

修 士 学 位 論 文

**環境と力学的に相互作用する粒子の
粗視化運動と有効温度**

2 0 1 4 年 度
(平成 2 6 年 度)

茨城大学大学院理工学研究科

理学専攻

13NM151G

青柳 達也

概要

ブラウン運動は、メゾスコピックなスケールで起きる現象で、平衡状態ではランジュバン方程式でその運動が記述できることが分かっている。ランジュバン方程式では、速度に比例する抵抗力和、環境のゆらぎによる揺動力の2つの力がかかるとして、ブラウン運動の動きを再現している。しかし、ブラウン運動する微粒子が外場で定常的に駆動されるような非平衡定常系では、微粒子がどのような運動方程式を満たすか自明ではない。本研究では、微粒子が溶媒分子と力学的に相互作用しているという観念に戻り、非平衡定常状態にある微粒子が満たす運動方程式を、数値計算を用いて決定する。簡単化した設定として、温度 T の熱浴と接して熱運動する環境粒子 m と、その環境粒子 m と力学的相互作用する微粒子 M からなる系を考える。2つの粒子の質量は $m \ll M$ とすると、微粒子 M の動きは環境粒子 m と比較して非常に遅くなる。微粒子 M の運動する時間スケールで運動を粗視化して観察すると、微粒子 M のブラウン運動の性質を取り出すことができる。微粒子 M のみを一定の外場 F で定常的に駆動し続けると、外場 F が弱い領域では、外場 F と微粒子の平均速度 $\langle V \rangle$ の関係は比例する、つまり線形応答関係が見られた。しかし、外場を強くしていくと徐々に線形応答関係が崩れ、外場 F と微粒子の平均速度 $\langle V \rangle$ の間には非線形応答関係が見られるようになる。ここで、非平衡定常状態では、ランジュバン方程式における抵抗力の抵抗係数 γ が、速度のべき乗に依存して変化すると仮定した。つまり、平衡状態では抵抗係数 γ は定数であったが、非平衡定常状態では抵抗係数は $\gamma(V) = \gamma_0 + \gamma_1 + \gamma_2 V^2 \dots$ であるという仮定をおく。このように、非線形項を含むランジュバン方程式を、非線形ランジュバン方程式という。非線形ランジュバン方程式は、非線形抵抗、揺動力、外場の3項からなるので、非線形ランジュバン方程式を決定するとは、非線形抵抗、揺動力の2項を決定することである。定常状態では、平均してみれば一定の速度で微粒子は進んでおり、進行方向にかかる力は平均してつり合っている。ここで、 $F = \langle \gamma(V)V \rangle = \gamma_0 \langle V \rangle + \gamma_1 \langle V^2 \rangle + \gamma_2 \langle V^3 \rangle \dots$ の関係が成り立つ。数値計算したある外場 F の時の $\langle V \rangle, \langle V^2 \rangle, \langle V^3 \rangle, \dots$ との関係から、抵抗係数 $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \dots$ を求めることができる。抵抗係数 $\gamma(V)$ が決定できれば、非平衡定常系における揺動力は、方程式の式変形から定義して測定することが可能である。揺動力の特徴的大きさ D は、 γ と同様に速度 V のべき乗に依存し $D(V) = D_0 + D_1 V + D_2 V^2 \dots$ という形になっていると仮定する。さらに、粗視化した微粒子の運動は伊藤のランジュバン方程式を満たすと仮定する。伊藤のランジュバン方程式とは、非線形ランジュバン方程式を離散方程式に書き換えたときに現れる dB_t が $\langle dB_t^2 \rangle = dt$ を満たすような離散方程式である。伊藤のランジュバン方程式から式変形して揺動力の特徴的大きさ $\langle D(V) \rangle$ を算出し、抵抗係数 $\gamma(V)$ の場合と同様に数値計算からそれぞれの係数 $D_0, D_1, D_2 \dots$ を決定することができる。このような方法を用いて、微粒子 M の粗視化した運動が満たす非線形ランジュバン方程式を、数値計算を用いて決定した。

また、微粒子 M の速度揺らぎから運動論的温度 $T_k \equiv M \langle (V - \langle V \rangle)^2 \rangle$ を定義する。運動論的温度 T_k は、外場のない平衡状態では熱浴の温度 T と等しい。運動論的温度 T_k は外場 F 依存性がみられた。ここで、非平衡定常系における微粒子の揺らぎの速度を $u = V - \langle V \rangle$ で定義し、決定された非線形ランジュバン方程式に代入することによって、定常速度の慣性系から見た、ゆらぎの運動方程式を考える。新たにゆらぎの運動方程式の速度 u の係数を Γ とし、同様に $D(V)$ への代入から導出された揺らぎの速度 u の0次の項を d とする。非平衡系での有効温度 T_{eff} を、揺らぎの運動方程式での拡散係数 Γ と抵抗係数 d の比 $\frac{1}{2} \frac{d}{\Gamma}$ から定義すると、有効温度 T_{eff} と運動論的温度 T_k の間には 外場 F の十分な範囲で一致する事を示唆する結果が得られた。

目次

1	Introduction	5
2	ブラウン運動の性質について	6
2.1	ブラウン運動と歴史	6
2.2	ランジュバン方程式	6
2.3	揺動散逸定理	9
2.4	ブラウン運動の例：熱雑音	10
2.5	線形応答と非線形応答	10
3	モデル	13
3.1	モデルの概要	13
3.2	ハミルトニアンと運動方程式	18
3.3	数値実験	18
3.4	パラメーターの設定	19
3.5	モデルの妥当性－熱平衡の確認	23
4	平衡系	25
4.1	粗視化	25
4.2	γ の決定法	27
4.3	揺動力 の決定法	32
4.4	伊藤のランジュバン方程式	32
4.5	ウィーナー過程	34
4.6	マルコフ性を満たす粗視化時間	37
4.7	揺動散逸定理を満たす γ を探す	39
5	非平衡系	42
5.1	非線形ランジュバン方程式の仮定	42
5.2	$\gamma(\tilde{V})$ の決定法	43
5.3	揺動力の決定法	45
5.4	高次の項と $\gamma(\tilde{V}), D(\tilde{V})$ の関係	50
5.5	揺動散逸関係	50
6	有効温度についての考察	52
6.1	運動論的温度	52
6.2	有効温度の定義	53
6.3	絶対系での有効温度	54
6.4	相対系での有効温度	56
6.5	非平衡系での速度相関関数	65

7	まとめと今後の課題	70
8	付録	72
8.1	粗視化の必要性	72
8.2	フォッカー・プランク方程式による係数の決定法	77
8.3	平衡状態の γ の質量 M , 温度 T 依存性	88
8.4	運動論的温度 T_k のパラメーター a の依存性	90
8.5	積分定義による係数の違い	94
8.6	非対称ポテンシャル	102
9	謝辞	105

1 Introduction

ブラウン運動は、メゾスコピックなスケールでみられる現象で、マクロな大きさの微粒子が、周りに多数あるミクロな大きさの分子から衝突を受け、不規則な運動を絶えず繰り返す現象である。ブラウン運動の基礎方程式として、ランジュバン方程式がある。ランジュバン方程式の特徴として、速度に比例する抵抗力、環境から受ける力の合力である揺動力がある。微粒子が外場で定常的に駆動されるような非平衡定常系では、外場 F が小さい時、 F と微粒子の平均速度 $\langle V \rangle$ は線形応答関係を満たす。しかし、外場 F を強くしていくと二つの関係は非線形応答関係となる。このような非線形応答領域において、微粒子の運動は、線形ランジュバン方程式を満たさなくなる事がわかっている。非線形応答領域では、微粒子の運動が満たす運動方程式は存在するのだろうか？

本研究は、非線形応答領域での微粒子の運動は、非線形ランジュバン方程式を満たすと仮定し、数値計算を用いてその決定を試みたものである。

また、平衡状態では、微粒子の抵抗係数と拡散係数の間に揺動散逸関係が成り立つことがわかっているが、非平衡系でもその関係が保持されるかどうかは自明ではない。揺動散逸関係が成り立つかどうかの指標として、抵抗係数と拡散係数の比から定義される有効温度をについて調べることは有益である。数値計算を用いて決定された非線形ランジュバン方程式の抵抗係数と拡散係数の比から、非平衡系での有効温度について検討する。

この論文では、2 章ではまずランジュバン方程式の基本的な性質を述べる。3 章では、数値実験するモデルを提唱する。4 章では、微粒子の運動の粗視化の試みと平衡系での微粒子の運動が満たす線形ランジュバン方程式の決定方法について述べる。5 章では、非平衡定常状態を利用して非線形ランジュバン方程式を決定する方法について述べる。6 章では、有効温度についての検討をし、7 章では本研究でのまとめと今後の課題について述べる。

2 ブラウン運動の性質について

2.1 ブラウン運動と歴史

ブラウン運動とは、水中の沈めた花粉の中の微粒子が、不規則に休みなく動く現象として発見された。1827年にこの現象を発見したイギリスの植物学者ロバート・ブラウンは、花粉の中の微粒子がひとりでに動き続けるこの現象を、花粉の中にあるなんらかの生命の源が引き起こしているのではないかと考えた。翌年、ブラウンは論文「植物の花粉に含まれる微粒子について」を発表するが、この現象の原因は、およそ1世紀にわたって謎のままだった。

ブラウン運動の発見からおよそ1世紀の1905年、ドイツの物理学者アルベルト・アインシュタインは、ブラウン運動は、微粒子のまわりに多数存在するであろう分子が、熱運動によって微粒子に衝突するためにおこるという論文を発表する。(図1) 当時まだ原子や分子の存在が不確かだったため、この論文は原子や分子の存在を証明する大きな手がかりとなった。

ブラウン運動に従う現象は、水中の沈めた花粉の中の微粒子だけでなく、広い範囲で確認されている。例えば、電気回路における熱雑音、たんぱく質からなる分子モーターや、株価の変動など、物理学の範囲を超えて生物学や金融工学にも広く見られる現象である。

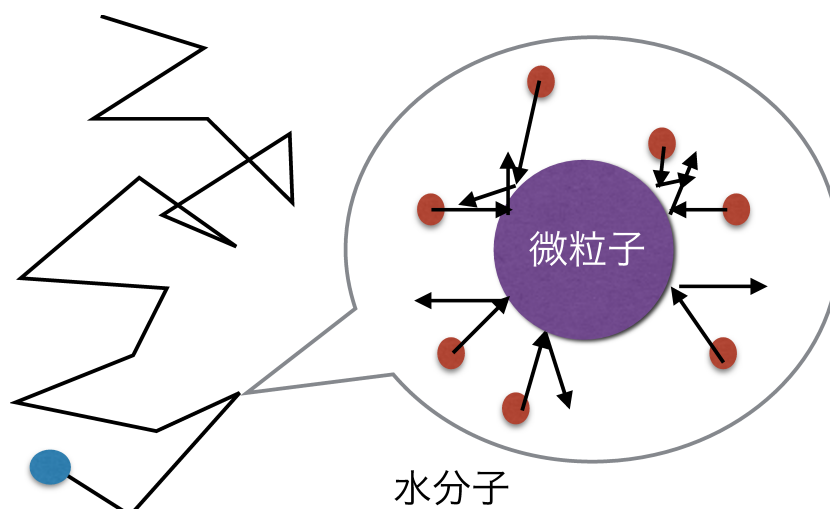


図1 ブラウン運動：水分子などの溶媒分子が熱運動し、微粒子に絶えず衝突しているため、微粒子が乱雑な動きをする。

2.2 ランジュバン方程式

ブラウン運動の不規則な動きは、微粒子の周りに存在する多数の溶媒分子が、次々に微粒子に衝突することが原因で起きる。「多数」というのはどれくらいかというと、水分子の直径が 0.3nm で、花粉の中の微粒子の大きさがおおよそ $1\mu\text{m}$ ほどなので、微粒子が占める体積の中に水分子入る個数は、概算すると170億個にもなる。さらに、水分子は室温では速度 500m/s で熱運動しているので、1秒間に微粒子が水分子から衝突を受ける回数はおおよそ 10^{19} 回ほどになる。想像しがたい回数だ。この多数の溶媒分子の衝突によって、ブラウン運動が起こる。

微粒子のブラウン運動を完璧に予想する事は、原理的には可能である。しかし、それは全く実用的ではない。なぜなら、微粒子の運動を完璧に予言する事とは、微粒子の周りにある 170 億個もの溶媒分子のそれぞれ運動も含めた、170 億本もの連立運動方程式を解く事と等しいからである。実際、そのような大量の運動方程式を解くことはできないだろう。では、どのようにブラウン運動を記述すればよいのだろうか？

ブラウン運動の運動方程式は、確率過程を用いた「ランジュバン方程式」で記述される。ランジュバン方程式は、周りのすべての溶媒粒子の動きは、はじめから見ないと決め込んで記述している。微粒子の運動を完璧に予想することはできないが、確率過程を用いれば、ブラウン運動の記述は可能なのである。確率過程とは、確率的に変化する変数のことで、時々刻々毎回ランダムな値をとる変数のことである。ランジュバン方程式では、微粒子が時々刻々受ける力の強さがどのくらいかを、確率を用いて与えている。これが、ランジュバン方程式が確率微分方程式と呼ばれている理由である。

普通の運動方程式は、初期条件さえ与えてやれば、 t 秒後、 $2t$ 秒後、それより先の未来の速度や変位も予言する事ができるが、ランジュバン方程式ではこの確率過程があるために、測定するたび毎回違う挙動がおこる。初期条件が全く同じでも、その後の動きは同じにならないのだ。

溶媒中におかれた質量 M の微粒子のブラウン運動は、以下のランジュバン方程式によって記述される。

$$M\dot{V} = -\gamma V + R(t) \quad (2.1)$$

V は微粒子の速度、 γ は粘性抵抗と呼ばれる定数である。 $R(t)$ は揺動力と呼ばれ、溶媒分子 (以下、環境粒子と呼ぶ) から時々刻々受けるランダムな力を表している。

この式は線形ランジュバン方程式と呼ばれ、ブラウン運動の運動方程式のモデルとして一般的に使われている式である。

初めてこの式を見た印象は、右辺にはたった 2 項しか無いし、非常にシンプルな形だなと思ったが、今思うといい加減な式だとも思うし、あの全く予測できない動きをたった 3 本の式 (式 (2.1) と、以下で述べる式 (2.2)、式 (2.2)) にまとめあげることができているのはすごいことだと思う。

じっくりと式の意味を吟味していく。

式 (2.1) の右辺第 1 項 $-\gamma V$ は粘性抵抗を表す項で、散逸項とも呼ばれている。抵抗係数 γ は定数なので、速度に比例した抵抗力が働くことを表している。微粒子は多数の分子からの衝突を受けるが、溶媒中を進もうとしても進む先にも多数の分子が存在し、それらの分子が邪魔して進みにくいのである。その邪魔する力が $-\gamma V$ の抵抗力である。式 (2.1) では γ は定数だが、この γ が時間に依存するパターンのランジュバン方程式 (一般化ランジュバン方程式) も存在する。[1][8]

右辺第 2 項の $R(t)$ は、時刻 t に微粒子 M が、周囲を取り囲む溶媒分子から時々刻々受ける力を表している。この力を揺動力と言う。その性質は以下の式で表される。

$$\langle R(t) \rangle = 0 \quad (2.2)$$

$$\langle R(t)R(t') \rangle = D\delta(t - t') \quad (2.3)$$

式 (2.2) では揺動力 $R(t)$ の統計平均が 0 になる事を表している。これは、例えばある時刻での揺動力を何回も測って、その大きさを平均したら 0 になる、すなわち、方向による偏りが無い事を表している。ある一定の

方向にばかりやたら水分子がぶつかってくる、なんて想定はしないということである。

式 (2.3) は、時間相関が無い事を示している。時間相関とは、ある時刻 t の揺動力 $R(t)$ とある時刻 t' の揺動力 $R(t')$ が、どれだけ関係があるかを表す量で、これが δ 関数の形になっていると、 t と t' が等しくなければ、値はすべて 0 となるので、 t 秒前の揺動力がどんな値であろうとも、これから決まる揺動力には影響を及ぼさないということを仮定している。サイコロを振ったとき、前に出た目がなんであろうとも、次に出る目には関係がないことと同じである。この性質をマルコフ性という。

また、 D は定数で、拡散係数と呼ばれている。この値が揺動力 $R(t)$ の特徴的大きさを表している。揺動力は、上の二つの性質を満たすガウス過程であると仮定する。ガウス過程とは、頻度分布がガウス関数となる確率過程 (時間とともに変化する確率変数) のことで、揺動力 $R(t)$ の頻度分布は分散 D 平均 0 のガウス分布を満たす。(図 2)

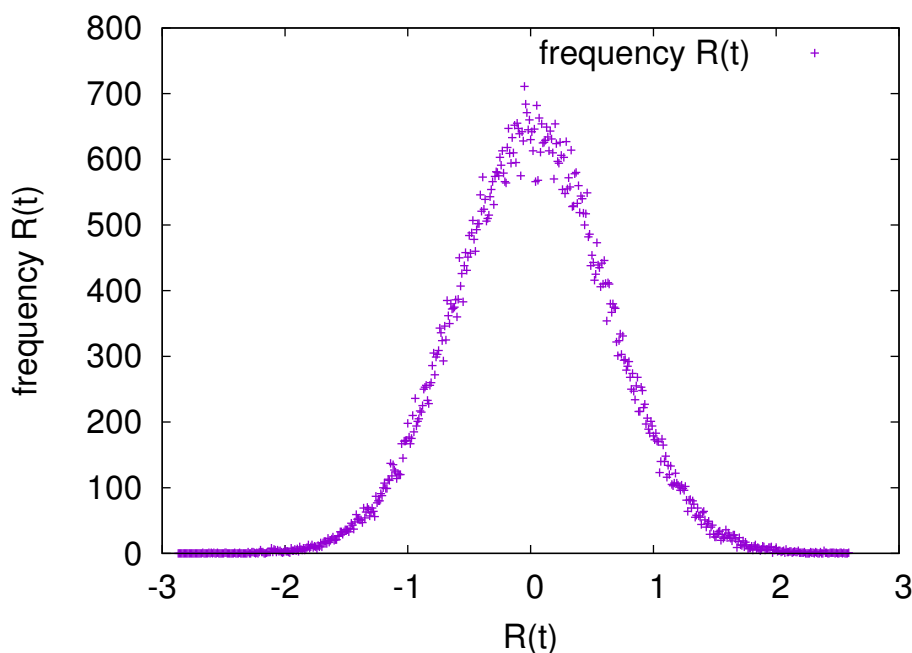


図 2 揺動力 $R(t)$ の分布 (ガウス分布：正規分布)。 x 軸は揺動力 $R(t)$ 、 y 軸は揺動力 $R(t)$ の頻度。揺動力 $R(t)$ の頻度分布は、ガウス分布になる。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, F = 0$

揺動力の分散 D は、平衡状態では $D = 2\gamma k_B T$ という関係があることがわかっているこの関係は、揺動散逸関係とよばれ、1905 年にアインシュタインによって発見された。(2.3 章または [2] 参照)。 γ は抵抗係数、 k_B はボルツマン定数、 T は熱浴の温度である。周りの温度 (熱浴の温度 T) が熱いほど、周辺の粒子は激しく運動するので、微粒子は周りの分子からビシビシと衝突する力を大きく受ける。それにともなう、揺動力の大きさ D の値は大きくなり、図 2 の揺動力の分布はより平べったい形 (分散が大きい形) になる。

2.3 揺動散逸定理

揺動力 $R(t)$ は以下の性質を満たす $\xi(t)$ を用いて次のように書き換えることができる。

$$R(t) = \sqrt{D}\xi(t) \quad (2.4)$$

$$\langle \xi(t) \rangle = 0 \quad (2.5)$$

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t - t') \quad (2.6)$$

この係数 D が $D = 2\gamma k_B T$ となる事は前の章で述べたが、その理由を示したい。マクスウェルの分子運動論から、平衡状態ならば粒子の運動エネルギーは、等分配則に従い、1 自由度あたり $\frac{1}{2}k_B T$ になるのだった。つまり、 $\frac{1}{2}M\langle V^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T$ の関係が成り立つ。この関係を使って拡散係数 D と温度 T を関係づける。式 (2.1) の $R(t)$ を、ある与えられた t の関数として式 (2.1) を形式的に解くと

$$V(t) = \int_{-\infty}^t \frac{R(s)}{M} e^{\frac{\gamma}{M}(t-s)} ds \quad (2.7)$$

という形になる（一階線形常微分方程式）。ここで、 $V(-\infty) = 0$ とした。

ここで、式 (2.7) は

$$V(t)^2 = \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^t \frac{R(s)R(s')}{M^2} e^{-\frac{2\gamma}{M}t} e^{\frac{\gamma}{M}(s+s')} ds' ds \quad (2.8)$$

となるが、両辺に統計平均 $\langle \rangle$ をとると

$$\langle V^2 \rangle = \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^t \frac{\langle R(s)R(s') \rangle}{M^2} e^{-\frac{2\gamma}{M}t} e^{\frac{\gamma}{M}(s+s')} ds' ds \quad (2.9)$$

となる。ここで、式 (2.3) を用いると

$$\langle V^2 \rangle = \frac{D}{M^2} e^{-\frac{2\gamma}{M}t} \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^t e^{\frac{\gamma}{M}(s+s')} \delta(s - s') ds' ds \quad (2.10)$$

$$= \frac{D}{M^2} e^{-\frac{2\gamma}{M}t} \int_{-\infty}^t e^{\frac{2\gamma}{M}s} ds \quad (2.11)$$

$$= \frac{D}{M^2} \frac{M}{2\gamma} \quad (2.12)$$

$$= \frac{D}{2\gamma M} \quad (2.13)$$

となる。平衡状態では、自由粒子の運動エネルギーは 1 自由度あたり $\frac{1}{2}k_B T$ となるから

$$\frac{1}{2}M\langle V^2 \rangle = \frac{D}{4\gamma} = \frac{1}{2}k_B T \quad (2.14)$$

$$D = 2\gamma k_B T \quad (2.15)$$

この関係式は第一種揺動散逸定理と呼ばれ、アインシュタインによって発見された [2]。拡散係数 D と温度 T についての関係式である。

2.4 ブラウン運動の例：熱雑音

熱雑音とは、電気回路の抵抗体内において、自由電子がブラウン運動することによって生じる雑音のことをいう。電子は電流のもとになるものなので、電子が不規則に運動すると電流に揺らぎが生じる。この電流の揺らぎが雑音の正体である。

図3は熱雑音のメカニズムを表している。赤い丸が導体を構成する金属原子で、青い丸が自由電子を表している。抵抗内部において、金属原子は格子点上に並んでおり格子点上に束縛されているが、それぞれが熱を持ち乱雑に振動している。自由電子はその振動する金属原子と衝突し、乱雑な動きをする。

