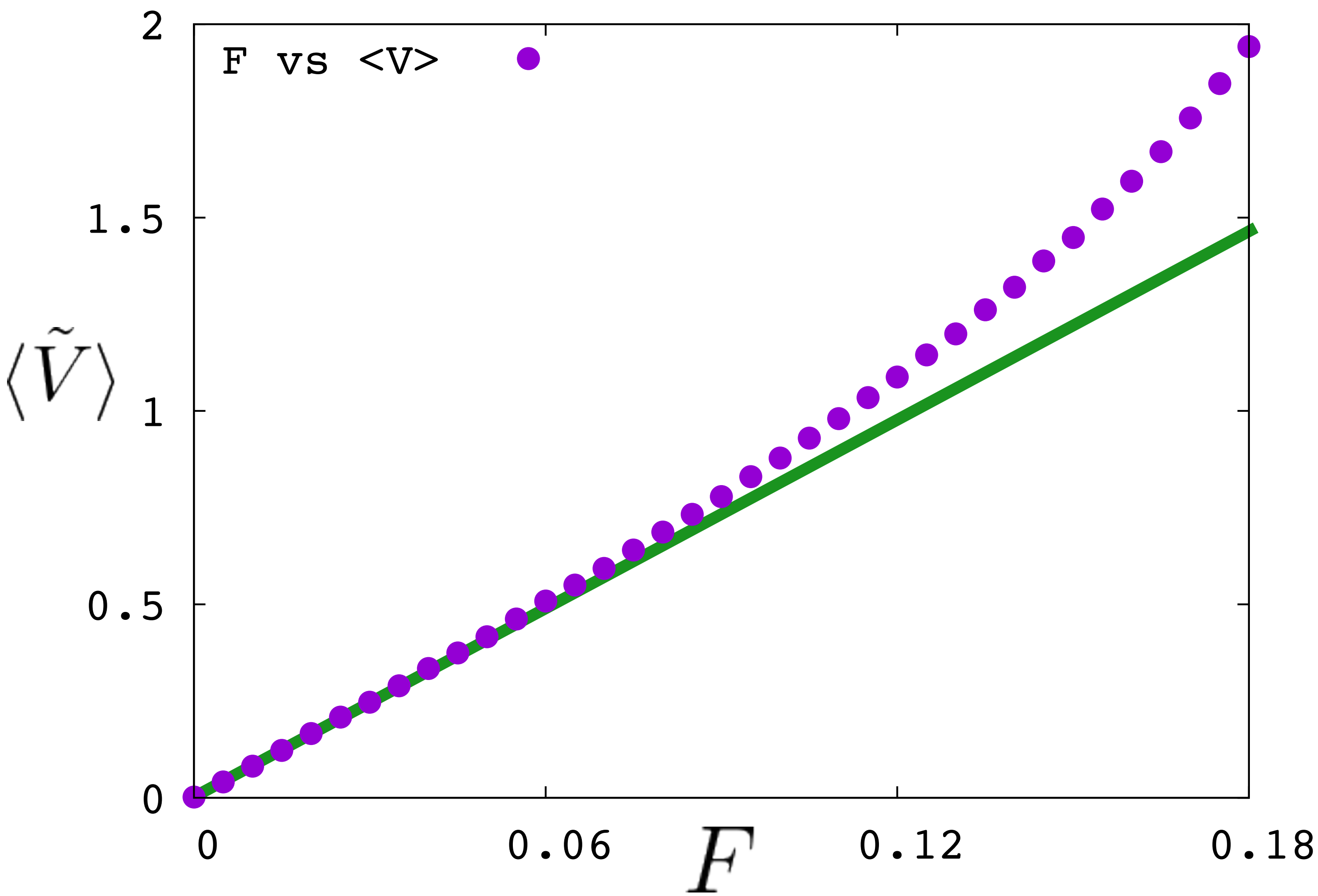
観測時間間隔 ds　　$\tilde{V} := \dfrac{dX}{ds}$

$$M\ddot{X} = -\frac{\partial H_{int}}{\partial X} + F$$

$$M\dot{\tilde{V}} = F \underbrace{- \gamma(\tilde{V})\tilde{V}}_{\text{抵抗力}} + \underbrace{\sqrt{D(\tilde{V})}\xi(s)}_{\text{揺動力}}$$

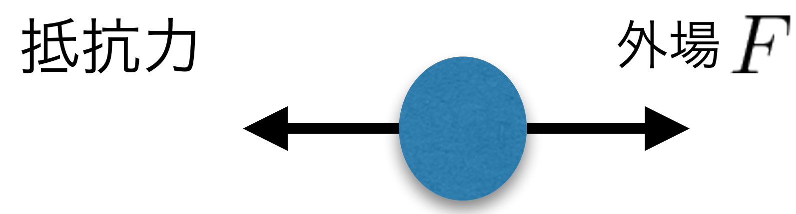
①抵抗力　②揺動力　はどう決めればよい？

①抵抗係数$\gamma(\tilde{V})$の決定法



微粒子を外場Fで駆動

定常状態



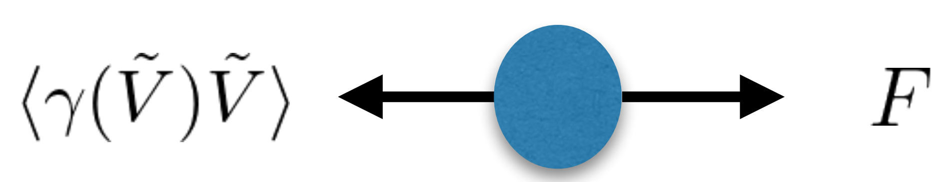
外場Fと抵抗力がつりあっている

γ は$\tilde{V}$のべき関数になっていると仮定

$$\gamma(\tilde{V}) = \gamma_0 + \gamma_1 \tilde{V} + \gamma_2 \tilde{V}^2 + \gamma_3 \tilde{V}^3 + \cdots$$