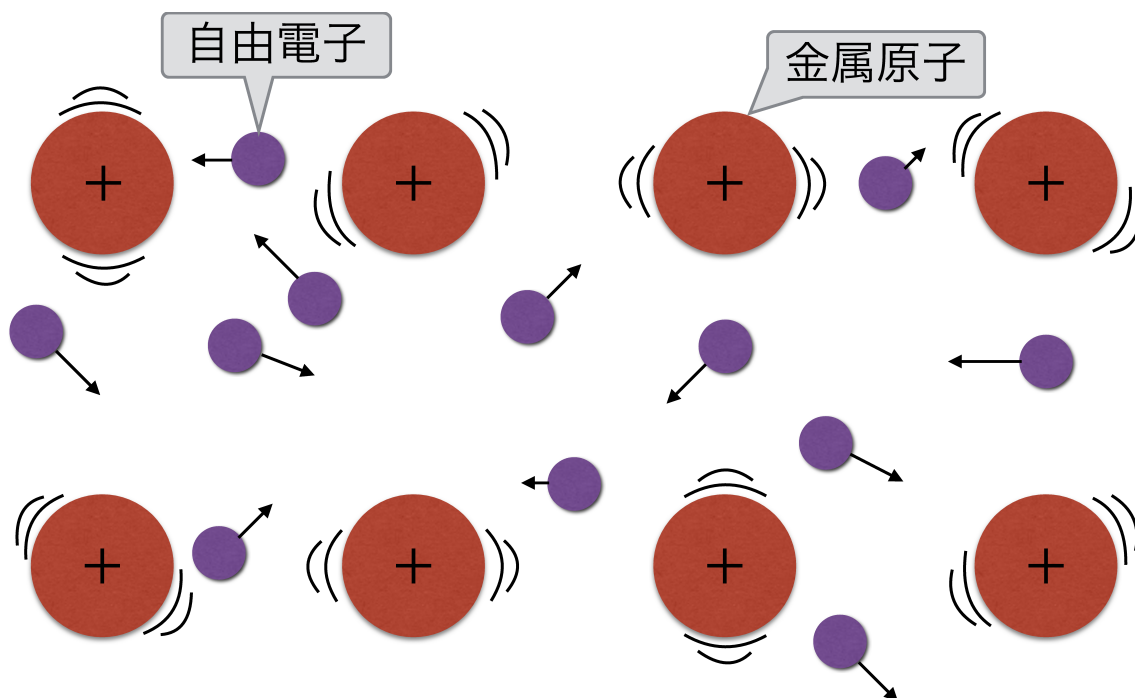


図3 ブラウン運動の例：熱雑音。熱雑音は、金属原子の熱運動によって、自由電子が乱雑に動き、電流に揺らぎが生しることによって起こる。

2.5 線形応答と非線形応答

ここから、非平衡での現象に移る。

抵抗に一定の電圧をかけると、一定の外場で自由電子を駆動し続けることになる。このとき、自由電子は揺らぎながらも、平均すれば一定の速度で電場をかけた方向へ進んでいく。これが導線の中での電子の流れ、つまり電流である。図4

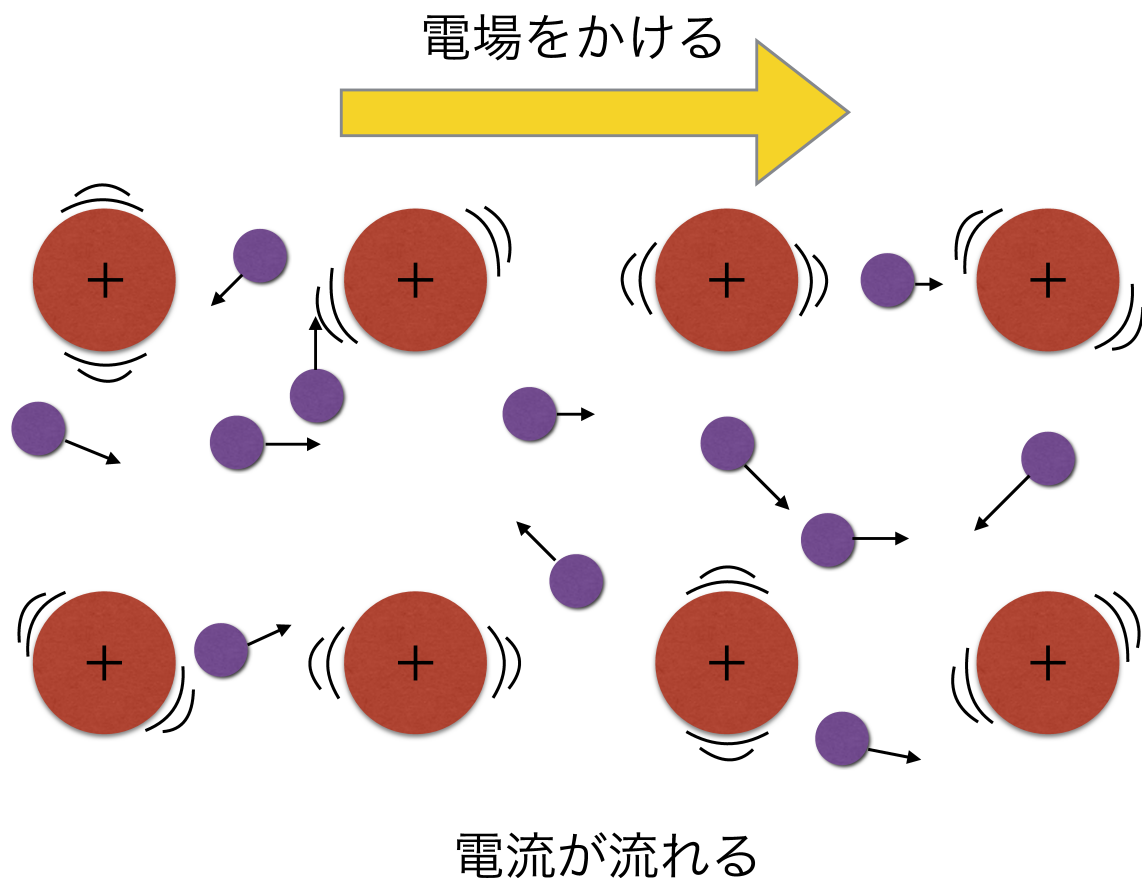


図4 非平衡定常系の例：電場をかけると、電場をかけた向きに進む自由電子が多くなるので、電流が流れる

オームの法則で表されるように、かける電圧の強さに比例して、自由電子の速度は大きくなっていく。かける力の強さと、流れが比例関係にある事を、線形応答関係という。しかし、オームの法則は、力が強い、つまり電圧が高いとき、比例の関係が崩れて成り立たなくなることがわかっている(図5)。これを、非線形応答という。弱い力がかかり、線形応答が成り立つ領域を、「線形応答領域」。強い力がかかり、線形応答が成り立たない領域を、「非線形応答領域」と呼ぶ。

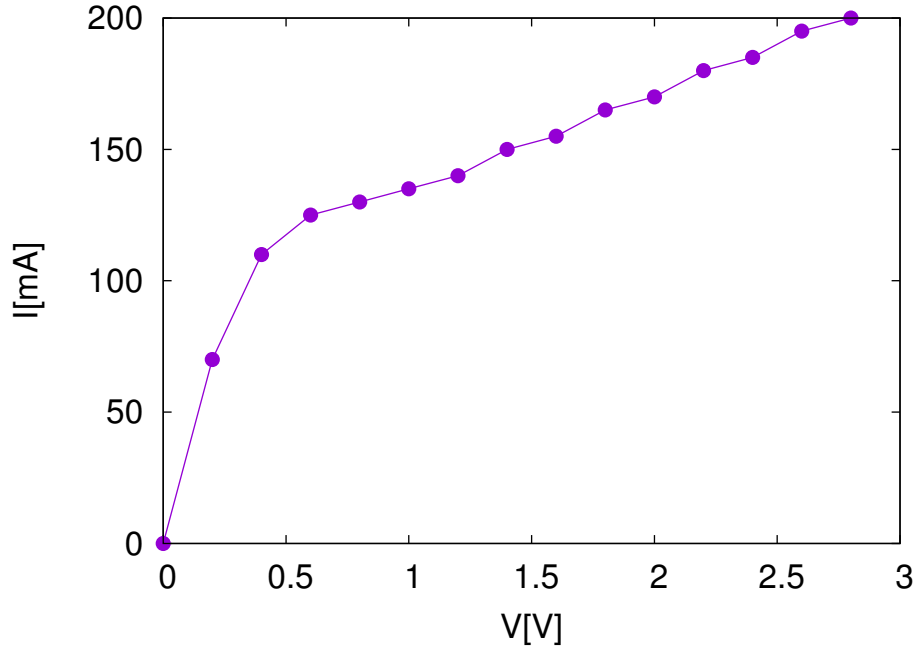


図5 非線形応答の例：豆電球の非線形抵抗。 V が小さい $0 \leq V \leq 0.5$ の時は、電流 I 、電圧 V の間には線形応答関係（オームの法則）が成り立つが、 V が大きい時は線形応答関係が成り立たない。（出典:[18]）

熱雑音を作り出す自由電子のように、ブラウン運動する粒子に外場をかけて駆動し続けると、非平衡定常状態となる。定常状態とは、揺らぎはあるものの、大まかにみれば一定の速度で流れができており、その性質は時間変化しない状態である。外場の弱い時は線形応答関係が見られ、外場を強くしていくと非線形応答関係が見られる。

平衡状態、または線形応答領域では、ブラウン運動する粒子の運動は線形ランジュバン方程式で記述できることがわかっている。外場で駆動するような非平衡系では、一般的に、ランジュバン方程式に外場 F の項を加えた、以下の式が使われている。

$$M\dot{V} = -\gamma V + \sqrt{2\gamma k_B T}(t) + F \quad (2.16)$$

線形応答領域では、微粒子の運動はこの運動方程式を満たす。しかし、外場を強くして非線形応答領域に入ると、次第にこの運動方程式を満たさなくなることがわかっている。

非線形応答領域では、微粒子は非線形ランジュバン方程式で記述できる。本研究は、ブラウン運動の数値シミュレーションを行い、微粒子の運動から非線形ランジュバン方程式の導出の方法をまとめたものである。

3 モデル

3.1 モデルの概要

非平衡定常状態のブラウン運動を再現することができる、シミュレーションのモデルを提唱する。ブラウン運動の再現をするためには、微粒子があちこちからランダムに力を受けるようなモデルを考えればよい。

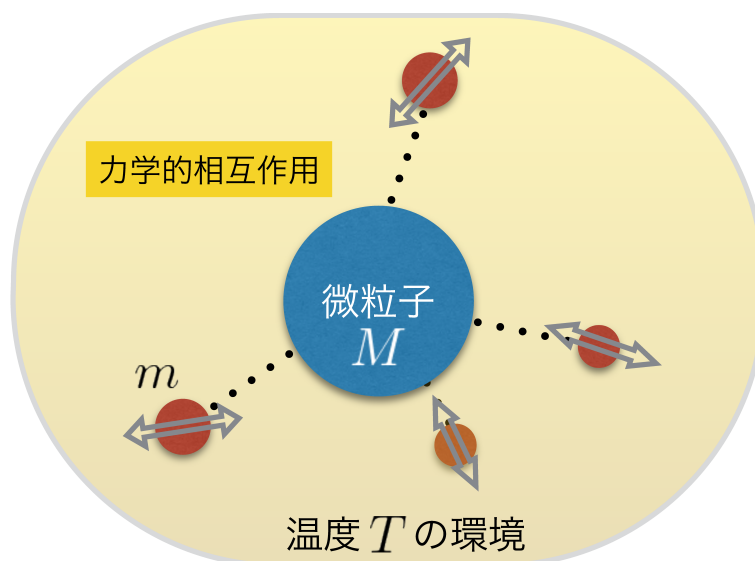


図6 モデルの概略図1：熱運動する環境粒子 m と、ブラウン運動する微粒子 M からなる系。環境粒子 m は温度 T の熱浴を形成しており、温度 T で熱運動する。微粒子 M は、環境粒子 m からの力学的相互作用のみを受ける。微粒子 M は環境粒子 m を介して熱浴とつながっている。

図6は、モデルの概略図である。熱運動する環境粒子 m と、微粒子 M からなる系を考える。環境粒子は温度 T で熱運動し、熱浴を形成している。微粒子 M の運動に着目する。微粒子 M は環境粒子 m と力学的相互作用を絶えずくり返す。微粒子 M は環境粒子 m を介して、温度 T の熱浴とつながっているという想定である。また、微粒子の質量 M は環境粒子の質量 m より非常に重い ($m \ll M$)。

今回の数値実験では、簡略化した設定として1次元系を扱う。図7は、簡略化したモデルの概略図である。

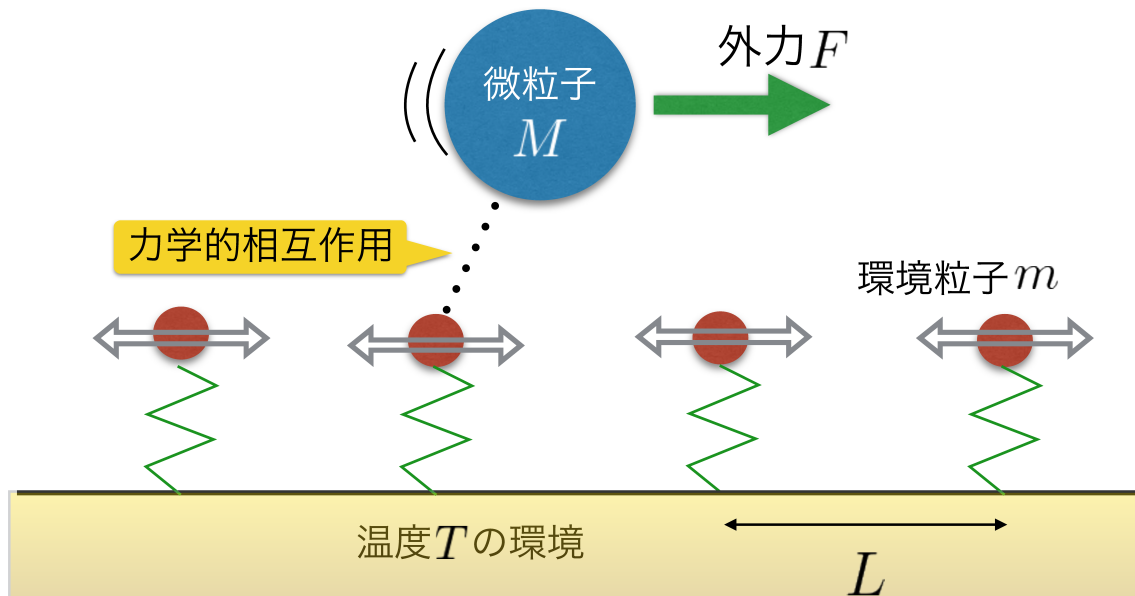


図7 1次元系に簡略化したモデルの概略図：環境粒子 m は、等間隔 L で配置されており、微粒子は常に1つの環境粒子と力学的相互作用を繰り返す。環境粒子は熱浴と接しているため温度 T で熱運動するが、初期位置から大きく離れないようにするために調和ポテンシャルが働く。このとき、微粒子 M のみを外場 F で駆動する。

微粒子 M と、まわりの環境粒子 m が、力学的相互作用を繰り返している。環境粒子 m は、等間隔 L で配置されており、微粒子 M は常に1つの環境粒子 m と力学的相互作用を繰り返す。環境粒子 m は温度 T で熱運動するが、初期位置から大きく離れないようにするために調和ポテンシャルが働く。このとき、微粒子 M にのみ外場 F をかけることができるとする。また、環境粒子 m 、微粒子 M は体積を考えず、質点であるとする。

さらに、二つの粒子の間に働く力的相互作用に、周期ポテンシャル $\cos(\frac{2\pi}{L}(X - x))$ を採用する。この時、 X は微粒子 M の位置、 x はある環境粒子 m の位置である。周期ポテンシャル $\cos(\frac{2\pi}{L}(X - x))$ を採用する理由を以下に述べる。

ブラウン運動の再現をするためには、微粒子があちこちからランダムに力を受けるようなモデルを考えればよく、1次元系では、微粒子には左右にランダムに振られるような力がかかることになる。ここで、微粒子の視点(微粒子の位置を固定して、環境粒子のみが動くような視点(図8))でモデルを見てみる。(実際は微粒子も動いている)

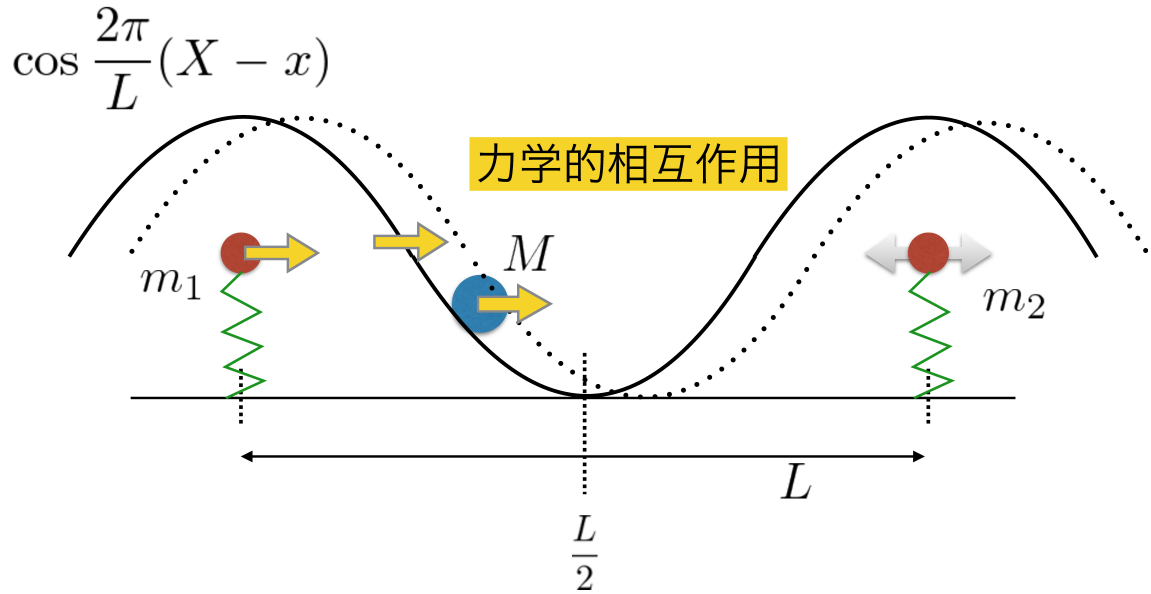


図8 微粒子の視点から見たモデル。微粒子は、常に一つの環境粒子と力学的相互作用をする。図の左側の、環境粒子 m_1 と微粒子 M に着目する。環境粒子 m_1 には、斥力ポテンシャル $\cos(\frac{2\pi}{L}(X - x))$ が張られているとみなすことができる。環境粒子 m_1 が、もし図の右側に動けば、ポテンシャルも右側へ移動する。すると、微粒子 M は図の右側へ斥力を受ける (同時に、環境粒子 m_1 へも逆向きの力を与えている。) このように、微粒子 M は振動する環境粒子 m_1 が作る斥力ポテンシャルから力を受ける。

まず、微粒子は原点で固定されていると仮定 ($X = 0$) すると、環境粒子の中心の周りに $\cos \frac{2\pi}{L}x$ の斥力ポテンシャルが張られているとみなす事ができる。

次に、微粒子は、常に一つの環境粒子と力学的相互作用をする。図の左側の、環境粒子 m_1 と微粒子 M に着目する。環境粒子は熱浴に接しているので、温度 T で熱運動する。もし環境粒子が紙面右側に動けば、ポテンシャルも右側へ移動する。すると、微粒子にはたらく「力」は $-\frac{\partial H_{int}}{\partial X} = \sin(\frac{2\pi}{L}(X - x))$ なので、環境粒子との距離が $(X - x) \leq \frac{L}{2}$ の時は斥力が作用し微粒子も紙面右側へ力を受ける (同時に、環境粒子へも逆向きの力を与えている。) このように、微粒子は環境粒子が作る”振動するポテンシャル”から絶えず力を受けている。

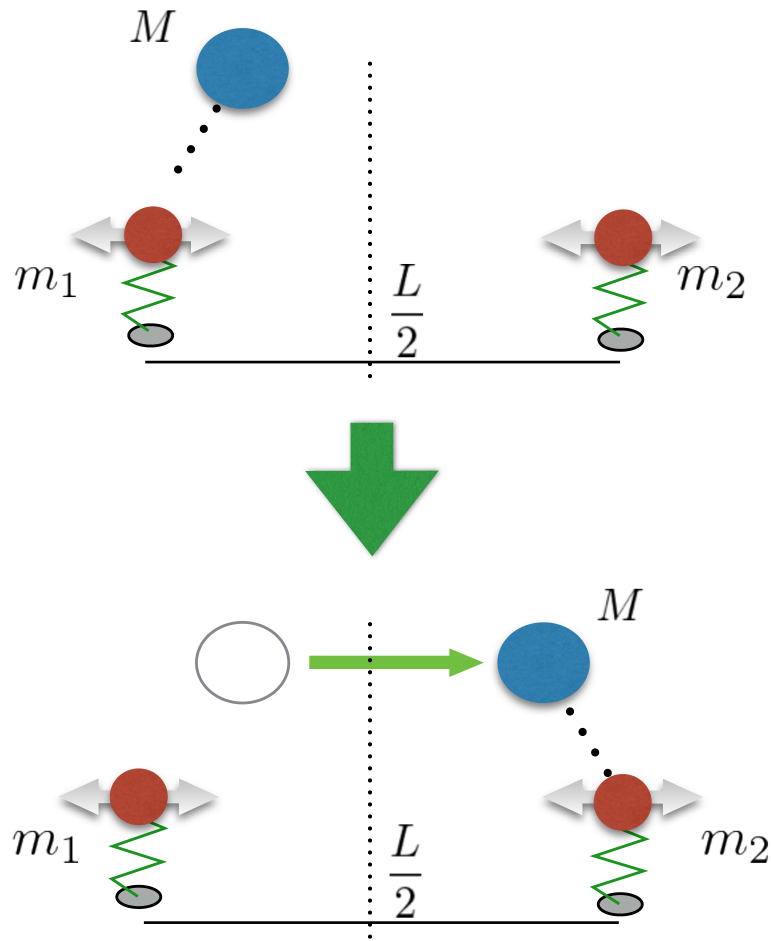


図9 微粒子 M の位置と相互作用する環境粒子 m の変化。微粒子は常に1つの環境粒子と相互作用する。環境粒子 m_1 と相互作用していた微粒子 M の位置 X が、 $\frac{L}{2} \leq X$ となるときは、今度は右側の環境粒子 m_2 と相互作用をするようになる。

微粒子の位置が $\frac{L}{2} \leq X$ となる時は、今度は環境粒子 m_2 と相互作用する。この時、もともと相互作用していた環境粒子 m_1 との相互作用は切れている。図9

しかし、ポテンシャルを $\cos \frac{2\pi}{L}(X - x)$ の周期関数でとると、図9の右側にいる環境粒子 m_2 は、左側にいる環境粒子 m_1 と同じものである。つまり、微粒子の位置が $\frac{L}{2} \leq X$ となると、 m_1 の反対側に微粒子が出現することになる。この事を表しているのが、図10である。

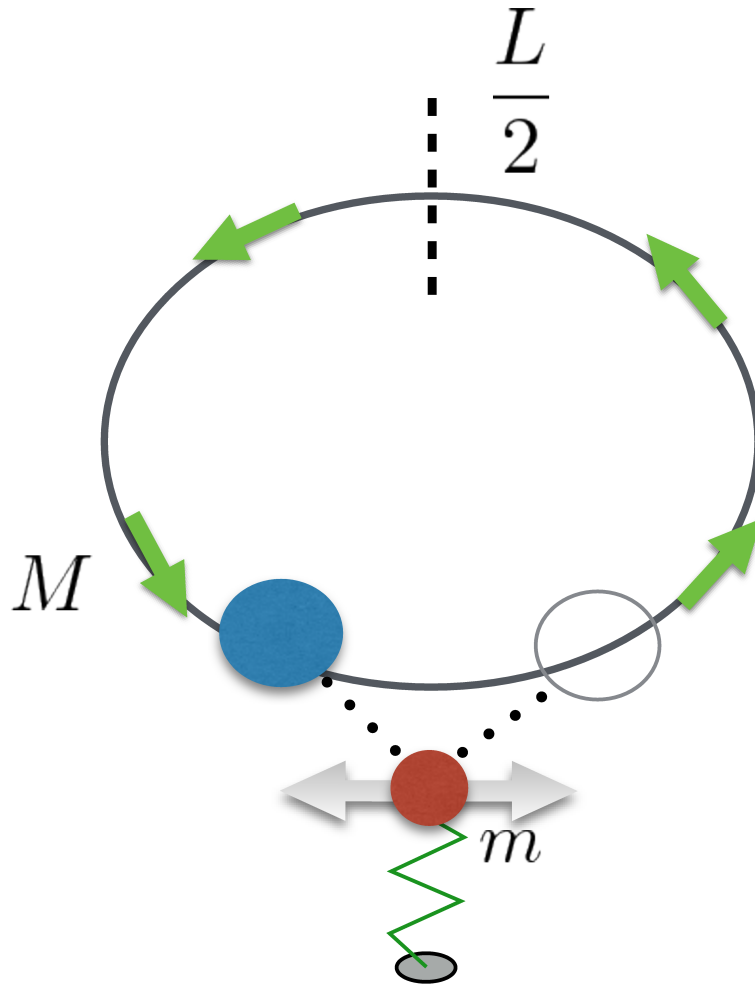


図 10 微粒子 M の位置が変化しても相互作用する環境粒子 m は変化しない。ポテンシャルを $\cos \frac{2\pi}{L}(X - x)$ の周期関数でとると、微粒子 M の位置 X が $\frac{L}{2} \leq X$ となっても、もともと相互作用していた環境粒子の反対側に出てくることになるので、実際は相互作用する環境粒子は変わらないが、周期的に並ぶ環境粒子と次々に相互作用していくことを再現できる。

結局、微粒子は常に 1 つの環境粒子と相互作用を繰り返すが、1 周期分移動すると、もともと相互作用していた環境粒子の反対側に出現することになる。ポテンシャルを周期関数で置く事によって環境粒子が周期的に配置されている事を再現し、数値計算上は 2 体の粒子の運動のみを計算し続けられれば良いことになる。これによって、多数の環境粒子の運動を計算するよりも計算が非常に簡単になる。

3.2 ハミルトニアンと運動方程式

モデルのハミルトニアンは、以下のようになっている。

$$H(X, P, x, p) = H_M(X, P) + H_m(x, p) + H_{int} \quad (3.1)$$

$$H_M = \frac{P^2}{2M} \quad (3.2)$$

$$H_m = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \quad (3.3)$$

$$H_{int} = \cos\left(\frac{2\pi}{L}(X - x)\right) \quad (3.4)$$

式 (3.2) は微粒子、式 (3.3) は環境粒子のハミルトニアンである。式 (3.4) は 2 粒子間の相互作用ポテンシャルのハミルトニアンである。このハミルトニアンに基づく力に加え、環境粒子の熱浴 T との相互作用と、微粒子へ加わる外力も含めると、運動方程式は

$$M\dot{V} = -\frac{\partial H_{int}}{\partial X} + F \quad (3.5)$$

$$m\dot{v} = -\gamma'v + \sqrt{2\gamma'k_BT}\xi(t) - kx - \frac{\partial H_{int}}{\partial x} \quad (3.6)$$

となる。式 (3.6) は環境粒子 m の運動方程式、式 (3.5) は微粒子 M の運動方程式をそれぞれあらわしている。式 (3.6) の右辺 1 項と 2 項で、温度 T の熱浴に接していることを表している。 γ' は、環境粒子の抵抗係数で、 T 熱浴は熱浴の温度である。右辺項 3 項は、環境粒子 m は線形バネで初期位置に固定されていると仮定するので、バネ定数 k のバネからの復元力を表す。右辺第 4 項はブラウン粒子との力学的相互作用である。式 (3.5) 式の右辺第 1 項は環境粒子との力学的相互作用で、右辺第 2 項は微粒子を引っ張る一定外力である。

3.3 数値実験

コンピュータで、ある運動方程式に従う物体の運動をシミュレーションする際に、気をつけなければならないことがある。それは、コンピュータは連続的な変化をさせるのが苦手ということだ。必ず離散的にしないといけない。離散的な数値計算の方法として、いくつかの方法がある。

ルンゲ・クッタ法やオイラー法など、様々な方法が存在するが、それぞれの方法には一長一短がある。基本的には、計算が楽（コンピュータにとって）なものだと精度が落ちるし、精度が高くなると計算量が多くなる。今回はその中で、速度ベルレ法 (velocity verlet 法) を用いて計算行った。速度ベルレ法とは、ある時刻 t の変数 (位置 $x(t)$, 速度 $v(t)$) からテーラー展開の 2 次までの情報を用いて dt 後の変数の値を決定する方法である。具体的には、以下のような考え方で、時々刻々の物体の位置 x と速度 v を差分方程式として計算している。位置 x と速度 v を、微小時間 Δt で 2 次までテーラー展開すると

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \frac{\Delta x}{\Delta t}\Delta t + \frac{1}{2}\frac{\Delta^2 x}{\Delta t^2}\Delta t^2 \quad (3.7)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{\Delta v}{\Delta t}\Delta t + \frac{1}{2}\frac{\Delta^2 v}{\Delta t^2}\Delta t^2 \quad (3.8)$$

となる。ここで、もし仮にある時刻 t での速度 $v(t)$ と加速度 $a(t)$ がわかっているとする。時刻 t での加速度は、運動方程式 $ma(t) = F(t)$ を $a(t) = \frac{F(t)}{m}$ と変形してやれば簡単に求めることができる。

このとき、 Δt 後の $x(t + \Delta t), v(t + \Delta t)$ は、それぞれどのように求めればよいのだろうか。

位置 $x(t + \Delta t)$ は、 $v = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ 、 $a = \frac{\Delta^2 x}{\Delta t^2}$ なので、

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v\Delta t + \frac{1}{2}a\Delta t^2 \quad (3.9)$$

$$(3.10)$$

としてやればよいことがわかる。しかし、 $v(t + \Delta t)$ には $\frac{\Delta^2 v}{\Delta t^2}$ の項があるため簡単にはかなそうである。そこで、加速度 a のテーラー展開を用いる必要が出てくる。

加速度 a を微小時間 Δt で 1 次までテーラー展開すると

$$a(t + \Delta t) = a(t) + \frac{\Delta a}{\Delta t} \Delta t \quad (3.11)$$

$$(3.12)$$

ここで Δa を $\Delta a := a(t + \Delta t) - a(t)$ で定義すると

$$\Delta a = a(t + \Delta t) - a(t) = \frac{\Delta a}{\Delta t} \Delta t \quad (3.13)$$

$$(3.14)$$

$a = \frac{\Delta v}{\Delta t}$ だから

$$\frac{\Delta a}{\Delta t} = \frac{\Delta^2 v}{\Delta t^2} = \frac{a(t + \Delta t) - a(t)}{\Delta t} \quad (3.15)$$

$$(3.16)$$

これを式 (3.9) 代入して

$$v(t + \Delta t) = v(t) + a(t)\Delta t + \frac{1}{2} \frac{a(t + \Delta t) - a(t)}{\Delta t} \Delta t^2 \quad (3.17)$$

$$= v(t) + a(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t + \Delta t)\Delta t - \frac{1}{2}a(t)\Delta t \quad (3.18)$$

$$= v(t) + \frac{\Delta t}{2}(a(t + \Delta t) + a(t)) \quad (3.19)$$

これで、時刻 t での $x(t), v(t), a(t)$ の情報を使って、 $x(t + \Delta t), v(t + \Delta t)$ を決定する事ができた。 $2t$ 秒、 $3t$ 秒後の変数は、単に $x(t + \Delta t) \rightarrow x(t), v(t + \Delta t) \rightarrow v(t)$ として新たに計算しなおしてやればよいだけなので、このサブルーチンを繰り返し用いれば、時々刻々の変化の近似的な計算が可能である。

上の二つの運動方程式から得られる粒子の挙動は、このような方法で数値計算を行った。

3.4 パラメーターの設定

数値実験をするにあたって、モデルとして妥当なパラメーターの設定を行う。

k_B は、計算を簡単化するために最初に $k_B = 1$ と決める。よって調整するパラメーターは、微粒子の質量 M 、環境粒子の質量 m 、環境粒子の粘性抵抗 γ' 、熱浴の温度 T 、環境粒子についてのバネのバネ定数 k 、環境粒子の間隔 L 、観測時間間隔の dt の 7 つである。

まず、環境粒子の間隔 L は、どの空間のスケールでシミュレーションを行うかを決める変数である。ここで、

$L = 1$ とする。次に、微粒子の質量 M は環境粒子の質量 m と比較して十分重いとするので、環境粒子の質量を $m = 1$ とし、微粒子の質量を $M = 100$ とおく。

残るパラメーターは k, γ', T, dt であるが、環境粒子 m はランジュバン熱浴に接しており熱運動するが、調和ポテンシャルによって束縛されており、調和振動子と似た振る舞いをする。ここで、 $k = 5$ と仮定すれば、調和振動子の周期は $2\pi\sqrt{\frac{m}{k}}$ で表されるので、 $k = 5, m = 1$ の時、 $2\pi\sqrt{\frac{1}{5}} \simeq 2.81$ となる。これより、 $dt = 0.01$ とすれば、十分に環境粒子 m の挙動を観測できる。

γ' は、環境粒子の粘性抵抗で、速度の特徴的な緩和時間は $-\frac{m}{\gamma'}$ である。緩和時間が周期 $2\pi\sqrt{\frac{m}{k}}$ と同じオーダーになるように、ここでは $\gamma' = 1$ とする。

残るパラメーターは熱浴の温度 T であるが、力学的相互作用に周期ポテンシャル $\cos(\frac{2\pi}{L}(X - x))$ を採用しているので、ポテンシャルの深さは常に 2 である。微粒子 M は、様々な環境粒子 m と相互作用をくり返すという想定をしているので、温度 T はこの深さ 2 のポテンシャルを超えられるように設定したい。

ここで、熱浴の温度が T の時、系を緩和させると、微粒子 M の運動エネルギー $\frac{1}{2}M\langle V^2 \rangle$ は、等分配則から

$$\frac{1}{2}M\langle V^2 \rangle = \frac{1}{2}T \quad (3.20)$$

となる。ここで、 $k_B = 1$ としている。微粒子が十分に深さ 2 のポテンシャルを超えるためには、微粒子の運動エネルギーが、およそ

$$\frac{1}{2}M\langle V^2 \rangle \geq 2 \quad (3.21)$$

となる必要がある。つまり、熱浴の温度 T は

$$\frac{1}{2}M\langle V^2 \rangle = \frac{1}{2}T > 2 \quad (3.22)$$

$$T > 4 \quad (3.23)$$

とする必要がある。上記の既に設定したパラメーターで、 T を変えて微粒子 M の変位 X を測ると、図 11、図 12、図 13 が得られる。

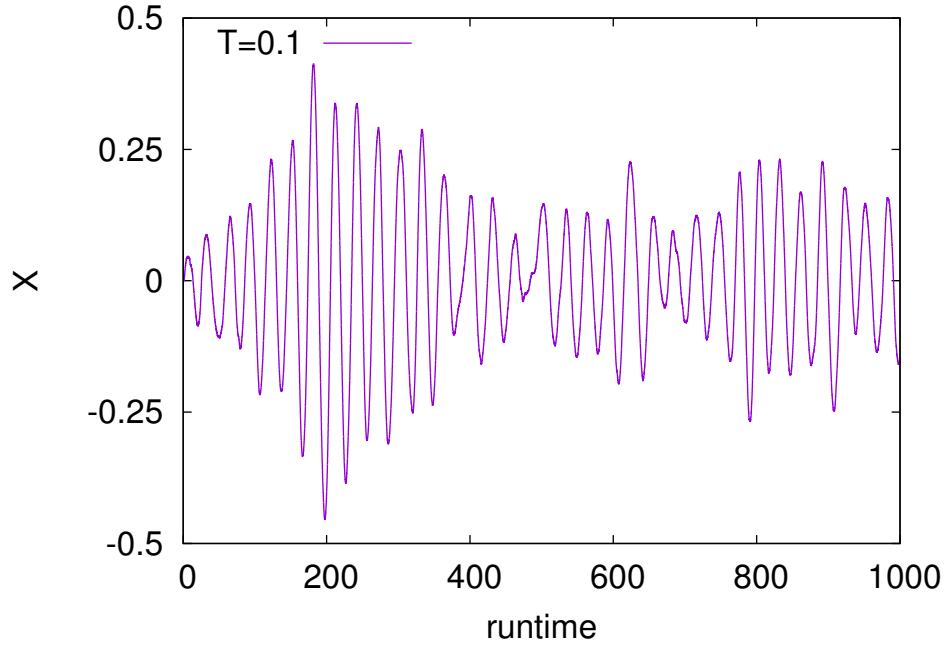


図 11 熱浴の温度 $T = 0.1$ の時の微粒子の変位 X 。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, k_B = 1, F = 0$ のパラメーターで、初期条件 $X_0 = 0, x_0 = 0, V_0 = 0, v_0 = 0$ として測定した結果。環境粒子 m は $L = 1$ の間隔で配置されているので、温度 $T = 0.1$ では微粒子は深さ 2 の $\cos$ ポテンシャルを超えられない様子が観察できる。

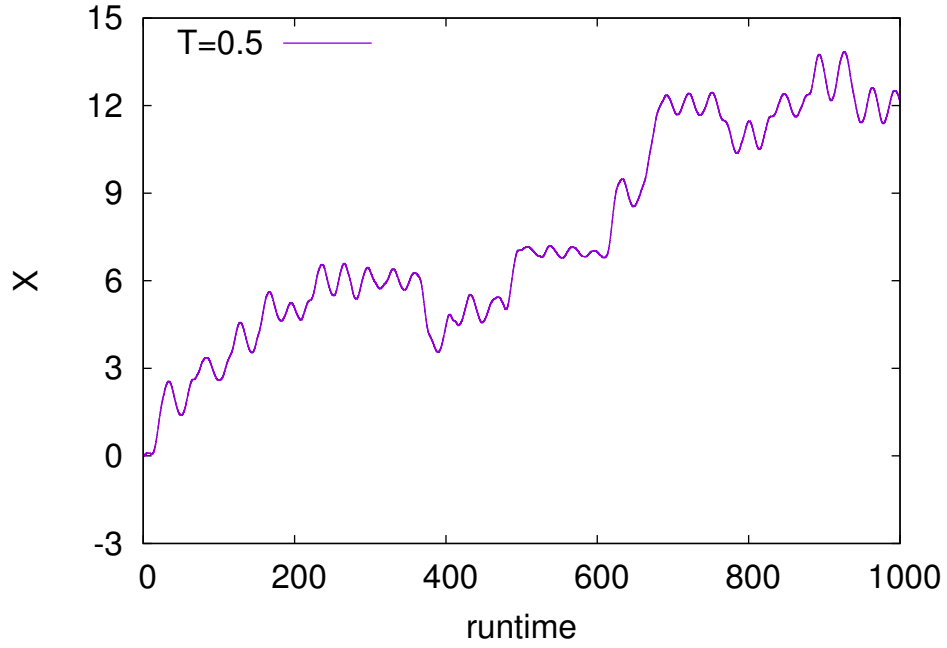


図 12 熱浴の温度 $T = 0.5$ の時の微粒子の変位 X 。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, k_B = 1, F = 0$ のパラメーターで、初期条件 $X_0 = 0, x_0 = 0, V_0 = 0, v_0 = 0$ として測定した結果。環境粒子 m は $L = 1$ の間隔で配置されているので、温度 $T = 0.5$ ならば、微粒子は深さ 2 の $\cos$ ポテンシャルを超えていく様子が観察できるが、かなり長い時間 (100 程度) 1 カ所に留まっている様子が観察できる。今回のシミュレーションでは、微粒子は次々の相互作用する環境粒子を変えていく事を想定しているので、温度 $T = 0.5$ はモデルとして適切でないパラメーターと言える。

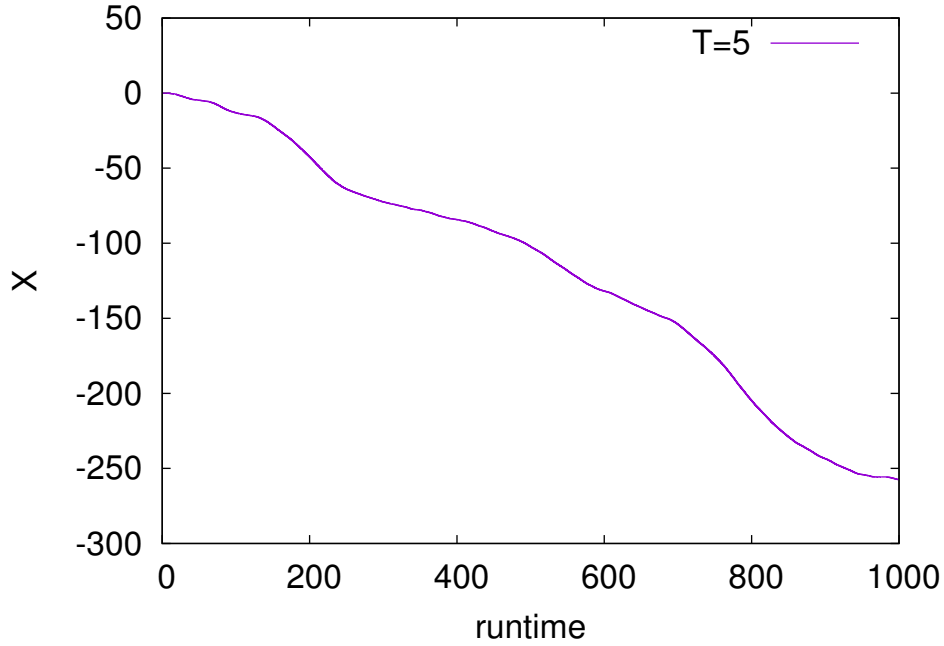


図 13 熱浴の温度 $T = 5$ の時の微粒子の変位 X 。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, k_B = 1, F = 0$ のパラメーターで、初期条件 $X_0 = 0, x_0 = 0, V_0 = 0, v_0 = 0$ として測定した結果。環境粒子 m は $L = 1$ の間隔で配置されているので、温度 $T = 5$ ならば、微粒子は深さ 2 の $\cos$ ポテンシャルを次々に超えていく様子が観察できる。

図 11 を見てみると、熱浴の温度 T が $T \geq 0.1$ の時は、微粒子の変位 X は $-0.5 \leq X \leq 0.5$ の範囲に収まっている。環境粒子 m の間隔 L は $L = 1$ としているので、微粒子 M は深さ 2 の $\cos$ ポテンシャルを超えられず、同じ環境粒子と相互作用し続けている様子が観察できる。微粒子 M は様々な環境粒子 m と相互作用することを想定しているので、 $T = 0.1$ はモデルのパラメーターの設定として妥当ではないことがわかる。

図 12 を見てみると、熱浴の温度が $T = 0.5$ の時は、微粒子の変位 X は $-0.5 \leq X \leq 0.5$ の範囲に収まっていないことが観察できる。しかし、かなり長い時間 (100 程度) 1 か所に留まっている様子も観察できる。今回のシミュレーションでは、こういった運動には注目せず、微粒子は次々の相互作用する環境粒子を変えていく事を想定しているので、温度 $T = 0.5$ はモデルとして適切でないパラメーターと言える。

図 13 を見てみると、熱浴の温度 T が $10 \leq T$ の時は、微粒子の変位 X は $-0.5 \leq X \leq 0.5$ の範囲に収まっていないことが観察できる。環境粒子 m の間隔 L は $L = 1$ としており、微粒子 M は深さ 2 の $\cos$ ポテンシャルを超え、微粒子 M は様々な環境粒子と次々に相互作用している様子が確認できる。これより、モデルとして妥当な温度 T のパラメーターは、 $M = 100$ の時 $5 \leq T$ とすれば良いことがわかる。

3.5 モデルの妥当性—熱平衡の確認

平衡状態では、分子運動論から、分子の運動エネルギー $\frac{1}{2}M\langle V^2 \rangle$ は、1 自由度あたり $\frac{1}{2}k_B T$ となることが知られている。ここで、運動論的温度 T_k を

$$T_k := M\langle (V - \langle V \rangle)^2 \rangle \quad (3.24)$$

と定義する。今回のシミュレーションでは $k_B = 1$ として扱っており、平衡状態でのブラウン運動の平均速度 $\langle V \rangle$ は 0 なので、十分な時間系を緩和させれば T_k は熱浴の温度 T と等しくなければならない。

$$\frac{1}{2}M\langle(V - \langle V \rangle)^2\rangle = \frac{1}{2}k_B T \quad (3.25)$$

$$\frac{1}{2}T_k = \frac{1}{2}T \quad (3.26)$$

$$T_k = T \quad (3.27)$$

図 14 は、 $M = 100, F = 0, T = 10$ の時の、横軸に緩和時間、縦軸にその時刻までで長時間平均した運動論的溫度 T_k を plot したものである。

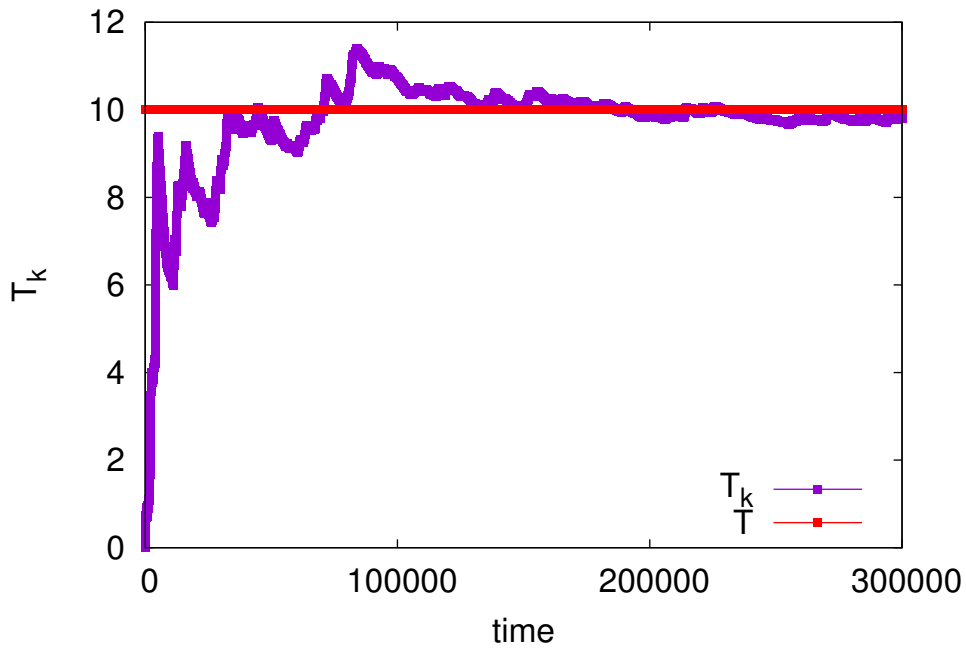


図 14 モデルの妥当性：等分配則の確認。図は、横軸に時間、縦軸に横軸の時間まで長時間平均した微粒子 M 運動論的溫度 T_k を plot したものである。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, F = 0$ 十分な時間系を緩和させれば、微粒子 M の運動論的溫度 T_k は熱浴の溫度 $T = 10$ と等しくなっていく（熱平衡）様子が見れる。