力のつりあいの式

$$F = \langle \gamma(\tilde{V}) \tilde{V} \rangle$$



①抵抗係数$\gamma(V)$の決定法

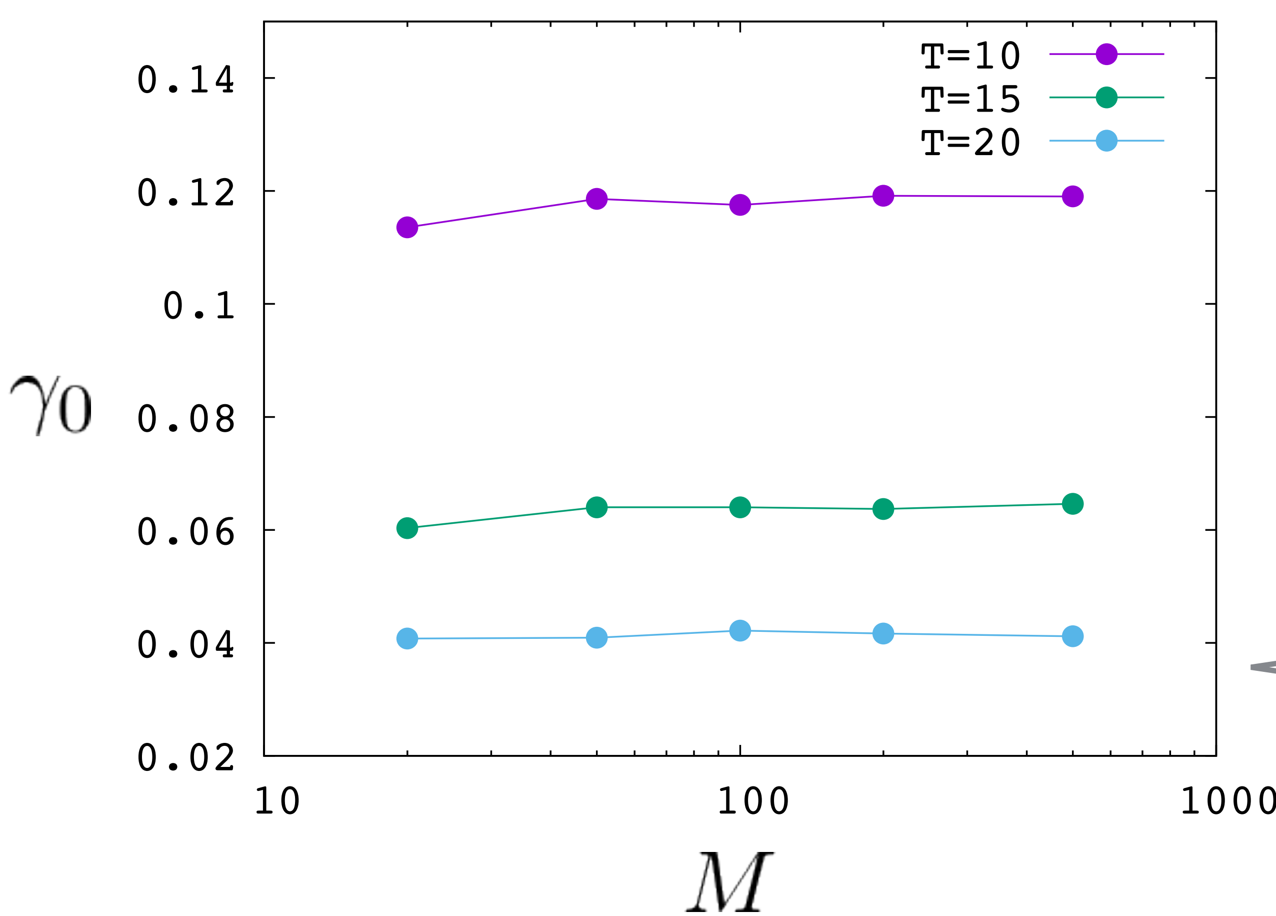
$$F=\langle\gamma(\tilde{V})\tilde{V}\rangle \qquad \gamma(\tilde{V})=\gamma_0+\gamma_1\tilde{V}+\gamma_2\tilde{V}^2+\gamma_3\tilde{V}^3+\cdots$$

代入

$$F=\langle\gamma_0\tilde{V}+\gamma_1\tilde{V}^2+\gamma_2\tilde{V}^3+\cdots\rangle$$

$$\underline{F}=\gamma_0\underline{\langle\tilde{V}\rangle}+\gamma_1\underline{\langle\tilde{V}^2\rangle}+\gamma_2\underline{\langle\tilde{V}^3\rangle}+\cdots$$

観測可



Fをいろいろ変えて
連立方程式を解けば
$\gamma_0,\gamma_1,\gamma_2,\cdots$ を決定できる

数値計算の結果から
γ_0はMに依存しないことがわかった

②揺動力の決定法

微粒子の運動 → 伊藤のランジュバン方程式に従うと仮定

伊藤のランジュバン方程式

$$M d\tilde{V} = -\gamma(\tilde{V})\tilde{V} ds + F ds + \sqrt{D(\tilde{V})} \cdot dB_s$$

dB_s 環境粒子から受ける力積の総和のようなもの

$$\sqrt{D(\tilde{V})} \cdot dB_s := M d\tilde{V} + \gamma(\tilde{V})\tilde{V} ds - F ds$$

微粒子にかかる力の総和から、抵抗力と外力を差し引いて、残った量を揺動力と定義

②揺動力の決定法

$$\sqrt{D(\tilde{V})} \cdot dB_s := Md\tilde{V} + \gamma(\tilde{V})\tilde{V}ds - Fds$$