このように、十分な緩和時間をとれば、微粒子の運動論的溫度は熱浴の溫度と等しくなっていくこと（熱平衡）が確認できる。

4 平衡系

以下では、 $F = 0$ として、平衡系での微粒子の運動を見ていく。

平衡系では、微粒子の運動は線形ランジュバン方程式 (2.1) を満たすことがわかっている。前の章で記述した微粒子の運動方程式は、平衡系、つまり $F = 0$ の時

$$M\dot{V}(t) = -\frac{\partial H_{int}}{\partial X} \quad (4.1)$$

となるが、この運動方程式に従う運動を

$$M\dot{V}(t) = -\gamma V(t) + \sqrt{D}\xi(t) \quad (4.2)$$

という運動方程式に従っていると見ることはできるのだろうか。

一般に、微粒子の運動を粗視化した時間スケールで観察しなければ、ブラウン運動の性質を取り出すことはできないことが知られている。

しかし、私はこのことを知らなかったので、粗視化をせずに環境と同じ時間スケールで観察しても、式 (4.1) が式 (4.2) のように見ることができないか検討したが、結果的には環境と同じ時間スケールで観察しても、微粒子の運動からブラウン運動の性質を取り出すことはできなかった。(付録:粗視化の必要性 参照)

4.1 粗視化

粗視化とは、物事を粗っぽく見る事である。時間のスケールとは、ものを観察する時間の単位のこと、例えばてんとう虫の動きを観察するならば、じっと目を凝らしていないと動きを見逃してしまうので、時間のスケールは「秒」が適当であろう。しかし、盆栽を観察するには、盆栽の成長をじっとにらんで待っていても変化に気づくことはできない。盆栽であれば、観測する時間のスケールは「日」をつかうのが望ましい。「日」は「秒」の $3600 \times 24 = 86400$ 倍の時間スケールである。

微粒子は環境粒子に比べて非常に重く、動きの変化が非常にゆっくりなので、微粒子の運動を粗視化して観測しなければ、ブラウン運動の性質を取り出すことはできない。

粗視化とは、本研究では観測時間の間隔を長くすることをさす。(時間の粗視化)

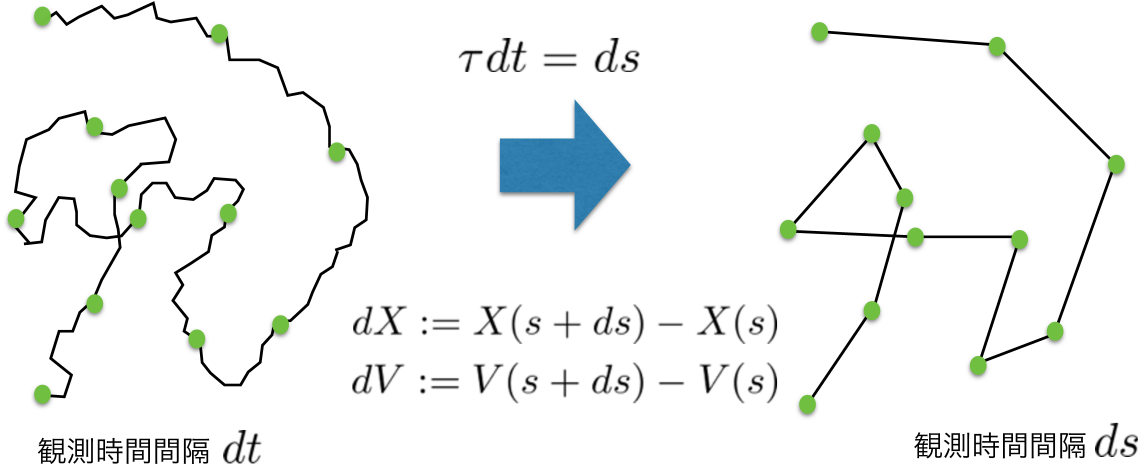


図 15 粗視化の概念図：図の左側の線は、微粒子の粗視化をしていない運動の軌跡である。この軌跡が観測されたとき、もし○のついた時のみ微粒子の運動を観測すれば、図の右側のような軌跡が得られる。左側が短い時間スケールで観察した微粒子 M の変位 X の軌跡、右側が長い時間スケールで観察した微粒子 M の変位 X の軌跡である。短い時間スケールが dt 、長い時間スケールが ds とし、時間スケールを dt から ds に長くすることによって、微粒子の運動を粗視化して見る。このとき、観測時間間隔の変化によって、 ds の間に变化する微粒子 M の変位 dX も $dX := X(s + ds) - X(s)$ と定義し直す。同様に微粒子の速度 V の変化も同様に $dV := V(s + ds) - V(s)$ とする。また、 dt と ds あいだに、 $\tau dt = ds$ となるような粗視化時間のパラメーター τ を導入する ($1 \leq \tau$)。 τ を変化させていって、微粒子 M の運動がどのように見えるか調べていく。

図 15 は、微粒子の運動の粗視化の概念図である。図 15 の左側のもによもよとした線が、微粒子を環境粒子と同じ時間スケールで観察した時の運動の軌跡である。この微粒子の運動を、粗視化した時間スケールでみる、つまり観測時間間隔を長くすると、運動はどのように見えるだろうか。図 (15) の微粒子の運動の軌跡において、もし○の時のみしか運動を観測しなかったとすれば、微粒子の運動の軌跡は図 (15) の右側のようにカクカクしたものなるはずだ。このように、運動を大雑把に見ることを、運動の粗視化という。

もとの時間スケールを dt とし、粗視化した時間スケールを ds で表す。二つの時間スケールの関係が $\tau dt = ds$ となるような粗視化パラメーター τ を導入する。 τ が 10 の時は、 dt を 10 回分で 1 回観測、 τ が 100 の時は dt が 100 回分で 1 回観測する。先ほどのてんとう虫と盆栽の例でいえば、 $\tau = 86400$ (dt =秒、 ds =日) であるまた、微粒子の変位の差は、環境粒子の時間スケールでは

$$dX = X(t + dt) - X(t) \quad (4.3)$$

であったが、粗視化した時間スケールでは、新たに

$$dX := X(s + ds) - X(s) \quad (4.4)$$

と定義する。速度の差においても、

$$dV = V(t + dt) - V(t) \quad (4.5)$$

から

$$dV := V(s + ds) - V(s) \quad (4.6)$$

と定義する。また、以降では粗視化した速度を

$$\tilde{V} := \frac{dX}{ds} \quad (4.7)$$

で表す。

もとのブラウン粒子の運動方程式は

$$M\dot{V}(t) = -\frac{\partial H_{int}}{\partial X} \quad (4.8)$$

であったが、これを粗視化した時間間隔で観察すれば

$$M \frac{dV}{ds} = -\gamma \frac{dX}{ds} + \sqrt{D}\xi(s) \quad (4.9)$$

というランジュバン方程式の形をした運動方程式に従っているように見えるはずである。この時、 dX や dV といった量は式 (3.6), 式 (3.5) の数値計算から得られるので、問題となるのは、抵抗係数 γ の値 と、揺動力 $\sqrt{D}\xi(s)$ を運動からどのように取り出し、決定するかである。

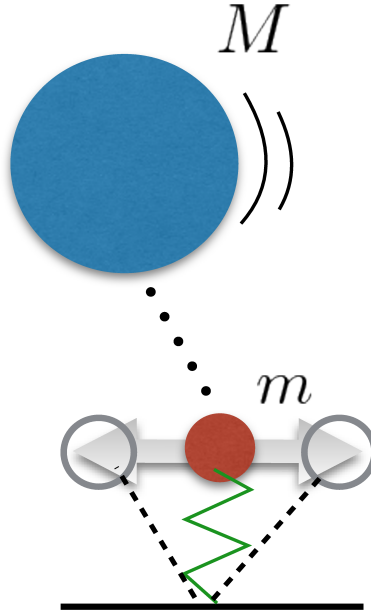


図 16 遅い運動と早い運動：微粒子の質量 M が環境粒子の質量 m に比べて非常に重い ($m \ll M$) ので、微粒子 M の運動は環境粒子 m の運動に比べてとても遅い。もとの微粒子 M の運動方程式は $M\dot{V}(t) = -\frac{\partial H_{int}}{\partial X}$ であるが、粗視化した時間スケール ds で運動を粗視化してみれば、微粒子 M の運動はランジュバン方程式 $M \frac{dV}{ds} = -\gamma \frac{dX}{ds} + \sqrt{D}\xi(s)$ に従っているように見えるはずである。

4.2 γ の決定法

抵抗係数 γ の値は、速度相関関数から決定する事ができる。相関関数とは、ある事象が別の事象に、どれだけの影響を及ぼしたかを表す関数である。たとえば、全く相関が無ければ0で、有限の数値ならばなんらかの相関があることを示している。時間変化する2つの系列 $x(t), y(t')$ の相関は次のように定義される。

$$C_{xy} := \langle (x(t) - \langle x(t) \rangle)(y(t') - \langle y(t') \rangle) \rangle \quad (4.10)$$

$$= \langle x(t)y(t') \rangle - \langle x(t) \rangle \langle y(t') \rangle \quad (4.11)$$

もし、2つの系列が同じものなら、

$$C_{xx} = \langle x(t)x(t') \rangle - \langle x(t) \rangle \langle x(t') \rangle \quad (4.12)$$

となる。これは自己相関関数と呼ばれている。特に $t = t'$ のとき、 C_{xx} は

$$C_{xx} = \langle x(t)^2 \rangle - \langle x(t) \rangle^2 \quad (4.13)$$

となり、 $x(t)$ の分散と等しい。(同時刻相関)

速度の相関関数は、2章で用いた、線形ランジュバン方程式を速度 $\tilde{V}(t)$ について解いた (2.7) 式

$$\tilde{V}(t) = \int_{-\infty}^t \frac{R(s)}{M} e^{-\frac{\gamma}{M}(t-s)} ds \quad (4.14)$$

を使って求める事ができる。 $\tilde{V}(t)\tilde{V}(t')$ は

$$\tilde{V}(t)\tilde{V}(t') = \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^{t'} \frac{R(s)R(s')}{M^2} e^{-\frac{\gamma}{M}(s+s')} ds ds' \quad (4.15)$$

となる。ここで、 $t \leq t'$ を仮定し、両辺に統計平均 $\langle \rangle$ をとると

$$\langle \tilde{V}(t)\tilde{V}(t') \rangle = \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^{t'} \frac{\langle R(s)R(s') \rangle}{M^2} e^{-\frac{\gamma}{M}(s+s')} ds ds' \quad (4.16)$$

$$= \frac{2\gamma k_B T}{M^2} \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^{t'} e^{-\frac{\gamma}{M}(s+s')} \delta(s-s') ds ds' \quad (4.17)$$

$$= \frac{2\gamma k_B T}{M^2} \int_{-\infty}^{t-t'} e^{-\frac{\gamma}{M}s} ds \quad (4.18)$$

$$= \frac{k_B T}{M} e^{-\frac{\gamma}{M}(t-t')} \quad (4.19)$$

となる。ここで、揺動散逸関係式 $\langle R(s)R(s') \rangle = 2\gamma k_B T \xi(s-s')$ を用いた。

ブラウン運動の速度を測り、数値計算から、速度相関関数を求めることも可能である。その結果を式 (4.19) と比較すると、その指数部分から粘性抵抗 γ の値を決定する事ができる。これより、

$$u := t - t' \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} \langle \tilde{V}(t)\tilde{V}(t') \rangle &:= C_{\tilde{V}}(t-t') \\ &= C_{\tilde{V}}(u) \end{aligned} \quad (4.21)$$

と定義し、速度相関関数を表すと、結果は図 17 を得る。

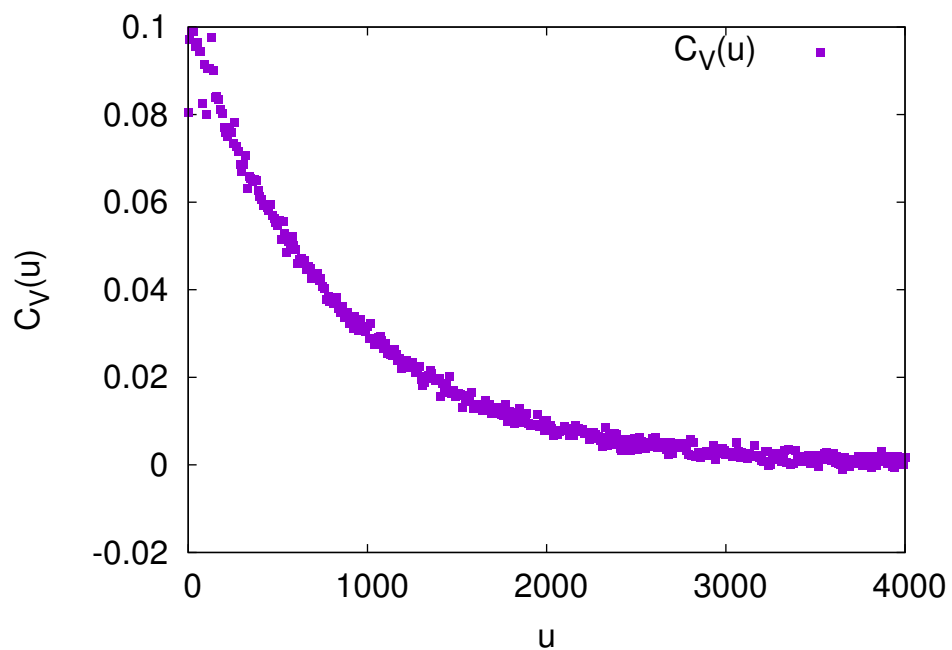


図 17 速度相関関数 $C_{\tilde{V}}(u)$ ($M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, F = 0, \tau = 1000$, サンプル数 50000)。このとき、速度は $\tau = 1000$ で粗視化した速度 $\tilde{V} = \frac{dX}{ds}$ である。 $u = 0$ の時、グラフは $\frac{k_B T}{M} = \frac{10}{100} = 0.1$ を通っており、指数関数に従って減少していている。

さらに、図 17 のグラフの縦軸を $\log$ でとると、図 18 のようになる。

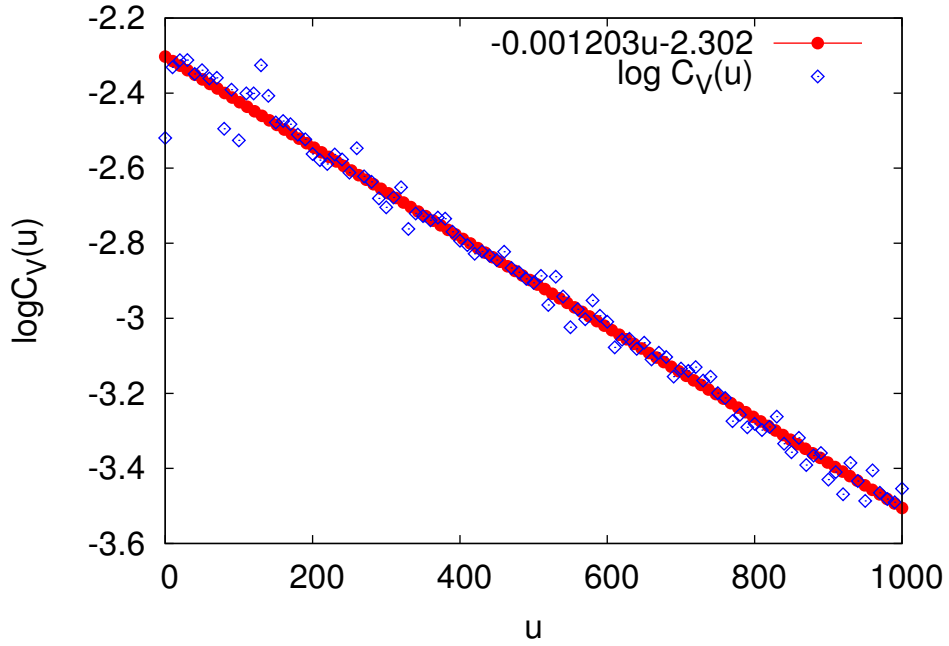


図 18 $\log$ をとった速度相関関数：図 17 のグラフを、縦軸の値に $\log$ をとって plot したもの。このデータが、関数 $y = ax + \log(\frac{k_B T}{M})$ と仮定し、 $0 \leq u \leq 1000$ までの範囲のデータから、最小自乗法を用いて直線の傾きのパラメーター a を求めると、グラフ上の直線 $\log C_V(u) = -0.0012031u - 2.303$ が得られる。この傾きが $-\frac{\gamma}{M}$ と等しいので、 γ の値を速度相関関数 $C_V(u)$ の指数部分から得ることができる。

図 18 の直線の傾きは、式 (4.19) から $-\frac{\gamma}{M}$ なので、この数値から抵抗係数 γ の値を決定することができる。
($M = 100$ なので、図 18 のグラフでは $\gamma = 0.12031$)

$M = 10, 100$ の時の各 τ での γ の値をまとめたものが、表 1 である。
速度相関関数から求めた γ の値は、粗視化時間のパラメーター τ に依らないことわかる。

また γ の決定法にはもう一つの方法がある。線形応答領域での力の釣り合いの式を利用する方法である。
微粒子を外場 F で定常的に駆動し続けると、定常流をなす。この時の図 19 から、平均速度 $\langle \tilde{V} \rangle$ と外場 F には、 F が非常に小さい範囲では以下の関係が成り立つ。

$$F = \gamma \langle \tilde{V} \rangle \quad (4.22)$$

質量 M	τ	γ
10	1	0.110
10	50	0.110
10	100	0.111
10	1000	0.112
10	5000	0.111
10	10000	0.102
100	1	0.127
100	50	0.120
100	100	0.120
100	500	0.121
100	1000	0.121
100	5000	0.120
100	10000	0.121

表 1 粗視化パラメーター τ と、図 18 の速度相関関数から求めた γ の関係。 $m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, sample$ 数 50000, $F = 0$ 。 τ の大きさが変化しても、 γ の値は変化しないことがわかる。

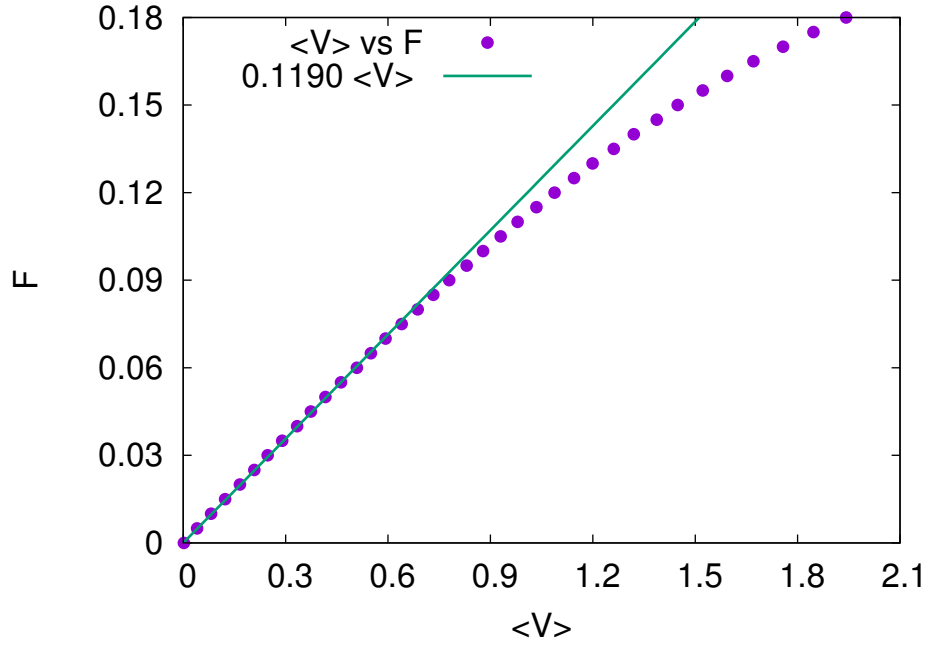


図 19 外場 F と平均速度 $\langle \tilde{V} \rangle$ の関係。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 10 \leq F \leq 0.18, sample$ 数 10000000, $\tau = 1000$ 。直線は $\langle \tilde{V} \rangle$ が $0 \leq \langle \tilde{V} \rangle \leq 0.6$ の範囲で、原点を通る近似直線を $y = a \times x$ として最小自乗法を用いて直線を求めたもの。この直線の傾きが γ となる。グラフでは $\gamma = 0.1190$

図 19 から、 F が十分小さい範囲では、 F と $\langle \tilde{V} \rangle$ は比例関係なので、この直線の傾きから γ の値を得られる。しかし、この方法はあくまで比較のためであって、平衡系での正確な γ の値を求める方法としては、速度相関関数の指数部分から決定する方が精度が良い。理由は、直線で近似する際に F のどの範囲まで直線とみなすかで、値が変わってくることと（線形応答領域になる F がどこまでか曖昧）、 F が非常に小さい範囲ほど $\langle \tilde{V} \rangle$ も非常に小さくなるため、測定誤差の影響が大きくなるからである。線形応答領域で正確な γ の値を求めたいなら、速度相関を用いる方法が最適であると言える。

4.3 揺動力の決定法

次に、ランジュバン方程式にとって最も重要な、揺動力の決定を行う。平衡系での揺動力の決定には、強力な条件がある。揺動散逸定理 $D = 2\gamma k_B T$ が成り立っていることだ。

揺動力の決定において、粗視化したブラウン運動は、伊藤のランジュバン方程式に従っていると仮定する。

4.4 伊藤のランジュバン方程式

ランジュバン方程式

$$M\dot{V}(t) = -\gamma\tilde{V}(t) + \sqrt{2\gamma k_B T} \cdot \xi(t) \quad (4.23)$$

$$\langle \xi(t) \rangle = 0 \quad (4.24)$$

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t - t') \quad (4.25)$$

は、実は数学的には異常な微分方程式である。

そもそも「微分可能」の条件は

1. 関数がなめらかであること
2. 関数が連続であること

の二つの条件を満たして、初めて「微分可能」と言えるのだった。

ここで、ランジュバン方程式の中身を見てみると、 $\xi(t)$ という関数があるが、これをある時間ステップごとにみてみると図 (20) のようになる、

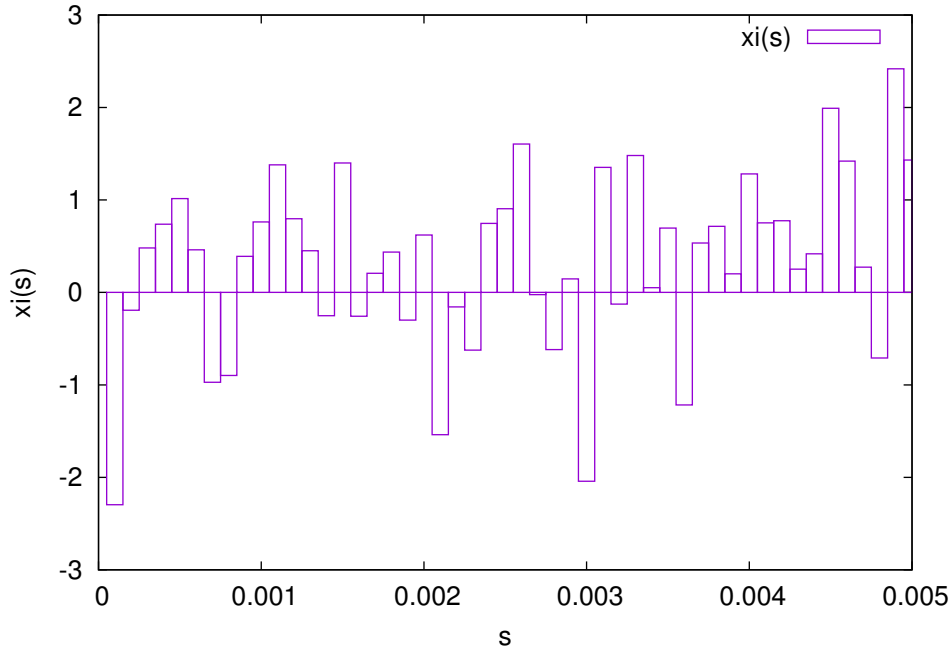


図 20 $\xi(s)$ の時系列の例。 $ds=0.0001$ 。不連続性が現れている。

間違いなく、「なめらか」ではないし、それどころか不連続である。

観測時間間隔をもっと細かくしていけば（ちょうど画像の解像度を増していけば鮮明になっていくように）なめらかになるのでは？と思うかもしれないが、実は $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t-t')$ という条件を課している限り、この関数がなめらかになることはないのである。

ランジュバン方程式は、普通の微分方程式ではなく、「確率微分方程式」と呼ばれる。確率微分方程式は、解となる数値を確定することはできず、解自信にも何らかの確率変数が含まれる。確率微分方程式は数学の 1 分野を築くほどの深く大きなテーマであるが、もとはブラウン運動の研究から生まれたものである。

一般に、確率微分方程式は、以下のような離散方程式としてとらえる。

$$dx_t = a(x_t, t)dt + b(x_t, t) \cdot dB_t \quad (4.26)$$

$\cdot$ は伊藤積と呼ばれ、 B_t は後に述べるウィーナー過程である。

式 (4.26) が、伊藤のランジュバン方程式と呼ばれる離散方程式である。もともとの線形ランジュバン方程式

$$M\dot{V}(t) = -\gamma\tilde{V}(t) + \sqrt{2\gamma k_B T} \cdot \xi(t) \quad (4.27)$$

との対応を試みる。式 (4.27) に t から dt にかけて積分すると（離散化）

$$\int_t^{t+dt} M\dot{V}(t)dt = \int_t^{t+dt} -\gamma\tilde{V}(t)dt + \int_t^{t+dt} \sqrt{2\gamma k_B T} \cdot \xi(t)dt \quad (4.28)$$

$$M(\tilde{V}(t+dt) - \tilde{V}(t)) = -\gamma((X(t+dt) - X(t)) + \int_t^{t+dt} \sqrt{2\gamma k_B T} \cdot \xi(t)dt \quad (4.29)$$

ここで

$$d\tilde{V} = \tilde{V}(t+dt) - \tilde{V}(t) \quad (4.30)$$

$$\tilde{V}dt = X(t+dt) - X(t) \quad (4.31)$$

なので

$$Md\tilde{V} = -\gamma\tilde{V}dt + \int_t^{t+dt} \sqrt{2\gamma k_B T} \cdot \xi(t)dt \quad (4.32)$$

となる。伊藤のランジュバン方程式との対応は、それぞれ

$$Md\tilde{V} = dx_t \quad (4.33)$$

$$-\gamma\tilde{V}dt = a(x_t, t)dt \quad (4.34)$$

$$\int_t^{t+dt} \sqrt{2\gamma k_B T} \xi(t)dt = b(x_t, t) \cdot dB_t \quad (4.35)$$

である。要するに、よくわからない性質の $\int_t^{t+dt} \sqrt{2\gamma k_B T} \xi(t)dt$ 部分を、 $b(x_t, t) \cdot dB_t$ という部分に突っ込んだものとなっている。

ここで、具体的に $b(x_t, t)$ や dB_t の性質を見ていく。 B_t は、ウィーナー過程と呼ばれているものである。

4.5 ウィーナー過程

ウィーナー過程は、ブラウン運動の研究から生まれたものである。ウィーナー過程 B_t のイメージとしては、図 22、図 23 のようなブラウン運動の変位の軌跡のようなものである。また、図 22 の一部を拡大したものが図 23 である。

ウィーナー過程 B_t は

$$dB_t := \int_t^{t+dt} \xi(s)ds \quad (4.36)$$

$$B_t - B_0 = \int_0^t \xi(s)ds \quad (4.37)$$

で表される。図 20 で表されるような関数 $\xi(s)$ において、時間 dt で和をとったものが dB_t である (図 21)。さらに、 dB_t の時刻 t までの積分値が B_t である (図 22)。図 22 の一部を拡大したものが図 23 である。時間軸を拡大しても、ブラウン運動の軌跡のような連続的な動きをしていることがわかる。

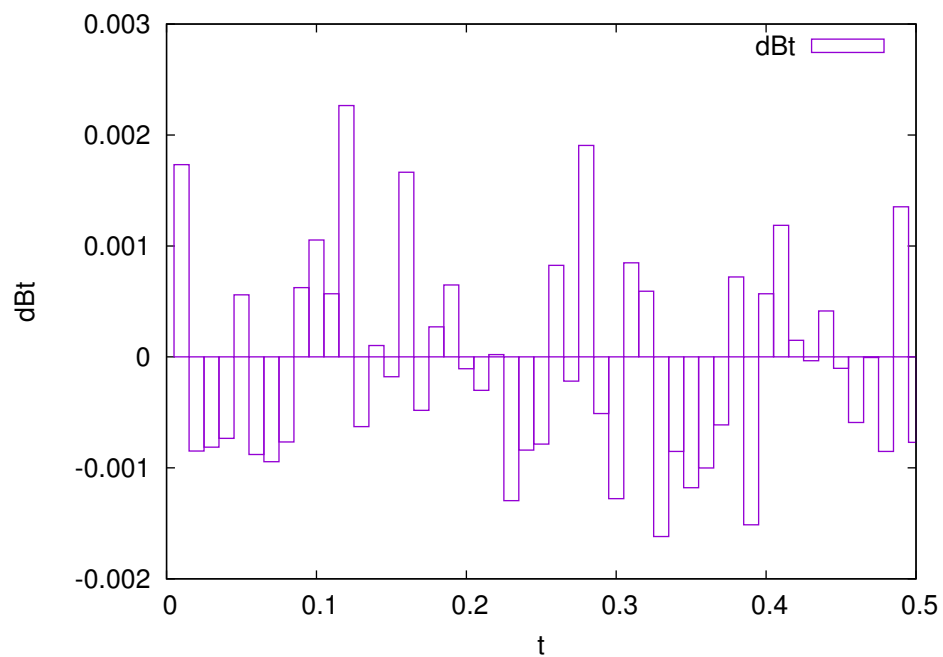


図 21 dB_t の例。図 20 の $\xi(s)$ を、時間 $dt = 0.01$ で和をとったもの。離散的である。

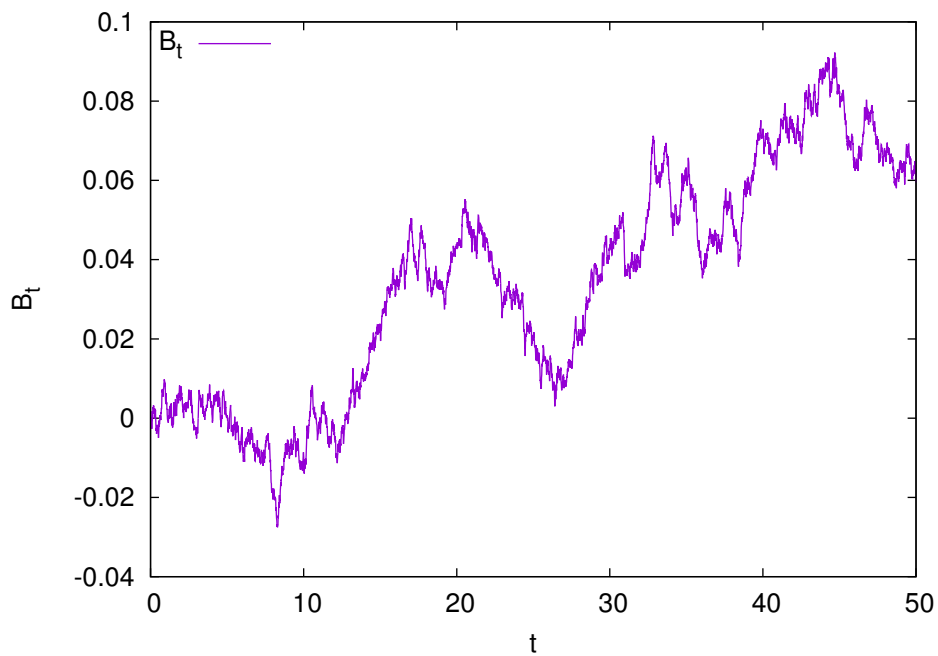


図 22 ウィーナー過程 B_t の例。図 21 の dB_t の和をとったもの。ブラウン運動の軌跡のような動きをしており、 dB_t と比較すると連続である様子がわかる。

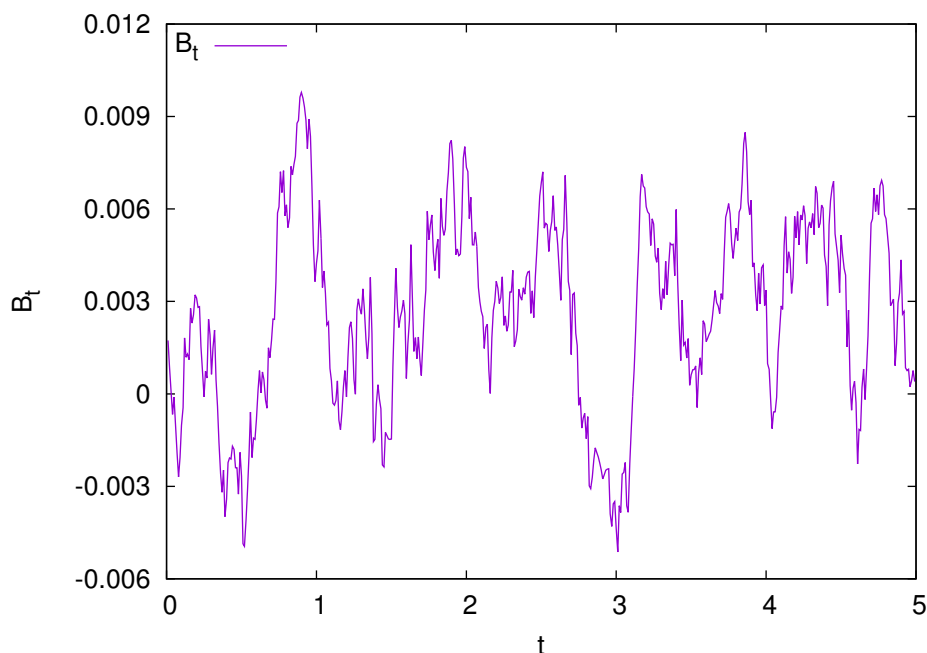


図 23 図 22 の $0 \leq t \leq 0.5$ までの範囲を拡大したウィーナー過程 B_t の例。時間軸を拡大しても、ブラウン運動の軌跡のような連続的な動きをしている。

ウィーナー過程の重要な性質は、「微分不可能であるが連続である」ということである。この性質を課すことによって、扱いにくい $\xi(t)$ という量を扱いやすい dB_t という量に変えている。

ここで、伊藤のランジュバン方程式に話を戻そう。伊藤のランジュバン方程式 (4.26) 右辺には dt がかかる項と dB_t がかかる項があるが、 dB_t は微小量 dt に対してどれくらいの大きさなのだろうか？

$dB_t = dt^\alpha$ となるような定数 α を考える。この α の大きさによって、微小量であるか微小量でないかが決定する。テイラー展開を思い出してほしい。例えば、微小量 $dt = 0.1$ で、 $\alpha = 2$ であれば、 $dB_t = dt^2 = 0.01$ となり dt に対して十分小さいとみなして、無視できるのだった。しかし、 $0 \leq \alpha \leq 1$ となるような場合、 dB_t の項は dt に対して微小量とみなせないで、無視する事ができなくなり、離散方程式に入れてやらねばならなくなる。 $\alpha \leq 0$ となる時は、今度は dt が dB_t に対して無視できる微小量となってしまう。

では、果たして dB_t は dt に対してどれくらいのオーダーなのだろうか？先に答えを述べておくと、 $\alpha = \frac{1}{2}$ のオーダーになる。つまり、微小量ではないのだ。伊藤のランジュバン方程式は、必ず dt と dB_t の二つの項が必要不可欠。

その理由をざっくりと説明すると、もともと dB_t の定義は

$$dB_t := \int_t^{t+dt} \xi(s) ds \quad (4.38)$$

であった。ここで、 dB_t の 2 乗は

$$(dB_t)^2 = \left(\int_t^{t+dt} \xi(s) ds \right)^2 \quad (4.39)$$

$$= \int_t^{t+dt} \int_t^{t+dt} \xi(s) \xi(s') ds ds' \quad (4.40)$$

となるが、ここで「 dt は微小量ではあるが、 dt の間に現れる $\xi(t)$ は非常に多岐にわたっていて、時間平均と統計平均が同じ意味を持つ」（専門的には、「統計性を保っている」と言う）とみなすと、

$$\int_t^{t+dt} \int_t^{t+dt} \xi(s) \xi(s') ds ds' \simeq \int_t^{t+dt} \int_t^{t+dt} \langle \xi(s) \xi(s') \rangle ds ds' \quad (4.41)$$

$$= \int_t^{t+dt} \int_t^{t+dt} \delta(t - t') ds ds' \quad (4.42)$$

$$= \int_t^{t+dt} ds \quad (4.43)$$

$$= dt \quad (4.44)$$

となる。式 (4.41) において、時間平均を統計平均に置き換えている。これより

$$(dB_t)^2 = dt \quad (4.45)$$

$$dB_t = dt^{\frac{1}{2}} \quad (4.46)$$

となり、 $\alpha = \frac{1}{2}$ だとわかる。

これより、ランジュバン方程式は伊藤のランジュバン方程式を使って

$$Md\tilde{V} = -\gamma\tilde{V}ds + \sqrt{2\gamma k_B T} \cdot dB_s \quad (4.47)$$

と書けることがわかる。

4.6 マルコフ性を満たす粗視化時間

伊藤のランジュバン方程式

$$Md\tilde{V} = -\gamma\tilde{V}ds + \sqrt{D} \cdot dB_s \quad (4.48)$$

を用いて、揺動力 $R(s)$ を

$$R(s) := \sqrt{D} \cdot \frac{dB_s}{ds} = \frac{Md\tilde{V} + \gamma\tilde{V}ds}{\sqrt{ds}} \quad (4.49)$$

と定義する。 $(dB_s = (ds)^{-\frac{1}{2}}$ を用いた)

揺動力の性質の一つに、以下の式がある。

$$\langle R(s)R(s') \rangle = D\delta(s - s') \quad (4.50)$$

これは、揺動力の相関関数がデルタ関数になっている事を表している。これは、相関関数が自己相関のみしか残らない、つまり、過去の揺動力は、これから決まる揺動力とは全く関係のないことを示している。この性質をマルコフ性という。

揺動力の測定方法を定義したが、この方法で抜き出した揺動力がマルコフ過程を満たすような時間スケールで観測してやらなければ、揺動力の性質を満たさなくなってしまう。

ある時刻 s における揺動力を、式 (4.49) で定義し、揺動力 $R(s)$ の相関関数 C_R を、以下のように定義する。

$$C_R(s - s') = \langle R(s)R(s') \rangle - \langle R(s) \rangle \langle R(s') \rangle = \left\langle \frac{Md\tilde{V}(s) + \gamma\tilde{V}(s)ds}{\sqrt{ds}} \cdot \frac{Md\tilde{V}(s') + \gamma\tilde{V}(s')ds}{\sqrt{ds}} \right\rangle \quad (4.51)$$

ここで、 $\langle R(s) \rangle = \langle R(s') \rangle = 0$ としている。

ここで $ds = \tau dt$ の関係があった事を思い出してほしい。粗視化時間のパラメーター τ によって、 ds の大きさは変化するのであった。これより、揺動力の相関がマルコフ性を満たす、つまり $C_R(s - s') = \langle R(s)R(s') \rangle = D\delta(s - s')$ を満たすような、粗視化時間のパラメーター τ を見つけていく。

τ を変化させて $C_R(s - s')$ の値を測ると、結果は図 24 のようになった。横軸がある $s - s'$ の step 数、縦軸が揺動力の相関である。

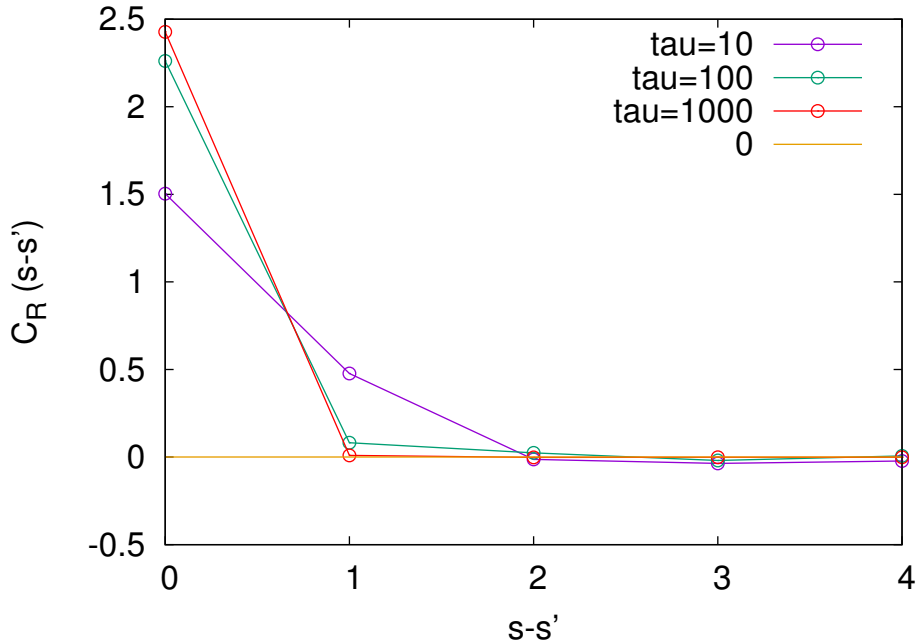


図 24 $\tau = 10, 100, 1000$ の時の揺動力 $R(s)$ の相関関数 $C_R(s)$ 。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, F = 0$ 粗視化パラメータ τ の大きさによって、マルコフ過程を満たすかどうか変わる。図では、 $\tau = 10$ の時は揺動力 $R(s)$ の相関 $C_R(s)$ が明らかに残ってしまっている。 $\tau = 100$ でも、わずかながら $s - s' = 1$ の時に $C_R(1) = 0$ となっていない。しかし、 $\tau = 1000$ であれば $C_R(1) \simeq 0$ となるので、マルコフ性を十分に満たしている。

τ を変化させて測った三つの揺動力の相関を見てみると $\tau = 10, \tau = 100$ の時のグラフでは、 $s - s'$ が 0 の

時以外 ($s - s'$ が 1 や 2 の時) でも有限の値が残ってしまっている。これは、マルコフ性を満たしていない。一方、 $\tau = 1000$ のグラフでは、揺動力の相関が 0 以外ではほぼ完全に消えている。これは、マルコフ性 $\langle R(t)R(t') \rangle = D\delta(t - t')$ を満たしている。

また、揺動力の同時刻相関 $C_R(0)$ と粗視化時間のパラメーター τ のグラフは図 25 のようになった。

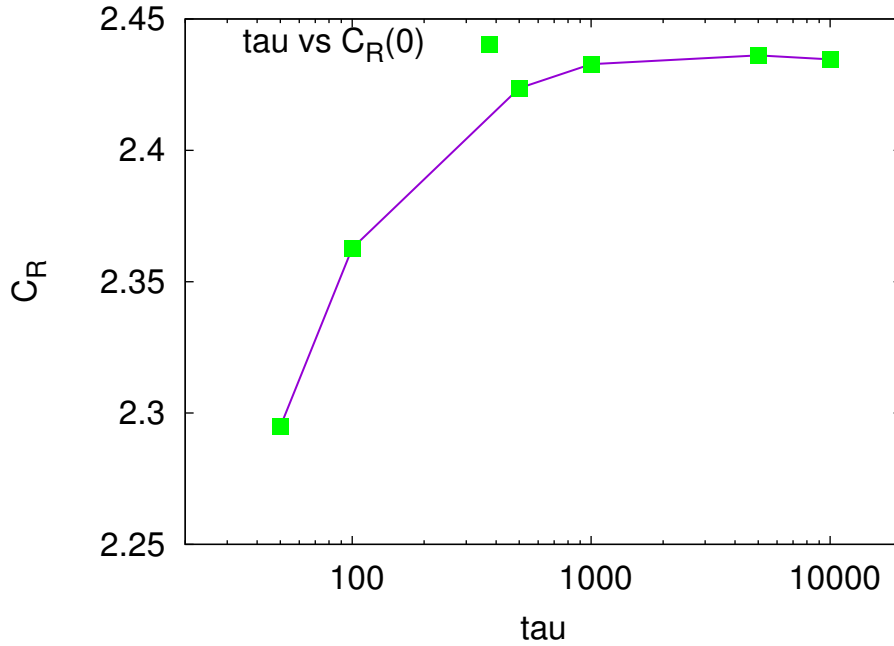


図 25 粗視化パラメーター τ と式 (4.49) で定義された 揺動力 $R(s)$ の同時刻相関 $C_r(0)$ の関係。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, F = 0, sample$ 数 100000000。 $1000 \leq \tau$ では、同時刻相関の値は変化しないことが分かる。これは、 $1000 \leq \tau$ ならば揺動力の相関関数が図 24 において $C_R(1) = 0$ となることを表している。

図 (25) を見てみると、 $\tau = 1000$ 以降では数値が安定している。これは、 $\tau \leq 1000$ であれば揺動力はマルコフ過程を満たしている事を表している。これより、 $\tau = 1000$ を採用し、今後は $ds = 1000dt$ として、揺動力を抜き出していく。

4.7 揺動散逸定理を満たす γ を探す

マルコフ過程の条件付けを満たしたところで、揺動散逸定理へと進めていく。
系が平衡状態であれば、 D の値は $2\gamma k_B T$ となることがわかっているのだった。(式 (2.14 参照))

伊藤のランジュバン方程式の性質をふまえ、平衡状態のランジュバン方程式

$$M \frac{d\tilde{V}}{ds} = -\gamma \frac{dX}{ds} + \sqrt{D} \xi(s) \quad (4.52)$$

を離散系に書き換え

$$M d\tilde{V} = -\gamma \tilde{V} ds + \sqrt{D} \cdot dB_t \quad (4.53)$$

とする。揺動力の大きさにあたるのは、式 (4.53) の右辺第 2 項の D 部分なので、 D の大きさを求めたい。
式 (4.53) を、以下のように式変形する

$$Md\tilde{V} + \gamma\tilde{V}ds = \sqrt{D} \cdot dB_t \quad (4.54)$$

ここで、両辺を 2 乗すると

$$(Md\tilde{V} + \gamma\tilde{V}ds)^2 = (\sqrt{D} \cdot dB_t)^2 \quad (4.55)$$

$$(Md\tilde{V} + \gamma\tilde{V}ds)^2 = D \cdot dB_t^2 \quad (4.56)$$

さらに、両辺に統計平均 $\langle \rangle$ をとると

$$\langle (Md\tilde{V} + \gamma\tilde{V}ds)^2 \rangle = \langle D \cdot dB_s^2 \rangle \quad (4.57)$$

$$\langle (Md\tilde{V} + \gamma\tilde{V}ds)^2 \rangle = D \cdot \langle dB_s^2 \rangle \quad (4.58)$$

$$\langle (Md\tilde{V} + \gamma\tilde{V}ds)^2 \rangle = Dds \quad (4.59)$$

$$\frac{\langle (Md\tilde{V} + \gamma\tilde{V}ds)^2 \rangle}{ds} = D \quad (4.60)$$

となる。式 (4.60) の左辺の量を見てみると、左辺の量を入力する γ の値を変化させて測れば、ある γ に対応する D の値を決めることができる。ここで、式 (4.60) の左辺の量は、入力する γ の値によって変化する量であるので、これを新たに $D(\gamma)$ と定義する。

$$D(\gamma) := \frac{\langle (Md\tilde{V} + \gamma\tilde{V}ds)^2 \rangle}{ds} \quad (4.61)$$