この部分を取り出す

両辺を２乗して統計平均をとる

$$\langle D(\tilde{V}) \rangle = \frac{\langle (Md\tilde{V} + \gamma(\tilde{V})\tilde{V}ds - Fds)^2 \rangle}{ds}$$

$$\langle dB_s^2 \rangle = ds$$

$$\langle D(\tilde{V}) \rangle = D_0 + D_1 \langle \tilde{V} \rangle + D_2 \langle \tilde{V}^2 \rangle + D_3 \langle \tilde{V}^3 \rangle + \cdots$$

観測可

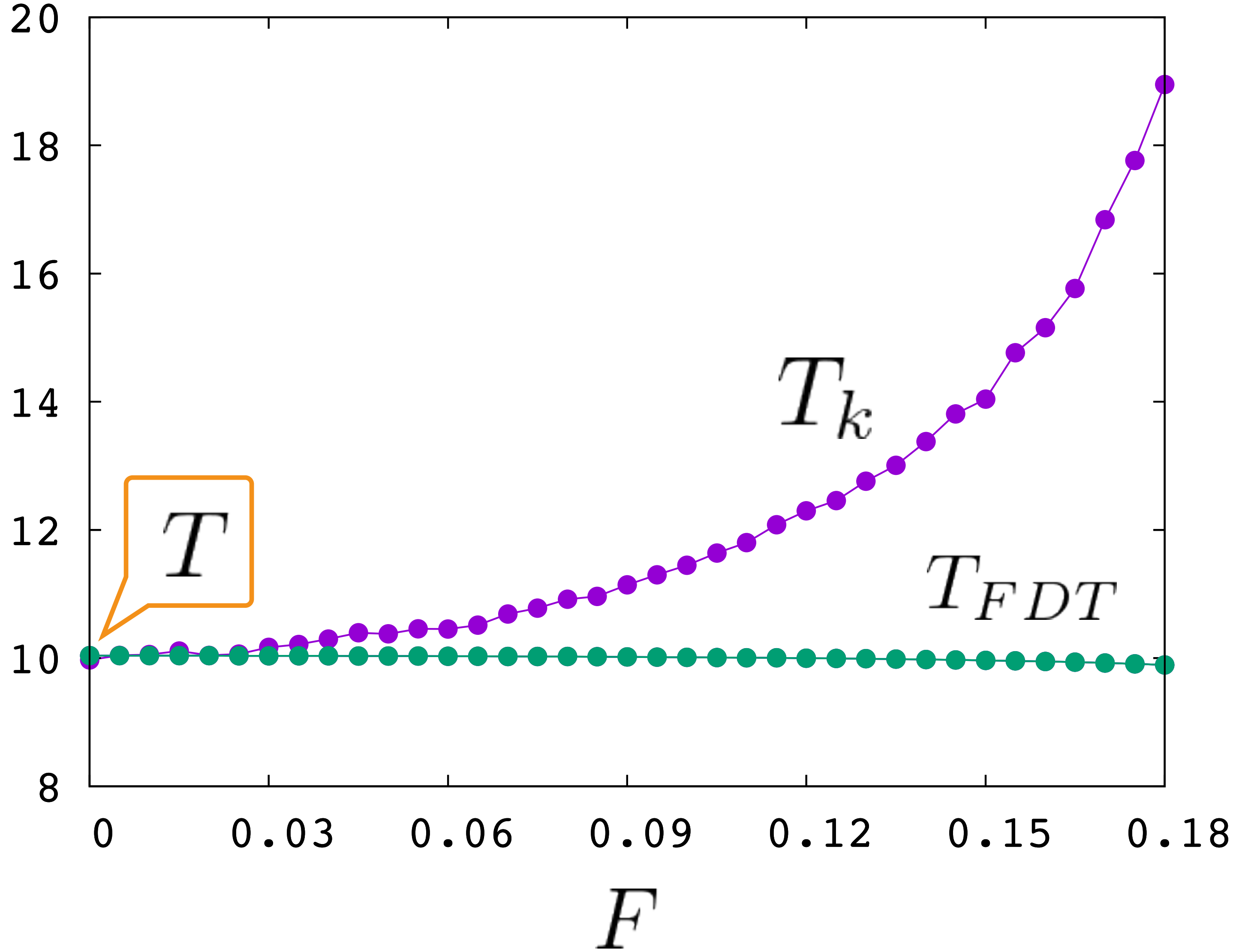
Fを変えて連立方程式を解けば$D_0, D_1, D_2, \cdots$が決定できる

①抵抗係数 $\gamma(V)$　②揺動力の大きさ $D(\tilde{V})$

→ 非線形ランジュバン方程式を数値的に決定できた

揺動散逸温度 T_{FDT}

$$T_{FDT} = \frac{1}{2}\frac{D(\tilde{V})}{\gamma(\tilde{V})} = \frac{1}{2}\frac{D_0 + D_2\langle\tilde{V}\rangle^2 + D_4\langle\tilde{V}\rangle^4 + \cdots}{\gamma_0 + \gamma_2\langle\tilde{V}\rangle^2 + \gamma_4\langle\tilde{V}\rangle^4 + \cdots}$$



$T_{FDT} = T$ (環境の温度)

運動論的温度

$$T_k \equiv M\langle(\tilde{V} - \langle\tilde{V}\rangle)^2\rangle$$

$(k_B = 1)$

$$T_k \neq T_{FDT}$$

非平衡系定常系での温度(有効温度)

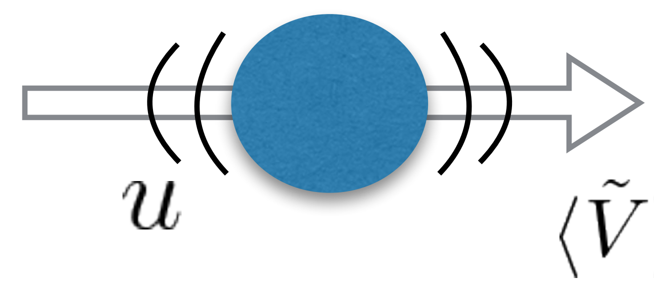
は定義できない？

相対系への変換

絶対系の運動方程式

$$M\dot{\tilde{V}} = F - \gamma_0 \tilde{V} - \gamma_2 \tilde{V}^3 - \cdots + \sqrt{D_0 + D_2 \tilde{V}^2 + \cdots}\,\xi(s)$$

速度ゆらぎ $u := \tilde{V} - \langle \tilde{V} \rangle$ 　代入



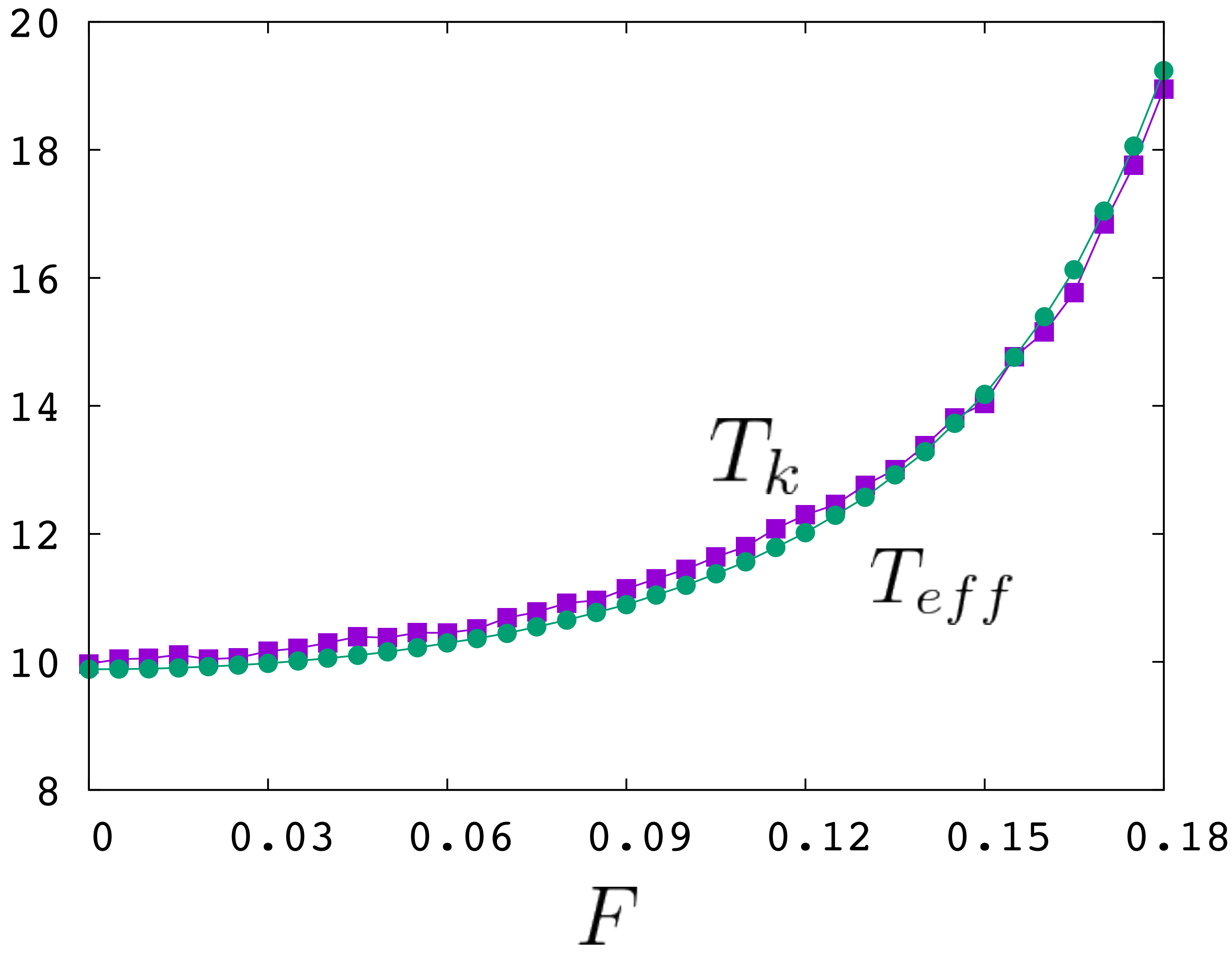
相対系の運動方程式

$$M\dot{u} = -(\overbrace{\gamma_0 + 3\gamma_2 \langle \tilde{V} \rangle^2 + 5\gamma_2 \langle \tilde{V} \rangle^4 + \cdots}^{\Gamma})u + \cdots$$

$$+\sqrt{\underbrace{D_0 + 2D_2 \langle \tilde{V} \rangle^2 + 4D_4 \langle \tilde{V} \rangle^4 + \cdots}_{d} + (\cdots)u + \cdots}\cdot \xi(s)$$

相対系での有効温度 T_{eff}

$$T_{eff} = \frac{1}{2}\frac{d}{\Gamma} = \frac{1}{2}\frac{D_0 + D_2\langle\tilde{V}\rangle^2 + D_4\langle\tilde{V}\rangle^4 + \cdots}{\gamma_0 + 3\gamma_2\langle\tilde{V}\rangle^2 + 5\gamma_4\langle\tilde{V}\rangle^4 + \cdots}$$