この $D(\gamma)$ が $D(\gamma) = 2\gamma k_B T$ となる時の γ の値は、揺動散逸定理を満たす γ である。この γ の値を求める。
式 (4.61) の右辺を展開して整理すると

$$D(\gamma) := \frac{1}{ds} \langle (M^2 d\tilde{V}^2 + 2M\gamma\tilde{V}d\tilde{V}ds + \gamma^2\tilde{V}^2 ds^2) \rangle \quad (4.62)$$

$$= \frac{1}{ds} (M^2 \langle d\tilde{V}^2 \rangle + 2M\gamma \langle \tilde{V}d\tilde{V} \rangle ds + \gamma^2 \langle \tilde{V}^2 \rangle ds^2) \quad (4.63)$$

$$= \frac{1}{ds} M^2 \langle d\tilde{V}^2 \rangle + 2M\gamma \langle \tilde{V}d\tilde{V} \rangle + \gamma^2 \langle \tilde{V}^2 \rangle ds \quad (4.64)$$

となる。式 (4.64) において、 M, ds は固定されたパラメータで、 γ は変数である。 $\langle d\tilde{V}^2 \rangle, \langle \tilde{V}d\tilde{V} \rangle, \langle \tilde{V}^2 \rangle$ の数値は測定可能な量なので、式 (4.64) の計算から $D(\gamma)$ を算出することができる。 $\tau = 1000$ という条件のもと、 γ を変数として $D(\gamma)$ の値を測ると、図 26 のようになった。また、揺動散逸定理は $D = 2\gamma k_B T$ として与えられるので、図 26 には同時に $D = 2\gamma k_B T$ を plot した。

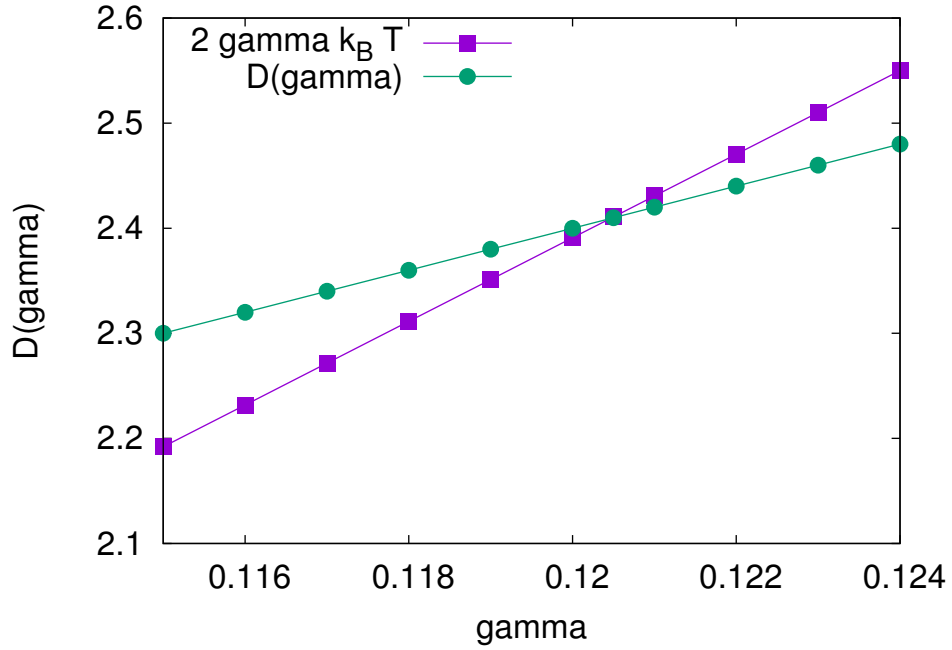


図 26 ある γ の時の、式 (4.64) から算出された $D(\gamma)$ の値と $2\gamma k_B T$ の値。横軸に変化させた γ の値を、縦軸に $D(\gamma)$ の値をとったもの。比較として、横軸の γ の値から算出される $2\gamma k_B T$ の値も同時に plot している。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, F = 0, sample$ 数 100000000, $\langle d\tilde{V}^2 \rangle = 0.002416, \langle \tilde{V} d\tilde{V} \rangle = -0.000297, \langle \tilde{V}^2 \rangle = 0.100089, \tau = 1000$ 。 $ds = \tau \cdot dt = 10$ となる。 $\gamma = 0.12046$ で、2 つの値がほぼ一致する。

グラフの交点は、 $D = 2\gamma k_B T$ となっている点である。この時の γ が、平衡系のランジュバン方程式が $D = 2\gamma k_B T$ を満たす γ である。数値をみてみると、 $\gamma = 0.12046$ となっている。これは、速度相関から求めた $\gamma = 0.1203$ とかなり近いことがわかる。

以上の結果から、平衡系では、線形ランジュバン方程式を仮定し、速度相関関数から γ の値を決定することができ、伊藤のランジュバン方程式の式変形から、揺動力を抜き出し、揺動力の大きさ D を決定することができることがわかった。非平衡定常状態のブラウン運動でも、同様の方法を使って、微粒子の粗視化した運動が満たすランジュバン方程式を決定する事ができる。

5 非平衡系

ここから、非平衡系でのランジュバン方程式の議論に移る。

5.1 非線形ランジュバン方程式の仮定

微粒子を外場 F で定常的に駆動し続けると、微粒子は非平衡定常状態となる。このとき、外場 F と定常速度 $\langle \tilde{V} \rangle$ の関係は、図 27 のようになる。

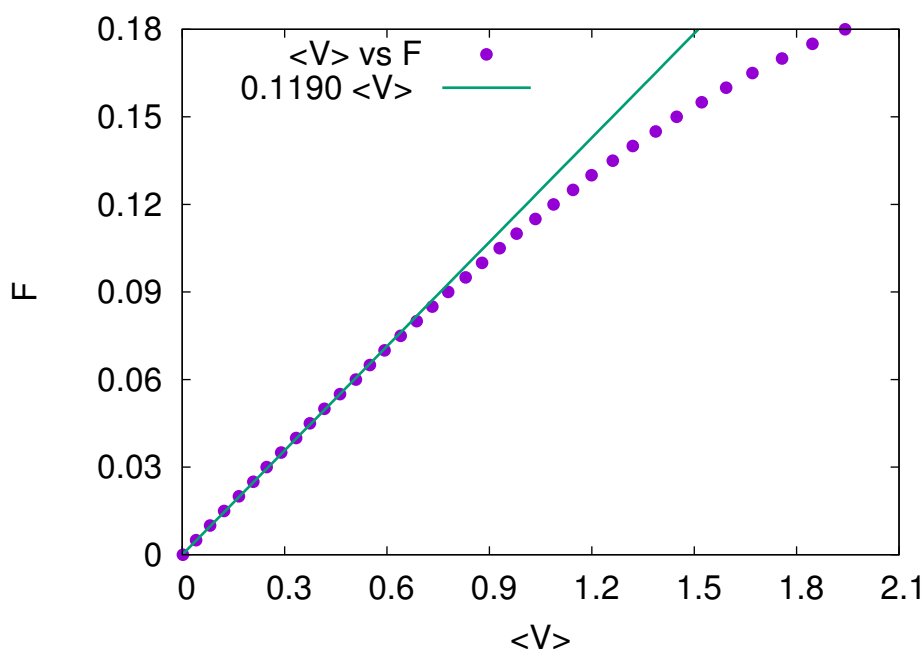


図 27 外場 F と定常速度 $\langle \tilde{V} \rangle$ 。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 10 \leq F \leq 0.18$, sample 数 10000000, $\tau = 1000$ 。直線は $\langle \tilde{V} \rangle$ が $0 \leq \langle \tilde{V} \rangle \leq 0.6$ の範囲で、原点を通る近似直線を $y = ax$ として最小自乗法を用いて直線を求めたもの。外場 F が小さい範囲では、 F と $\langle \tilde{V} \rangle$ には比例関係 $F = \gamma \langle \tilde{V} \rangle$ (γ は定数) が成り立つが、 F が大きくなってくると比例関係は崩れる。ここで、 γ は速度のべき乗の関数 $\gamma(\tilde{V}) = \gamma_0 + \gamma_2 \tilde{V}^2 + \gamma_4 \tilde{V}^4 + \dots$ であると仮定すると、外場 F が大きくなり、速度 $\tilde{V}$ が大きくなっても、そのぶんを $\gamma_2 \tilde{V}^2 + \gamma_4 \tilde{V}^4 + \dots$ の部分が補ってくれるので $F = \langle \gamma(\tilde{V}) \tilde{V} \rangle$ の関係は満たされる。

外場 F が大きくなるに従って、外場 F と平均速度 $\langle \tilde{V} \rangle$ の比例関係が崩れているのがわかる。外場の大きさによらず、線形応答領域でも非線形応答領域でも対応できる γ はどのように決めればよいだろうか？
ここでは、 γ は速度 $\tilde{V}$ のべき乗の関数になっていると過程する。つまり

$$\gamma(\tilde{V}) = \gamma_0 + \gamma_1 \tilde{V} + \gamma_2 \tilde{V}^2 + \gamma_3 \tilde{V}^3 \dots \quad (5.1)$$

という形を想定する。こうすれば、 $\langle \tilde{V} \rangle$ が小さい範囲 (線形応答領域) では $\gamma(\tilde{V})$ の速度のべき乗の項は微小量

なので、 $\gamma(\tilde{V}) = \gamma_0$ (定数) となるし、 $\langle \tilde{V} \rangle$ が大きい範囲（非線形応答領域）では速度のべき乗の項は徐々に無視できなくなるので、 $\gamma(\tilde{V}) = \gamma_0 + \gamma_1 \tilde{V} + \gamma_2 \tilde{V}^2 + \gamma_3 \tilde{V}^3 \dots$ としてやれば、このズレを表現できる。

また、ここで揺動力の係数 D も、新たに $D(\tilde{V})$ と書き直し、

$$D(\tilde{V}) = D_0 + D_1 \tilde{V} + D_2 \tilde{V}^2 + D_3 \tilde{V}^3 \dots \quad (5.2)$$

という形になっていると仮定する。これは、平衡状態では、揺動力の大きさ D の中身が $2\gamma k_B T$ となっていたことを思い出してほしい。拡散係数 D と抵抗係数 γ には密接な関係があり、 D の中身である γ が $\tilde{V}$ の関数ならば、 D も $\tilde{V}$ の関数と仮定するのが自然であろう。

以上を踏まえ、求めたい非線形ランジュバン方程式は

$$M\dot{V} = -\gamma(\tilde{V})\tilde{V} + F + \sqrt{D(\tilde{V})} \cdot \xi(t) \quad (5.3)$$

$$\gamma(\tilde{V}) = \gamma_0 + \gamma_1 \tilde{V} + \gamma_2 \tilde{V}^2 + \gamma_3 \tilde{V}^3 \dots \quad (5.4)$$

$$D(\tilde{V}) = D_0 + D_1 \tilde{V} + D_2 \tilde{V}^2 + D_3 \tilde{V}^3 \dots \quad (5.5)$$

となる。非線形ランジュバン式 (5.3) を求める、ということは、平衡の時と同様、 $\gamma(\tilde{V})$ と $D(\tilde{V})$ を求めることである。今回は、それぞれが $\tilde{V}$ の関数になっているので、それぞれの係数 $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \dots, D_0, D_1, D_2, \dots$ を決定していくことになる。

基本的な流れは平衡状において線形ランジュバン方程式を求める時と大きく変わらない。

5.2 $\gamma(\tilde{V})$ の決定法

抵抗係数 $\gamma(\tilde{V})$ は

$$\gamma(\tilde{V}) = \gamma_0 + \gamma_1 \tilde{V} + \gamma_2 \tilde{V}^2 + \gamma_3 \tilde{V}^3 + \dots \quad (5.6)$$

のように、速度 $\tilde{V}$ のべき乗の形をしている。この速度 $\tilde{V}$ のべき乗の係数 $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \dots$ を求めることが、この章の目標である。

$\gamma(\tilde{V})$ の決定は、力の釣り合いを用いて決定することができる。

4 章でも紹介したように、微粒子を定常的に駆動し続けると定常状態となる。定常状態とは速度が変わらない状態であるから、この時粒子の両端にかかる力は、平均してつりあっている。(ゆらぎがあるので、常につりあっているわけではない。) 釣り合っている力とは、一方は外場 F で、もう一方は抵抗力 $\gamma(\tilde{V})\tilde{V}$ である。これが平均して釣り合っているのだから、式で表すと

$$F = \langle \gamma(\tilde{V})\tilde{V} \rangle \quad (5.7)$$

となる。この式は、式 (5.3) の両辺にサンプル平均 $\langle \rangle$ をとることでも導くことができる。

この式 (5.7) に、式 (5.6) を代入すると、

$$F = \langle \gamma_0 \tilde{V} \rangle + \langle \gamma_1 \tilde{V}^2 \rangle + \langle \gamma_2 \tilde{V}^3 \rangle + \langle \gamma_3 \tilde{V}^4 \rangle + \dots \quad (5.8)$$

となる。 $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \dots$ は、それぞれ定数だから

$$F = \gamma_0 \langle \tilde{V} \rangle + \gamma_1 \langle \tilde{V}^2 \rangle + \gamma_2 \langle \tilde{V}^3 \rangle + \gamma_3 \langle \tilde{V}^4 \rangle + \dots \quad (5.9)$$

ここで、 $\langle \tilde{V} \rangle, \langle \tilde{V}^2 \rangle, \langle \tilde{V}^3 \rangle, \langle \tilde{V}^4 \rangle \dots$ はすべて数値計算によって観測可能な量だから、これらの量を観測して連立方程式を解けば、定数 $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \dots$ は解として求まる。

ここで、求めるべき係数を減らす試みをする。求める変数が多すぎると、計算結果の精度が落ちるからである。

外場 F を、正負の両方向にかけたとき、定常速度 $\tilde{V}$ の大きさは方向による偏りはないので、平均した釣り合いの式は

$$F = \gamma_0 \langle \tilde{V} \rangle + \gamma_1 \langle \tilde{V}^2 \rangle + \gamma_2 \langle \tilde{V}^3 \rangle + \gamma_4 \langle \tilde{V}^4 \rangle \dots \quad (5.10)$$

$$-F = -\gamma_0 \langle \tilde{V} \rangle + \gamma_1 \langle \tilde{V}^2 \rangle - \gamma_2 \langle \tilde{V}^3 \rangle + \gamma_4 \langle \tilde{V}^4 \rangle \dots \quad (5.11)$$

となる。式 (8.20) と式 (8.23) の和をとると

$$0 = 2\gamma_1 \langle \tilde{V}^2 \rangle + 2\gamma_3 \langle \tilde{V}^4 \rangle + 2\gamma_5 \langle \tilde{V}^6 \rangle \dots \quad (5.12)$$

となるが、 $\langle \tilde{V}^2 \rangle, \langle \tilde{V}^4 \rangle, \langle \tilde{V}^6 \rangle \dots$ は常に正の有限値であるので、式 (5.12) が恒等的に成り立つためには

$$\gamma_1, \gamma_3, \gamma_5 \dots = 0 \quad (5.13)$$

となるしかない。よって、 γ の偶数次の項のみが残り、

$$F = \gamma_0 \langle \tilde{V} \rangle + \gamma_2 \langle \tilde{V}^3 \rangle + \gamma_4 \langle \tilde{V}^5 \rangle + \dots \quad (5.14)$$

となる。

まず、 $\langle \tilde{V}^5 \rangle$ 以降の項については、大きく効いてこないとみなして無視して決定する場合について述べる。これより、求める非線形ランジュバン方程式は

$$F = \gamma_0 \langle \tilde{V} \rangle + \gamma_2 \langle \tilde{V}^3 \rangle \quad (5.15)$$

となる。ここで、 $F, \langle \tilde{V} \rangle, \langle \tilde{V}^3 \rangle$ の3つの変数から一つの関係式を決める、ということは、3次元空間上で一つの平面を決めることと等しい。数値計算から得られた外場 F ごとの $\langle \tilde{V} \rangle, \langle \tilde{V}^3 \rangle$ から、 $F = \gamma_0 \langle \tilde{V} \rangle + \gamma_2 \langle \tilde{V}^3 \rangle$ を満たすような γ_0, γ_2 の近似値を、2変数の線形最小自乗法を用いて決定した。 $F, \langle \tilde{V} \rangle, \langle \tilde{V}^3 \rangle$ の3次元からなる空間に、 F ごとの $\langle \tilde{V} \rangle, \langle \tilde{V}^3 \rangle$ の値と、決定された γ_0, γ_2 から式 (5.15) の関係を満たす平面を図示すると、図 28 のようになる。

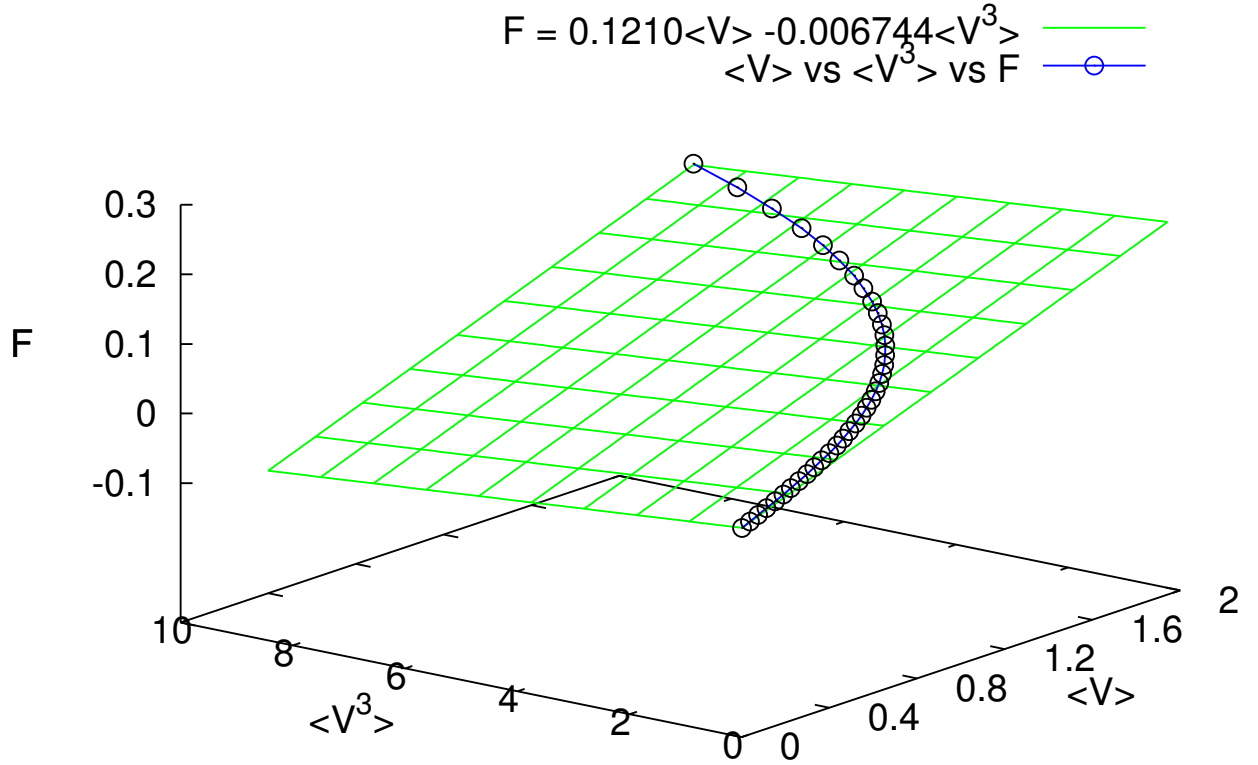


図 28 $F, \langle \tilde{V} \rangle, \langle \tilde{V}^3 \rangle$ の値と、 $F = \gamma_0 \langle \tilde{V} \rangle + \gamma_2 \langle \tilde{V}^3 \rangle$ となる平面。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000$, サンプル数 10000000。 $F = \gamma_0 \langle \tilde{V} \rangle + \gamma_2 \langle \tilde{V}^3 \rangle$ の関係式を満たす γ_0, γ_2 を、2 変数の線形最小自乗法から求めた。これより、 $\gamma_0 = 0.1210, \gamma_2 = -0.006744$ を得る。

このように $\gamma(\tilde{V})$ の係数の値は、釣り合いの式から数値的に決定することができる。

5.3 揺動力の決定法

非平衡系での揺動力の求め方は、基本的には平衡系と全く同じである、平衡系と同じく、伊藤のランジュバン方程式から、式変形を用いて導出する。 γ の値が決定していれば、この方法で揺動力を求めることができる。まず、非平衡系で非線形ランジュバン方程式

$$M\dot{V} = -\gamma(\tilde{V})\tilde{V} + F + \sqrt{D(\tilde{V})} \cdot \xi(s) \quad (5.16)$$

を伊藤のランジュバン方程式にかきかえると

$$Md\tilde{V} = -\gamma(\tilde{V})dX + Fds + \sqrt{D(\tilde{V})} \cdot dB_s \quad (5.17)$$

となる。この伊藤のランジュバン方程式を変形して、揺動力の部分を抜出すと、非平衡系での揺動力 $R(s)$ を

$$\begin{aligned} R(s) &:= \sqrt{D(\tilde{V})} \cdot \frac{dB_s}{ds} \\ &= M \frac{d\tilde{V}}{ds} + \gamma(\tilde{V}) \frac{dX}{ds} + F \end{aligned} \quad (5.18)$$

と定義することができる。ここから、具体的な揺動力の大きさ $D(\tilde{V})$ の値を求めていく。

式 (5.17) を変形し、両辺を 2 乗して統計平均をとると

$$Md\tilde{V} + \gamma(\tilde{V})dX - Fds = D(\tilde{V}) \cdot dB_s \quad (5.19)$$

$$(Md\tilde{V} + \gamma(\tilde{V})dX - Fds)^2 = D(\tilde{V}) \cdot dB_s^2 \quad (5.20)$$

$$\langle (Md\tilde{V} + \gamma(\tilde{V})dX - Fds)^2 \rangle = \langle D(\tilde{V}) \cdot dB_s^2 \rangle \quad (5.21)$$

$D(\tilde{V})$ と dB_s は統計独立なので $\langle D(\tilde{V}) \cdot dB_s^2 \rangle = \langle D(\tilde{V}) \rangle \langle dB_s^2 \rangle$ の関係があるから

$$\langle (Md\tilde{V} + \gamma(\tilde{V})dX - Fds)^2 \rangle = \langle D(\tilde{V}) \rangle \langle dB_s^2 \rangle \quad (5.22)$$

$$\langle (Md\tilde{V} + \gamma(\tilde{V})dX - Fds)^2 \rangle = \langle D(\tilde{V}) \rangle ds \quad (5.23)$$

$$\frac{\langle (Md\tilde{V} + \gamma(\tilde{V})dX - Fds)^2 \rangle}{ds} = \langle D(\tilde{V}) \rangle \quad (5.24)$$

となる。式 (5.23) では、 $\langle dB_s^2 \rangle = ds$ の関係を用いた。

ここで左辺の量に着目すると、 $\gamma(\tilde{V})$ は既にわかっている量なので、左辺の量は計測可能である。平衡の時と同様、 γ 値を入力すれば、それに対応する $\langle D(\tilde{V}) \rangle$ の値が決定される。

このようにして求まった $\langle D(\tilde{V}) \rangle$ の値を用いて、 D の係数を求める。 D は

$$D(\tilde{V}) = D_0 + D_1\tilde{V} + D_2\tilde{V}^2 + D_3\tilde{V}^3 + \dots \quad (5.25)$$