T_{eff}とT_kは
ほぼ一致

相対系で考えれば、
非平衡定常系でも
温度を定義できるかも?

cf. Taiki Haga (2013)

まとめ

1. 定常状態の力のつりあい $F=\langle\gamma(\tilde{V})\tilde{V}\rangle$ の関係と、伊藤のランジュバン方程式の式変形から、非線形抵抗 $\gamma(\tilde{V})$ と揺動力の大きさ $D(\tilde{V})$ を決定できるので、非線形ランジュバン方程式を数値的に決定する事ができる。

2. 運動論的温度 T_k と相対系での揺動散逸関係式から定義される T_{eff} が一致したことから、非平衡系でも相対系で考えれば、温度が定義できる可能性がある。

抵抗係数 $\gamma(V)$ の決定法

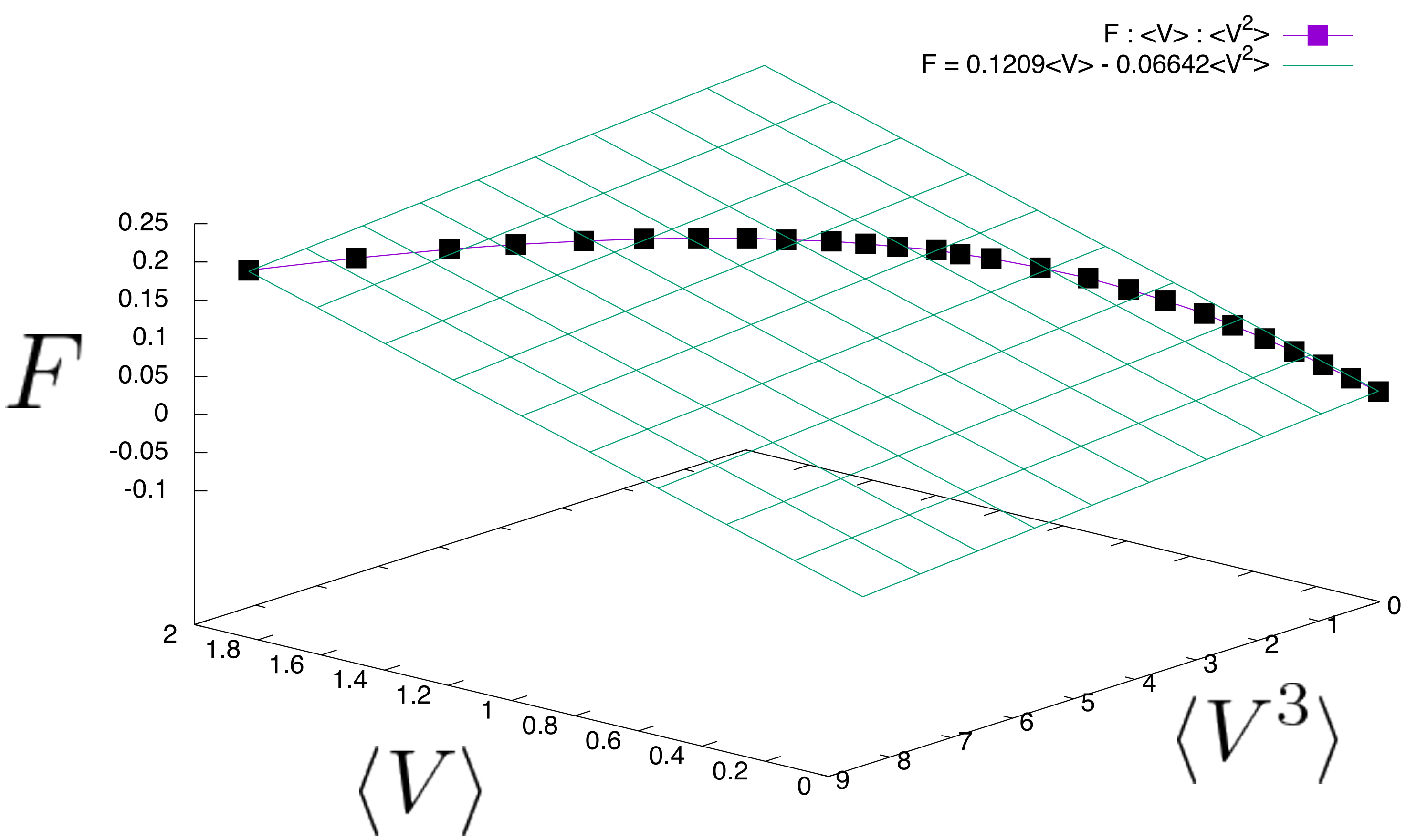
$$F = \langle \gamma(V) V \rangle \qquad \gamma(V) = \gamma_0 + \gamma_1 V + \gamma_2 V^2 + \gamma_3 V^3 + \cdots$$

$$F = \langle \gamma_0 V \rangle + \langle \gamma_1 V^2 \rangle + \langle \gamma_2 V^3 \rangle + \cdots$$

$$\underline{F} = \gamma_0 \underline{\langle V \rangle} + \gamma_1 \underline{\langle V^2 \rangle} + \gamma_2 \underline{\langle V^3 \rangle} + \cdots$$

―― 観測可

V^4以降は考慮しない



$$F = 0$$

$$\langle V \rangle = 0 \quad \langle V^3 \rangle = 0$$

→ $\gamma 1 = 0$ と仮定

$$\underline{F} = \gamma_1 \underline{\langle V \rangle} + \gamma_3 \underline{\langle V^3 \rangle}$$

$\gamma 1$, $\gamma 3$ を決定できる

$D(V)$の決定法

$$D(V) = D_0 + D_1 V + D_2 V^2 + D_3 V^3 + \cdots$$

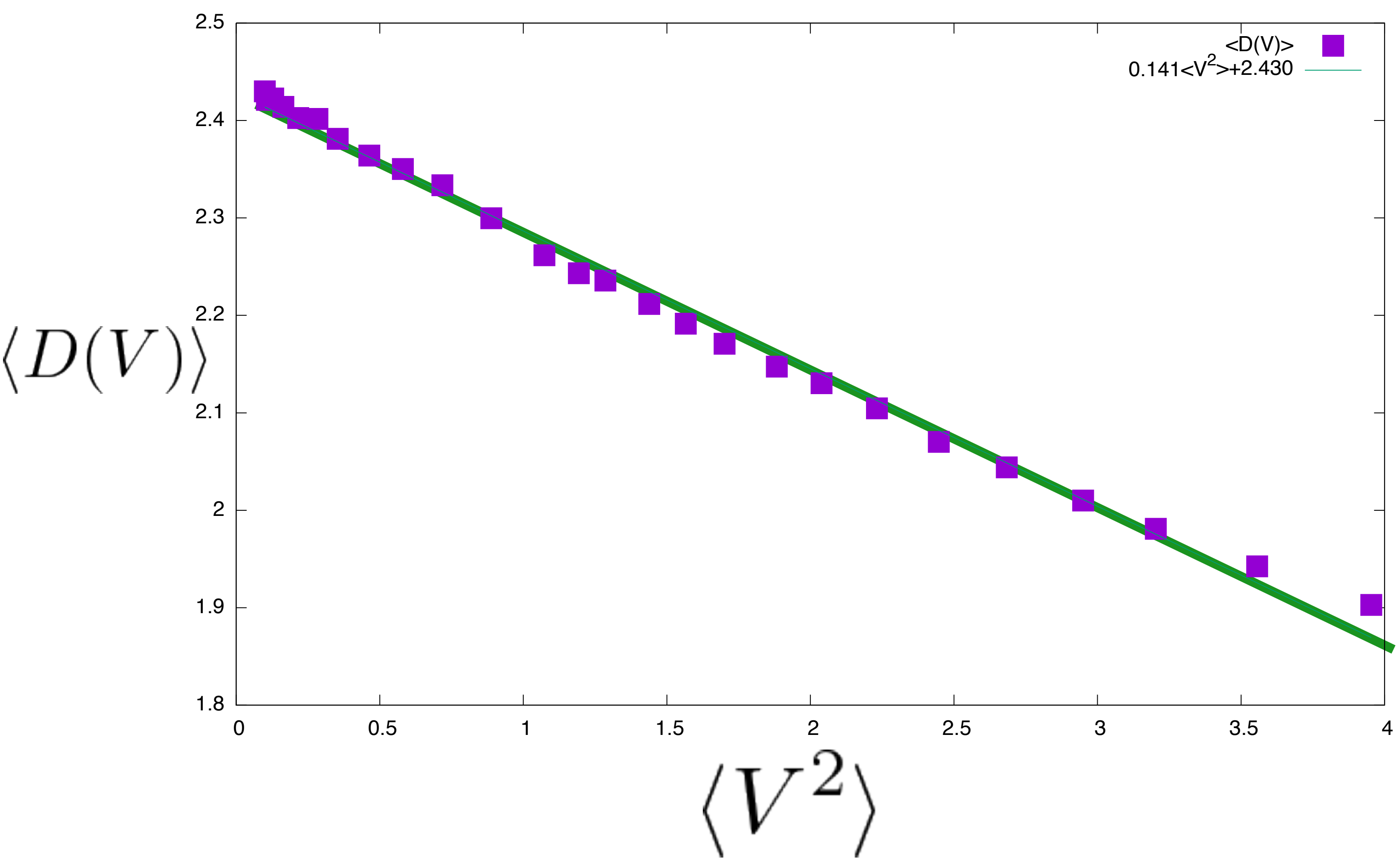
$$\underline{\langle D(V) \rangle} = D_0 + D_1 \underline{\langle V \rangle} + D_2 \underline{\langle V^2 \rangle} + D_3 \underline{\langle V^3 \rangle} + \cdots$$