のように $\tilde{V}$ のべき乗になっていると仮定する。ここで、両辺に統計平均 $\langle \rangle$ をとると

$$\langle D(\tilde{V}) \rangle = D_0 + D_1\langle \tilde{V} \rangle + D_2\langle \tilde{V}^2 \rangle + D_3\langle \tilde{V}^3 \rangle + \dots \quad (5.26)$$

となる。 $\langle D(\tilde{V}) \rangle$ は先ほどの伊藤のランジュバン方程式の変形から計算可能であり、 $\langle \tilde{V} \rangle, \langle \tilde{V}^2 \rangle, \langle \tilde{V}^3 \rangle, \dots$ も数値計算からわかる量なので、この時点で係数 $D_0, D_1, D_2, \dots$ が決定できる。

しかし、 $\gamma(\tilde{V})$ の係数の決定の時と同様、ここでも係数を減らす試みをする。

まず、 $\tilde{V}^4$ 以降の項は、これも $\gamma(\tilde{V})$ の時と同じく大きく効いてこないとしてここでは無視する。求めるのは

$$\langle D(\tilde{V}) \rangle = D_0 + D_1\langle \tilde{V} \rangle + D_2\langle \tilde{V}^2 \rangle + D_3\langle \tilde{V}^3 \rangle \quad (5.27)$$

の係数 D_0, D_1, D_2, D_3 となるが、 $\tilde{V}$ の奇数次の項の係数 D_1, D_3 について考えてみる。

$\langle \tilde{V} \rangle$ や $\langle \tilde{V}^3 \rangle$ の $\tilde{V}$ の奇数次の項は、 $\langle \tilde{V}^2 \rangle$ などの偶数次の項と違い、外場 F の方向によって符号が変わる。外場 F を正の方向のかければ、粒子は平均して正の方向に進むので、平均速度 $\langle \tilde{V} \rangle$ はもちろん正の値をとる。しかし、外場 F を負の方向のかけると、粒子は平均して負の方向に移動するので、平均速度 $\langle \tilde{V} \rangle$ は負の値をとる。 $\langle \tilde{V} \rangle$ だけでなく、 $\langle \tilde{V}^3 \rangle$ や $\langle \tilde{V}^5 \rangle$ も同様である。 $\langle D(\tilde{V}) \rangle$ は揺動力の大きさを表す数値であり、 $D_0, D_1, D_2, \dots$ は定数なので、 $\langle D(\tilde{V}) \rangle$ が外場の向きによって変化してしまうのはありえない。 $\langle D(\tilde{V}) \rangle$ の大

きさは、外場の向きに寄らないはずである。これより、 $\tilde{V}$ の奇数次の項の係数はすべて 0 であると仮定する。

$$D_1, D_3, D_5, \dots = 0 \quad (5.28)$$

以上から、 $D(\tilde{V})$ の各係数は偶数次のみが残り、

$$D(\tilde{V}) = D_0 + D_2 \tilde{V}^2 + D_4 \tilde{V}^4 \dots \quad (5.29)$$

となる。ここで、まずは $\gamma(\tilde{V})$ の場合と同様、 $\tilde{V}^2$ の係数、つまり D_2 までの速度を考慮して、揺動力を抜き出す。

具体的に D_0, D_2 を決定する前に、平衡系での議論と同様に、揺動力がマルコフ性を満たすように粗視化パラメータを決めてやらねばならない。これより、非平衡系での粗視化パラメーター τ の妥当性について検討する。

揺動力がマルコフ性を満たすならば、図 25 のように、粗視化パラメーター τ を大きくしていても揺動力の同時刻相関は変化しないのであった。

式(5.18) 揺動力 $R(s)$ の同時刻相関は、式 (5.24) で表される。(非平衡系でも、もちろん $\langle R(s) \rangle = 0$ を仮定している。) $M = 100, T = 10$ の系において、外場 F が十分大きい $F = 0.17$ の時、式 (5.18) 揺動力 $R(s)$ の同時刻相関と粗視化パラメーター τ の関係は、図 29 のようになる。

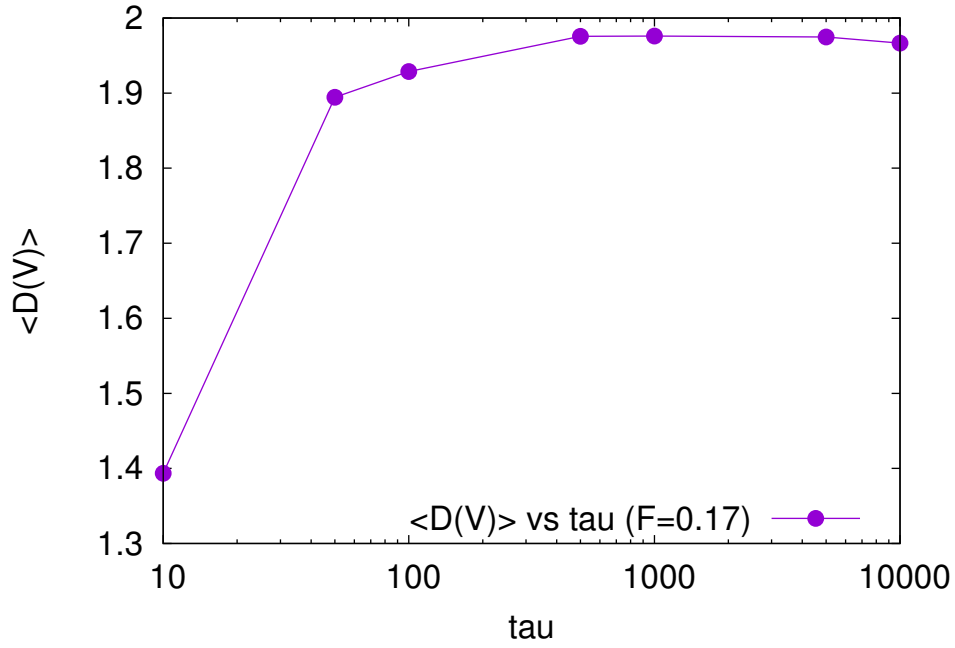


図 29 $F=0.17$ の時の式 (5.24) から得られた揺動力 $R(s)$ の同時刻相関 $\langle D(\tilde{V}) \rangle$ と、粗視化パラメーター τ の関係。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1$, サンプル数 10000000, $F = 0.17$ 。入力した γ は、 $\gamma_0 = 0.1210, \gamma_2 = -0.006744$ とした $\gamma(\tilde{V}) = \gamma_0 \tilde{V} + \gamma_2 \tilde{V}^3$ であり、式 (5.24) から $\langle D(\tilde{V}) \rangle$ を求めた。 τ がおよそ 500 のあたりから、同時刻相関 $\langle D(\tilde{V}) \rangle$ の値は変化していないことがわかる。つまり非平衡系では、粗視化パラメーター τ はおよそ $500 \leq \tau$ であれば、マルコフ性を満たすように揺動力 $R(s)$ を抜き出すことができる。

図 29 から、 $F = 0.17$ ではおよそ $500 \leq \tau$ では $\langle D(\tilde{V}) \rangle$ が収束しているので、 $\tau \geq 500$ として粗視化すれば、十分マルコフ性を満たすように揺動力 $R(s)$ を抜き出すことができることがわかる。以降の議論でも、平衡の時と同様 $\tau = 1000$ として、揺動力を決定していく。

マルコフ性を満たす粗視化パラメーター τ の検討ができたところで、揺動力 $D(\tilde{V})$ の係数 D_0, D_2 を決定していく。

$$\langle D(\tilde{V}) \rangle = D_0 + D_2 \langle \tilde{V}^2 \rangle \quad (5.30)$$

について考える。式 (5.30) から、数値計算から得られた $\langle D(\tilde{V}) \rangle$ の値と $\langle \tilde{V}^2 \rangle$ を plot すれば、切片 D_0 , 傾き D_2 の直線が得られるはずである。 $\langle D(\tilde{V}) \rangle$ の値と $\langle \tilde{V}^2 \rangle$ の値を plot してみると図 30 が得られる。

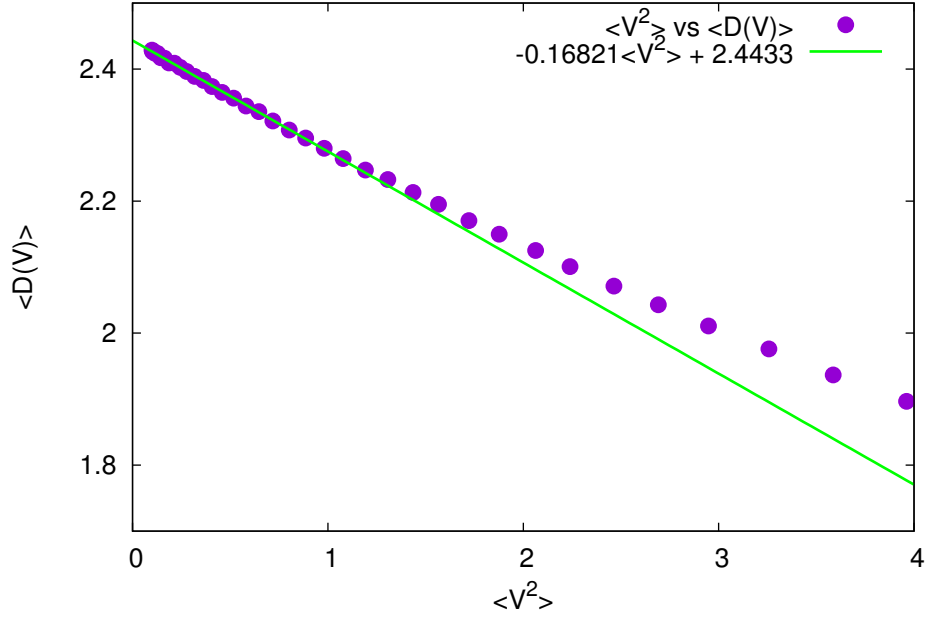


図 30 式 (5.24) から得られた $\langle D(\tilde{V}) \rangle$ と、 $\langle \tilde{V}^2 \rangle$ の関係。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000$, サンプル数 10000000, $F = 0.0 \sim 0.18$ 入力した γ は $\gamma_0 = 0.1210, \gamma_2 = -0.006744$ として、 $\gamma(\tilde{V}) = \gamma_0 \tilde{V} + \gamma_2 \tilde{V}^3$ であり、式 (5.24) から $\langle D(\tilde{V}) \rangle$ を求めた。直線は、 $\langle \tilde{V}^2 \rangle$ を 0 から 1 までの範囲のデータを、最小自乗法で近似した直線である。この直線の傾きから、 $D_0 = 2.4433, D_2 = -0.1682$ を得る。 $\langle \tilde{V}^2 \rangle$ が小さい範囲、つまり F が小さい範囲では、直線に従っているように見えるが、 F が大きい範囲（図 30 右下辺り）では、直線からずれていっているように見える。これは、 F が大きい範囲では $\langle \tilde{V}^4 \rangle$ 以降の項の効果が大きく効いていっているためと考えられる。

図 30 から、一次関数でグラフの傾きと切片を最小自乗法で求めると、 D_0, D_2 の値を決定できる。 F が大きい範囲（図 30 右下辺り）では、直線からずれていっているように見える。これは、 F が大きい範囲では $\langle \tilde{V}^4 \rangle$ 以降の項の効果が大きく効いていっているためと考えられる。

具体的に、得られた $\gamma_0, \gamma_2, D_0, D_2$ は表 2 のようになった。

γ_0	γ_2	D_0	D_2
0.1210	-0.006744	2.4433	-0.1682

表 2 速度 $\tilde{V}^3$ まで考慮した $\gamma(\tilde{V}), D(\tilde{V})$ の係数。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000$, sample 数 10000000, $F = 0.0 \sim 0.18$ 。測定された $\langle \tilde{V} \rangle, \langle \tilde{V}^2 \rangle, \langle \tilde{V}^3 \rangle$ の値と、 $F, \langle D(\tilde{V}) \rangle$ の値から、最小自乗法を用いて決定した。

以上のように、非平衡系でもあらかじめ $\gamma(\tilde{V})$ が分かっているれば、伊藤のランジュバン方程式から揺動力の大きさ $\langle D(\tilde{V}) \rangle$ を求めることができ、さらに数値計算から得られた $\langle \tilde{V} \rangle, \langle \tilde{V}^3 \rangle, \langle \tilde{V}^3 \rangle \dots$ の値と比較すれば、 $D_0, D_2, D_4 \dots$ の数値を求めることが可能である。

5.4 高次の項と $\gamma(\tilde{V}), D(\tilde{V})$ の関係

今まで、非線形ランジュバン方程式の係数 $\gamma(\tilde{V}), D(\tilde{V})$ の係数を、速度 $\tilde{V}$ の 2 次までしか考慮せずに導出してきたが、実際は速度 $\tilde{V}$ の 4 次以降の項も存在している。

$$\gamma(\tilde{V}) = \gamma_0 + \gamma_2 \tilde{V}^2 + \gamma_4 \tilde{V}^4 + \gamma_6 \tilde{V}^6 + \dots \quad (5.31)$$

$$D(\tilde{V}) = D_0 + D_2 \tilde{V}^2 + D_4 \tilde{V}^4 + D_6 \tilde{V}^6 + \dots \quad (5.32)$$

速度 $\tilde{V}$ の 4 次以降の係数 $\gamma_4, \gamma_6, \dots, D_4, D_6, \dots$ も、2 次までの係数と同じ求め方で求めることが可能である。

$\tilde{V}^4$ まで考慮した際の係数は、表 3 のようになる。

さらに、 $\tilde{V}^6$ まで考慮した際の係数は、表 4 のようになる。

γ_0	γ_2	γ_4
0.1236	-0.009407	0.0004505
D_0	D_2	D_4
2.444	-0.1785	0.008708

表 3 速度 $\tilde{V}^4$ まで考慮した $\gamma(\tilde{V}), D(\tilde{V})$ の係数。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, sample$ 数 10000000, $F = 0.0 \sim 0.18$ 測定された $\langle \tilde{V} \rangle, \langle \tilde{V}^2 \rangle, \langle \tilde{V}^3 \rangle, \langle \tilde{V}^4 \rangle$ の値と、 $F, \langle D(\tilde{V}) \rangle$ の値から、最小自乗法を用いて決定した。

γ_0	γ_2	γ_4	γ_6
0.1243	-0.01078	0.001003	-0.00005438
D_0	D_2	D_4	D_6
2.446	-0.1876	0.01422	-0.0006998

表 4 速度 $\tilde{V}^6$ まで考慮した $\gamma(\tilde{V}), D(\tilde{V})$ の係数。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, sample$ 数 10000000, $F = 0.0 \sim 0.18$ 測定された $\langle \tilde{V} \rangle, \langle \tilde{V}^2 \rangle, \langle \tilde{V}^3 \rangle, \langle \tilde{V}^4 \rangle, \langle \tilde{V}^6 \rangle, \langle \tilde{V}^6 \rangle$ の値と、 $F, \langle D(\tilde{V}) \rangle$ の値から、最小自乗法を用いて決定した。

5.5 揺動散逸関係

得られた非線形ランジュバン方程式の $\gamma(\tilde{V}), D(\tilde{V})$ の係数から、揺動散逸関係について調べる。揺動散逸関係 $D = 2\gamma k_B T$ から、揺動 D 、散逸 γ の比をとれば、温度 $T = \frac{1}{2k_B} \frac{D}{\gamma}$ を表すことができる。揺動散逸温度 T_{FDT} を

$$T_{FDT}(\tilde{V}) := \frac{1}{2} \frac{D_0 + D_2 \tilde{V}^2 + D_4 \tilde{V}^4 + \dots}{\gamma_0 + \gamma_2 \tilde{V}^2 + \gamma_4 \tilde{V}^4 + \dots} \quad (5.33)$$

と定義する。横軸に F をとり、ある外場 F で駆動させたときの平均速度 $\langle \tilde{V} \rangle$ を、式 (5.33) の速度 $\tilde{V}$ に代入し、 T_{FDT} を縦軸に plot すると、図 31 が得られた。

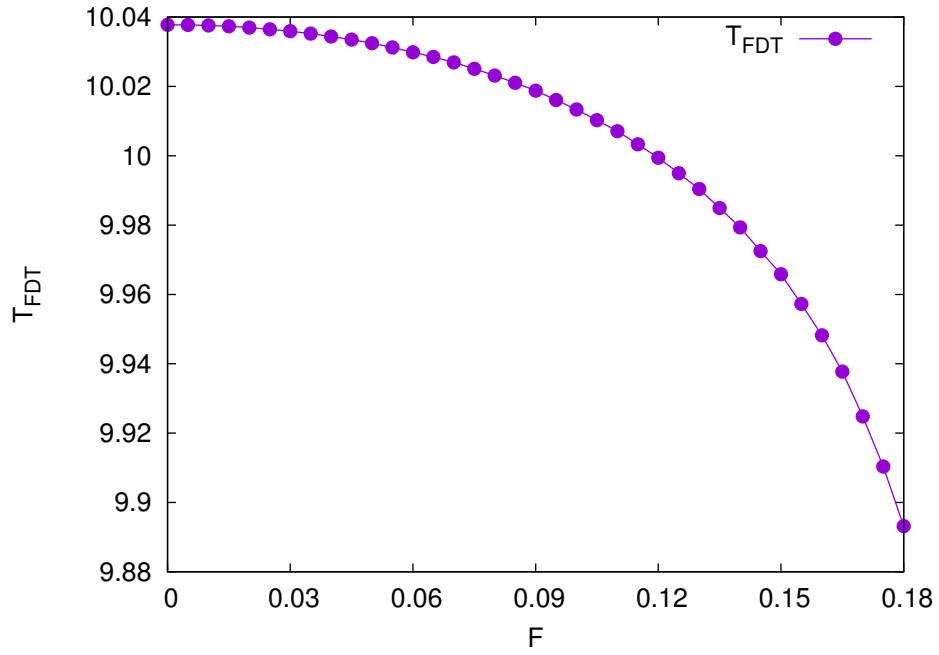


図 31 式 (5.33) で定義された T_{FDT} 。 T_{FDT} はあまり変化していないことがわかる。 $\gamma_0 = 0.1211, \gamma_2 = -0.006744, D_0 = 2.431, D_2 = -0.1427, M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, sample \text{ 数 } 100000000, F = 0.0 \sim 0.18$ 。

図 31 から、熱浴の温度は $T = 10$ なので、外場で駆動されるような非平衡系でも、 T_{FDT} の数値はほぼ変わっていないことがわかる。これは、非線形ランジュバン方程式の非線形係数 $\gamma(\tilde{V}), D(\tilde{V})$ が、妥当に求められていることを表している。

6 有効温度についての考察

有効温度とは、非平衡系での温度のことである。温度が厳密に定義されているのは、実は平衡系に限った話で、非平衡系における温度がいったい何にあたるのか、未だに自明な理論はない。ボルツマンの速度論によって、「分子の熱運動が熱の正体である」と決定付けたときも、平衡系が仮定されていた。この章では、非平衡系での温度、つまり有効温度について、数値計算を用いて検討していく。有効温度に関してはまだ未知な事が多いので、この章でのスタンスとしては、「有効温度と定義すると都合のよさそうなものを挙げてみる」、である。なんだかすごくいい加減な響きだが、「これをこう定義しておく、なんだか都合がよさそう」という理由でいろいろ定義してみた結果、物理学は発展してきた側面があると思っている。

6.1 運動論的温度

有効温度について議論していく前に、運動論的温度の現象を述べる
運動論的温度 T_k を

$$T_k := M \langle (\tilde{V} - \langle \tilde{V} \rangle)^2 \rangle \quad (6.1)$$

で定義する。平衡状態では、運動論的温度 T_k は熱浴の温度 T と等しい。というよりも、そのような関係を満たすようにボルツマン定数 k_B を定義したのだった。ボルツマン定数は、温度とエネルギーを結びつける定数である。

非平衡系でもこの関係は成り立つのだろうか？。熱浴の温度を $T = 10$ のとして、外場 F を変えて運動論的温度 T_k を測った結果が、図 31 の T_k である。

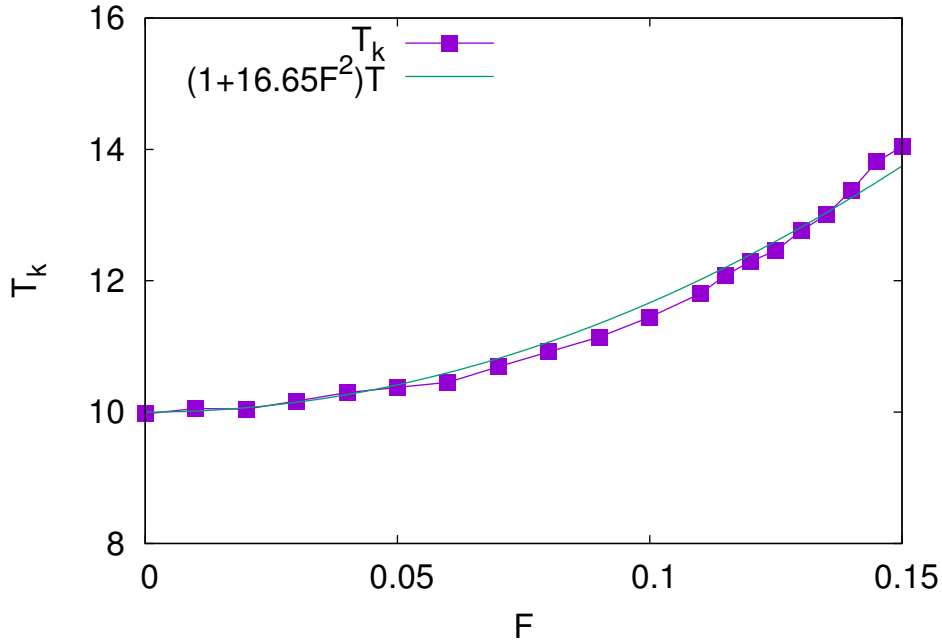


図 32 運動論的温度 T_k の外場 F 依存性。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, \text{sample 数 } 1000000000, F = 0.0 \sim 0.15$ 。関数 $T_k = (1 + 16.65F^2)T$ は非線形最小自乗法を用いて決定した。運動論的温度 T_k は、外場 F にともなって上昇していることがわかる。

$F = 0$ つまり平衡状態の時は、運動論的温度 T_k は熱浴の温度 $T = 10$ とほぼ一致しているが、外場 F の大きさを大きくしていくと、しだいに運動論的温度 T_k も上昇していくのがわかる。非平衡系では、熱浴の温度と運動論的温度は一致しないという結果が示している。

図 32 に示した T_k の結果から、非線形最小自乗法を用いて関数形を決めた結果、この上昇の仕方は、およそ $T_k = (1 + aF^2)T$ という F の 2 乗の依存性があると見積もれた。

6.2 有効温度の定義

「温度」が厳密に定義されているのは平衡系のみである。

平衡系での温度はどのように定義されているのだろうか？非平衡系での温度は、平衡系の定義を適用できないのだろうか？平衡系での代表的な温度の定義は、主に以下の 3 つの定義がある。参照 [7]

1. カノニカル分布による定義
2. 熱力学第一法則による定義
3. 揺動散逸定理による定義

ひとつひとつ、非平衡系での拡張の可能性について検討していく。

1. カノニカル分布による定義

カノニカル分布 $\rho(E) = \rho_0 e^{\frac{E}{k_B T}}$ を用いる方法である。平衡系であれば、系の分布関数がわかれば、その分布はカノニカル分布の分布関数 $\rho(E)$ に従うので、分布関数から温度 T を知ることができる。しかし、非平衡系においては、系の分布関数がどのような形のなるのかは自明ではないので、この方法を適用することはできないだろう。

2. 熱力学関係式による定義

熱力学関係式 $dQ = TdS$ を用いる方法である。

この方法では温度を $T = \frac{dQ}{dS}$ として定義する。しかし、非平衡系のエントロピーをどのように定義したらよいのかも自明ではないので、この方法も得策とは言えない。