—— 観測可

$\langle D(V) \rangle$ の大きさは外場の向きによらない

$$D_1 = 0$$
$$D_3 = 0$$

を仮定

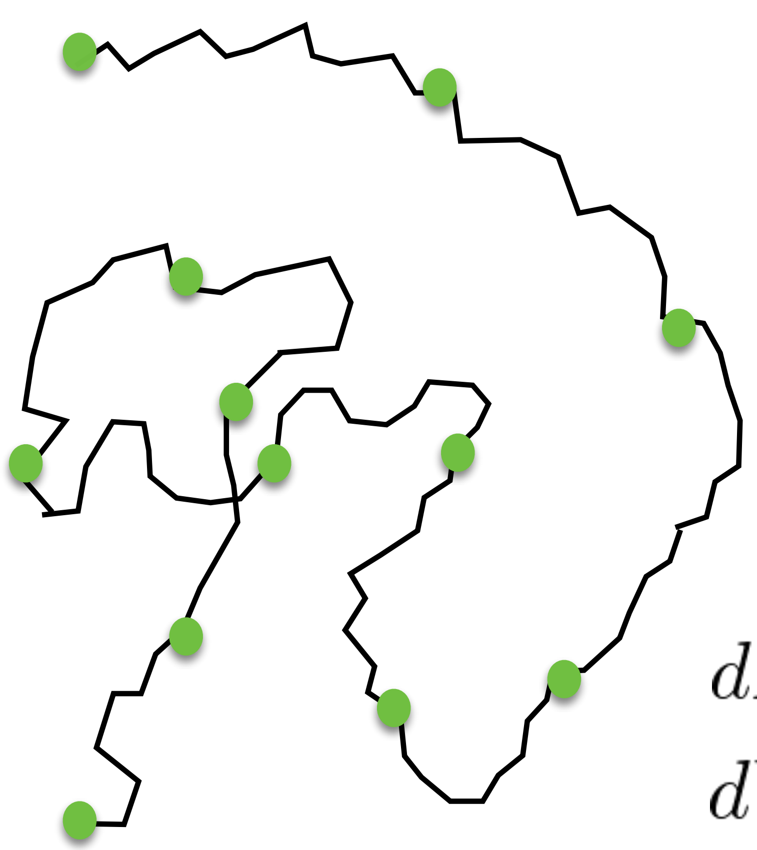


$$\underline{\langle D(V) \rangle} = D_0 + D_2 \underline{\langle V^2 \rangle}$$

D_0 , D_2 を決定できる

粗視化

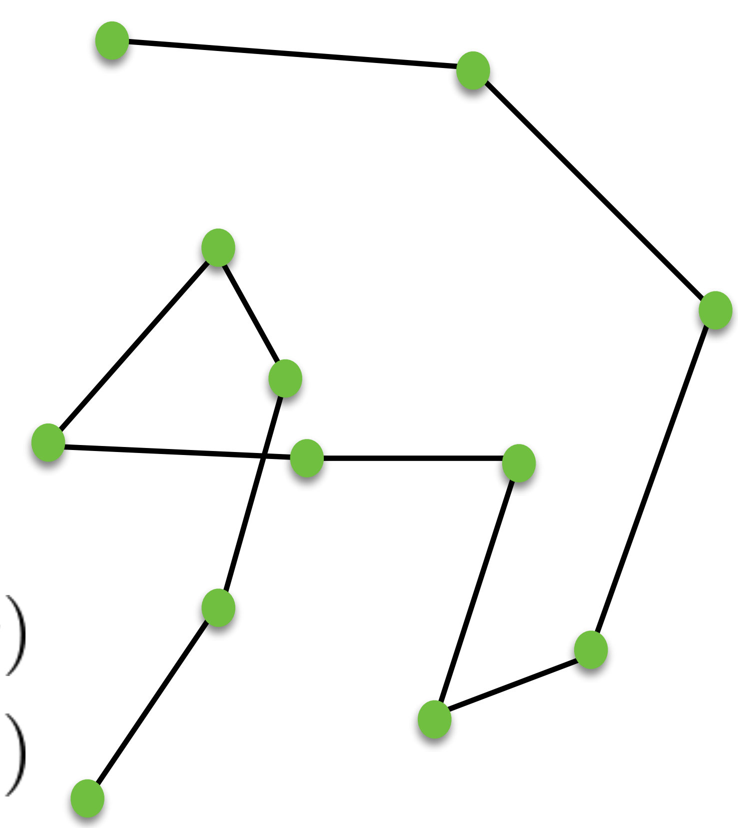
- 微粒子の運動 → 環境粒子と比べて非常にゆっくり
- ゆっくり運動する微粒子の運動する時間スケールで、微粒子の運動を見つめ直す。
- 観測時間の間隔を長くする → 粗視化時間 τ の導入



観測時間間隔 dt

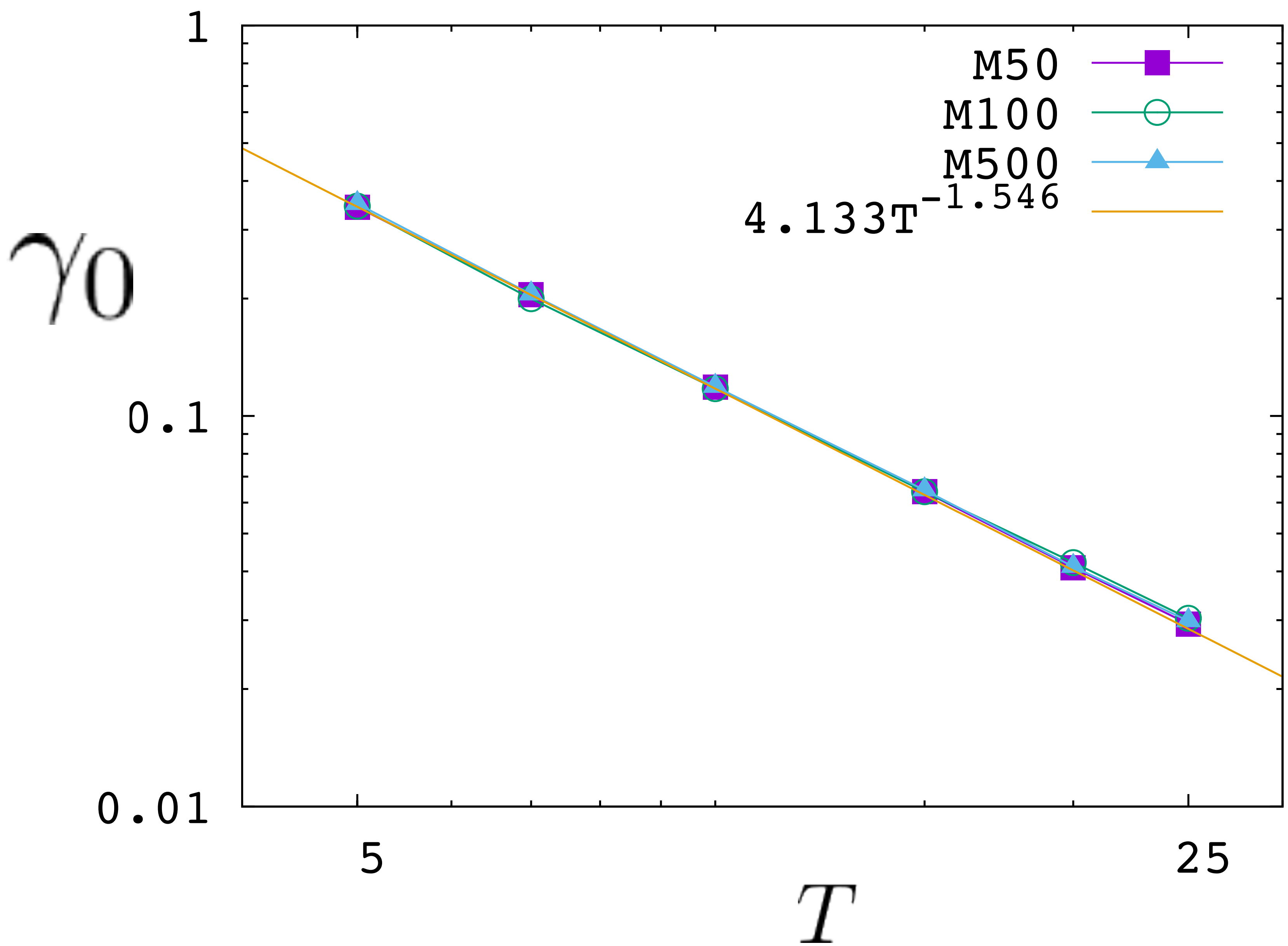
$$\tau dt = ds$$

$$dX := X(s+ds) - X(s)$$
$$dV := V(s+ds) - V(s)$$



観測時間間隔 ds

γ_0 の、熱浴の温度 T 依存性

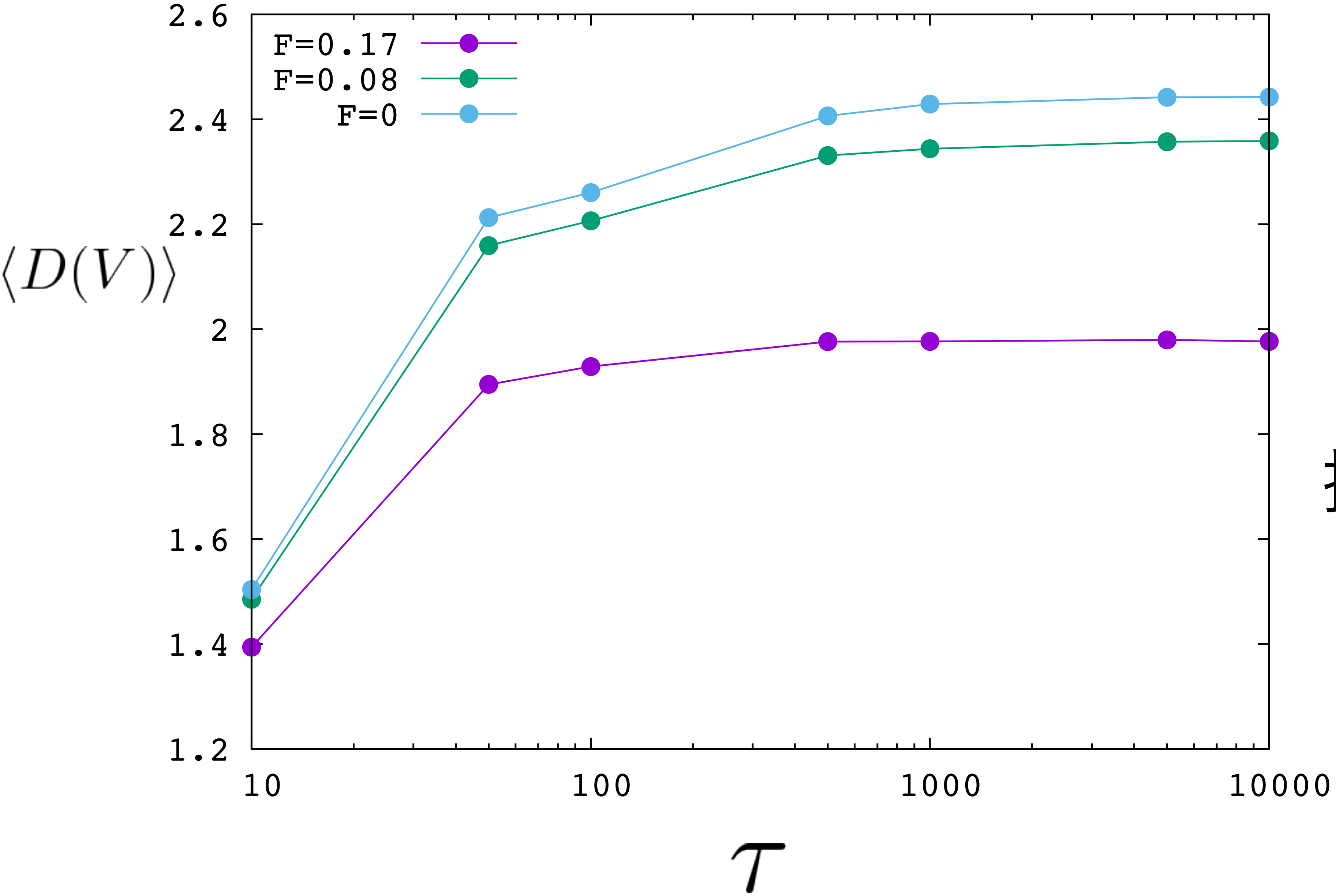


$$\gamma_0 = 4.133T^{-1.546}$$

熱浴の温度 T に
べき的な依存性がある

$$\tau dt = ds$$

$$\langle D(\tilde{V}) \rangle = \frac{\langle (M d\tilde{V} + \gamma(\tilde{V})\tilde{V} ds - F ds)^2 \rangle}{ds}$$



同時刻相関 $\langle D(V) \rangle$
が一定

揺動力がマルコフ性
を満たす