3. 揺動散逸定理による定義

揺動と散逸の比から、温度を決定する方法である。ちょうど 2.2 章の揺動散逸定理で $D = 2\gamma k_B T$ という関係式を導いたが、この関係式で左辺を揺動 D と散逸 γ の比、つまり $\frac{D}{\gamma}$ の形をとれば、右辺には温度 T が残る。このようにして、温度を定義する。

拡散係数 D 、抵抗係数 γ は、平衡、非平衡問わず観測可能な量なので、この方法を用いれば、有効温度についての議論が可能である。

以下では、

$$T_{eff} := \frac{1}{2} \frac{D}{\gamma} \quad (6.2)$$

として、有効温度を論じる。 D および γ が $\tilde{V}$ に依存しているので、実際は式 (8.131) のような単純な定義に留まる事はできない。そこで、いくつかの候補をあげ、運動論的温度との関係を吟味していく。

6.3 絶対系での有効温度

6.3.1 第一の有効温度 T_{e1}

ある F の時の平均速度 $\langle \tilde{V} \rangle$ を式 (8.131) の $\tilde{V}$ に代入した値を T_{e1} と定義する。

$$T_{e1} := \frac{1}{2} \frac{D_0 + D_2 \langle \tilde{V} \rangle^2}{\gamma_0 + \gamma_2 \langle \tilde{V} \rangle^2} \quad (6.3)$$

図 31 の T_{FDT} と同じものである。横軸に F をとり、 T_{e1} を縦軸に plot すると、図 33 のようになった。

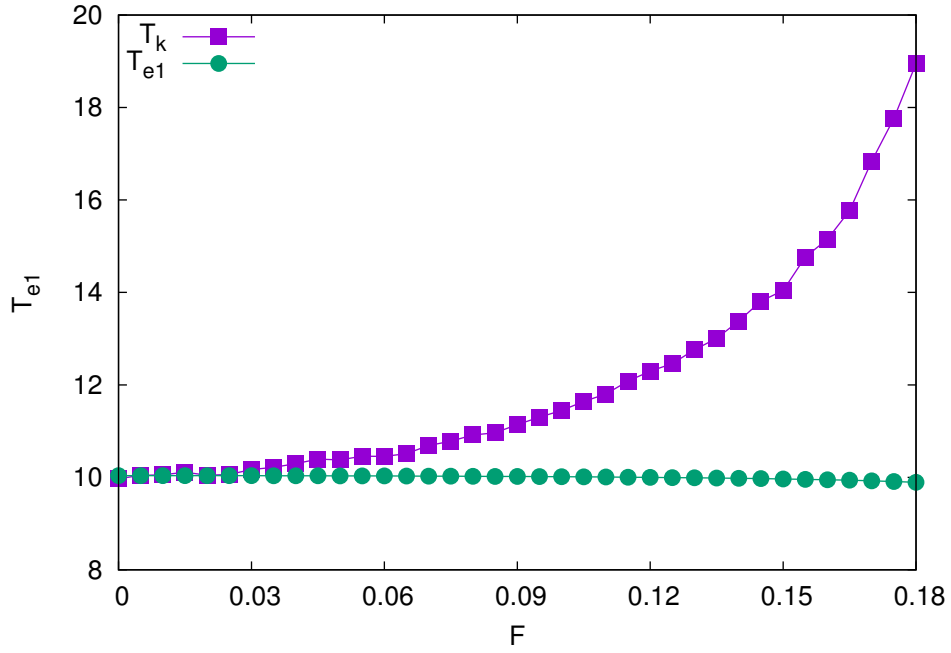


図 33 運動論的温度 T_k と、式 (6.3) で定義された T_{e1} 。 T_{e1} は、図 31 の T_{FDT} と同じものである。2つの温度は、一致していないことがわかる。 $\langle \tilde{V} \rangle$ と T_k の測定パラメーターは $\gamma_0 = 0.1211, \gamma_2 = -0.006744, D_0 = 2.431, D_2 = -0.1427, M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, \text{sample 数 } 10000000, F = 0.0 \sim 0.18$ 。 T_k の変化に比べて、 T_{e1} はあまり変化していないことがわかる。

おおよそ $F = 0.1$ のあたりから非線形応答領域に変わるが、有効温度 T_{e1} はあまり変化はない。図の比較から、運動論的温度とは一致していないと結論できる。この結果は、素朴な揺動散逸定理 $D(\tilde{V}) = 2\gamma(\tilde{V})k_B T$ が成り立っていないことも意味している。

6.3.2 第二の有効温度 T_{e2}

T_{e2} を

$$T_{e2} := \frac{1}{2} \frac{\langle D(\tilde{V}) \rangle}{\langle \gamma(\tilde{V}) \rangle} = \frac{1}{2} \frac{D_0 + D_2 \langle \tilde{V}^2 \rangle}{\gamma_0 + \gamma_2 \langle \tilde{V}^2 \rangle} \quad (6.4)$$

と定義してみるとどうなるだろうか？ T_{e1} と T_{e2} と T_k のグラフを plot してみると図 34 のようになる。

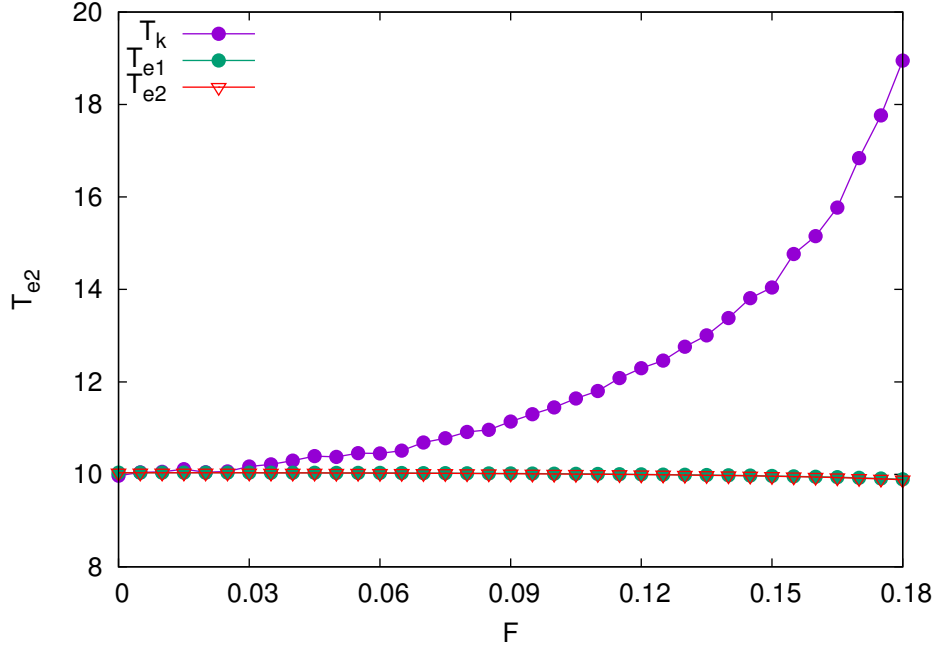


図 34 式 (6.4) で定義される T_{e2} と、 T_{e1} 。比較のため、 T_k も加えた。 $\gamma_0 = 0.1211, \gamma_2 = -0.006744, D_0 = 2.431, D_2 = -0.1427$ 。 $\langle \tilde{V}^2 \rangle$ と T_k の測定パラメーターは $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, sample \text{ 数 } 10000000, F = 0.0 \sim 0.18$ 。 T_{e2} と T_{e1} は、ほぼ同じ事がわかる

T_{e1} と T_{e2} は、ほとんど差がないことがわかる。どちらも運動論的温度 T_k とは一致していない。

6.4 相対系での有効温度

6.4.1 第三の有効温度 T_{e3}

揺らぎの速度を

$$u := \tilde{V} - \langle \tilde{V} \rangle \quad (6.5)$$

で定義し、非線形ランジュバン方程式を定常速度の慣性系の乗せた速度の揺らぎの方程式に書き変える。

式 (6.5) を変形すると、 $\tilde{V} = u + \langle \tilde{V} \rangle$ となる。これを非平衡系のランジュバン方程式

$$M\dot{\tilde{V}} = -\gamma(\tilde{V})\tilde{V} + F + \sqrt{D(\tilde{V})} \cdot \xi(t) \quad (6.6)$$

に代入すると、

$$M\dot{\tilde{V}} = -\gamma_0\tilde{V} - \gamma_2\tilde{V}^3 + F + \sqrt{D(\tilde{V})} \cdot \xi(s) \quad (6.7)$$

$$\tilde{V} = u + \langle \tilde{V} \rangle \quad (6.8)$$

$$M \frac{d}{dt}(u + \langle \tilde{V} \rangle) = -\gamma_0(u + \langle \tilde{V} \rangle) - \gamma_2(u + \langle \tilde{V} \rangle)^3 + F + \sqrt{D(\tilde{V})} \cdot \xi(s) \quad (6.9)$$

これを速度の部分を展開して、揺らぎの速度 u のべき乗で各項をまとめると、以下の式を得られる。

$$M\dot{u} = -(\gamma_0 + 3\gamma_2\langle \tilde{V} \rangle^2)u - 3\gamma_2\langle \tilde{V} \rangle u^2 - \gamma_2 u^3 - \gamma_0\langle \tilde{V} \rangle - \gamma_2\langle \tilde{V} \rangle^3 + F + \sqrt{D(\tilde{V})}\xi(s) \quad (6.10)$$

この時、定常速度 $\langle \tilde{V} \rangle$ は時間変化しないので、 $\frac{d\langle \tilde{V} \rangle}{dt} = 0$ となることを用いた。

さらに、釣り合いの式 $F = \langle \gamma(\tilde{V})\tilde{V} \rangle$ から、 $F = \gamma_0\langle \tilde{V} \rangle + \gamma_2\langle \tilde{V}^3 \rangle$ の関係があるので、

$$M\dot{u} = -(\gamma_0 + 3\gamma_2\langle \tilde{V} \rangle^2)u - 3\gamma_2\langle \tilde{V} \rangle u^2 - \gamma_2 u^3 - \gamma_0\langle \tilde{V} \rangle - \gamma_2\langle \tilde{V} \rangle^3 + \gamma_0\langle \tilde{V} \rangle + \gamma_2\langle \tilde{V}^3 \rangle + \sqrt{D(\tilde{V})} \cdot \xi(s) \quad (6.11)$$

$$M\dot{u} = -(\gamma_0 + 3\gamma_2\langle \tilde{V} \rangle^2)u - 3\gamma_2\langle \tilde{V} \rangle u^2 - \gamma_2 u^3 + \gamma_2((u + \langle \tilde{V} \rangle)^3 - \langle \tilde{V} \rangle^3) + \sqrt{D(\tilde{V})} \cdot \xi(s) \quad (6.12)$$

となる。このとき、揺らぎの運動方程式 (6.12) において、揺らぎの速度 u を含む項において、

$$\Gamma(u)u = -(\gamma_0 + 3\gamma_2\langle \tilde{V} \rangle^2)u - 3\gamma_2\langle \tilde{V} \rangle u^2 - \gamma_2 u^3 \quad (6.13)$$

$$\Gamma(u) := \Gamma_0 + \Gamma_1 u + \Gamma_2 u^2 + \dots \quad (6.14)$$

を満たす非線形抵抗係数 $\Gamma(u)$ を定義する。具体的には、式 (6.12) においては

$$\Gamma_0 = \gamma_0 + 3\gamma_2\langle \tilde{V} \rangle^2 \quad (6.15)$$

$$\Gamma_1 = 3\gamma_2\langle \tilde{V} \rangle \quad (6.16)$$

$$\Gamma_2 = \gamma_2 \quad (6.17)$$

となる。また、拡散係数 $D(\tilde{V})$ にも、同様に式 (6.5) の揺らぎの速度を代入すると

$$D(\tilde{V}) = D_0 + D_2\tilde{V}^2 \quad (6.18)$$

$$= D_0 + D_2(u + \langle \tilde{V} \rangle)^2 \quad (6.19)$$

$$= D_0 + D_2\langle \tilde{V} \rangle^2 + 2D_2\langle \tilde{V} \rangle u + D_2 u^2 \quad (6.20)$$

となり、 γ の場合と同様、式 (6.20) が揺らぎの速度のべき乗

$$d(u) := d_0 + d_1 u + d_2 u^2 \dots \quad (6.21)$$

で書けるとすると、

$$d_0 = D_0 + D_2\langle \tilde{V} \rangle^2 \quad (6.22)$$

$$d_1 = 2D_2\langle \tilde{V} \rangle \quad (6.23)$$

$$d_2 = D_2 \quad (6.24)$$

と決めることができる。それぞれ式 (6.22)(6.15) で定義される Γ_0, d_0 の結果を、図 35、図 36 に示す。

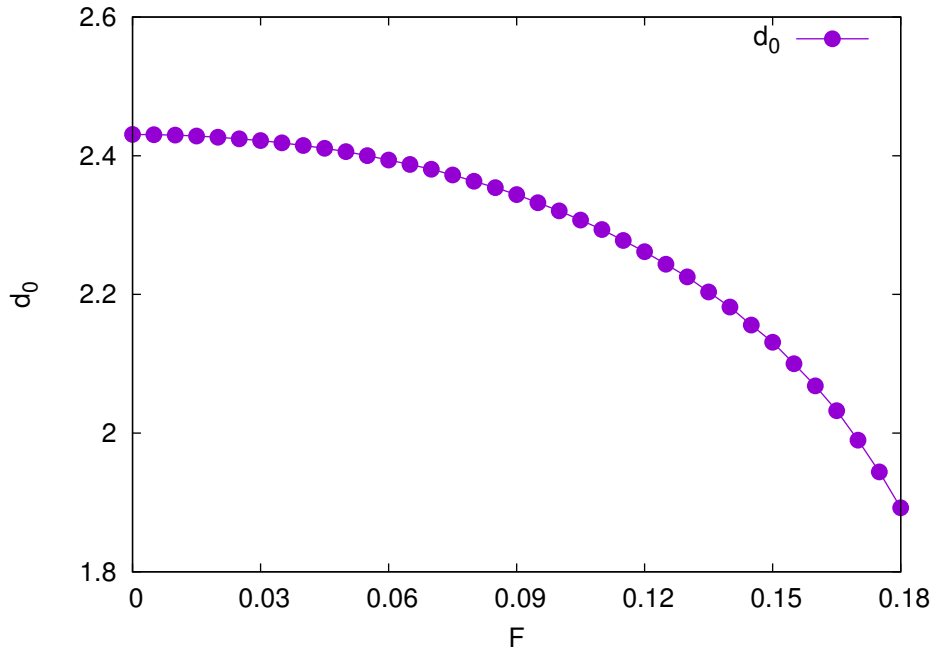


図 35 式 (6.22) で定義される d_0 と、外場 F の関係。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, \text{sample 数 } 100000000, F = 0.0 \sim 0.18$ 。

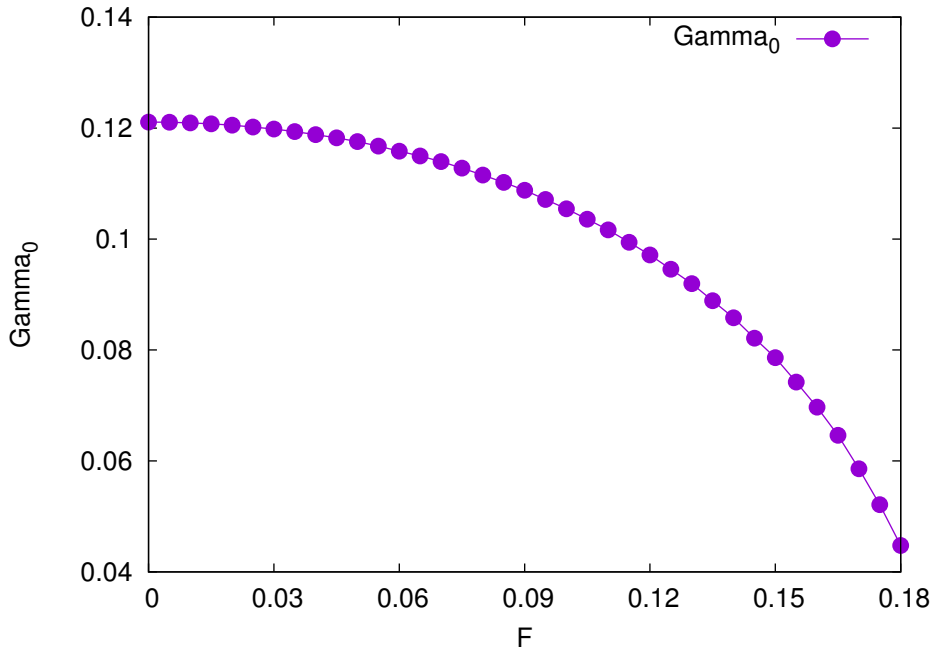


図 36 式 (6.15) で定義される Γ_0 と、外場 F の関係。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, \text{sample 数 } 100000000, F = 0.0 \sim 0.18$ 。

新たに定義した揺らぎの方程式での抵抗係数 Γ_0 と拡散係数 d_0 の比から、

$$\begin{aligned} T_{e3} &:= \frac{1}{2} \frac{d_0}{\Gamma_0} \\ &= \frac{1}{2} \frac{D_0 + D_2 \langle \tilde{V} \rangle^2}{\gamma_0 + 3\gamma_2 \langle \tilde{V} \rangle^2} \end{aligned} \quad (6.25)$$

を定義して、 T_{e3} を運動論的温度 T_k と plot してみると、図 37 のようになる

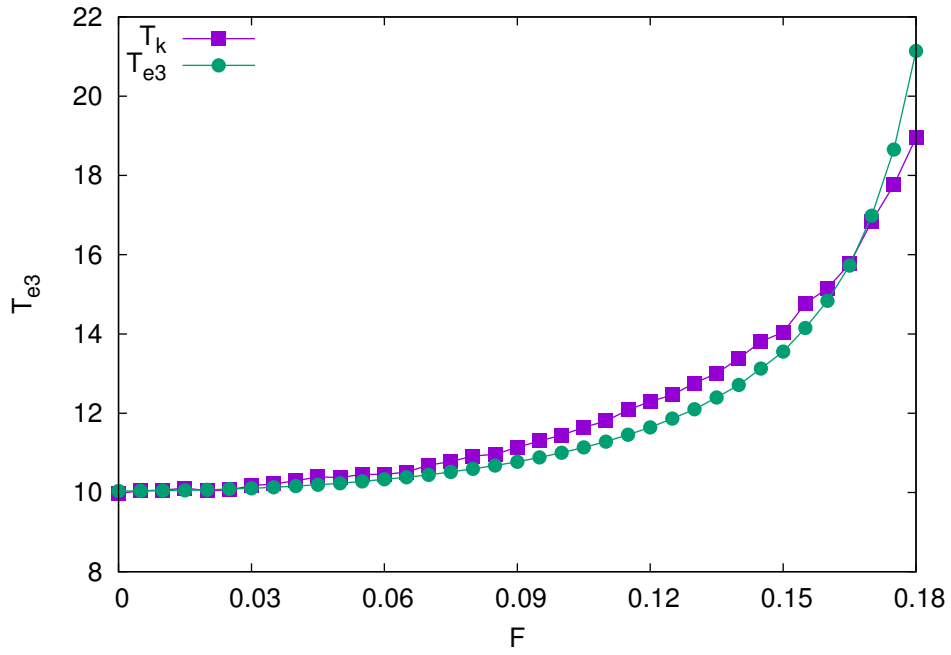


図 37 式 (6.25) で定義される T_{e3} と、運動論的温度 T_k の関係。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, sample$ 数 10000000, $F = 0.0 \sim 0.18$ 。外場 F の小さい範囲 $0 \leq F \leq 0.1$ では、およそ T_{e3} と T_k は等しいように見える。

$F = 0.1$ あたりまでの範囲なら、似たような形が描けているように見える。

6.4.2 第四の有効温度 T_{e4}

T_{e3} の時と同様に、揺らぎの速度を用いて、非線形ランジュバン方程式の 4 次の項まで入れた揺らぎの方程式は

$$M\dot{V} = -\gamma_0 \tilde{V} - \gamma_2 \tilde{V}^3 - \gamma_4 \tilde{V}^4 + F + \sqrt{D(\tilde{V})} \cdot dB_t \quad (6.26)$$

$$\tilde{V} = u + \langle \tilde{V} \rangle \quad (6.27)$$

$$\begin{aligned} M \frac{d}{dt} (u + \langle \tilde{V} \rangle) &= -\gamma_0 (u + \langle \tilde{V} \rangle) - \gamma_2 (u + \langle \tilde{V} \rangle)^3 - \gamma_4 (u + \langle \tilde{V} \rangle)^5 + F \\ &\quad + \sqrt{D_0 + D_2 (u + \langle \tilde{V} \rangle)^2 + D_4 (u + \langle \tilde{V} \rangle)^4} \cdot dB_t \end{aligned} \quad (6.28)$$

となる。この式を展開して、式 (6.14)、式 (6.21) の定義から係数 Γ_0, d_0 を決定すると、

$$\Gamma_0 = \gamma_0 + 3\gamma_2\langle\tilde{V}\rangle^2 + 5\gamma_4\langle\tilde{V}\rangle^4 \quad (6.29)$$

$$d_0 = D_0 + D_2\langle\tilde{V}\rangle^2 + D_4\langle\tilde{V}\rangle^4 \quad (6.30)$$

を得る。それぞれ式 (6.30)(6.29) で定義される Γ_0, d_0 の結果を、図 38、図 39 に示す。

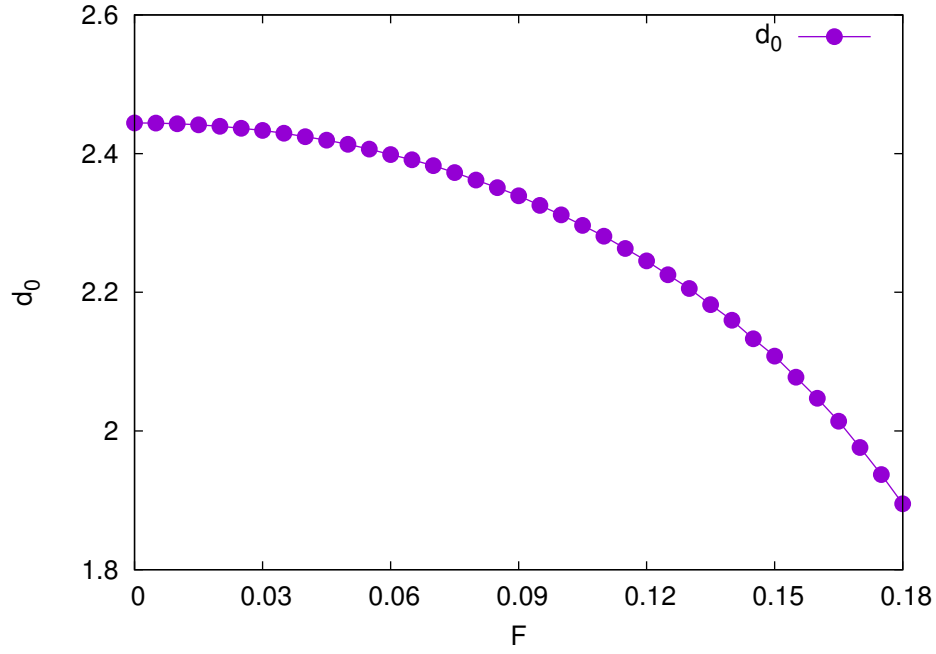


図 38 式 (6.30) で定義される d_0 と、外場 F の関係。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, \text{sample 数 } 100000000, F = 0.0 \sim 0.18$ 。

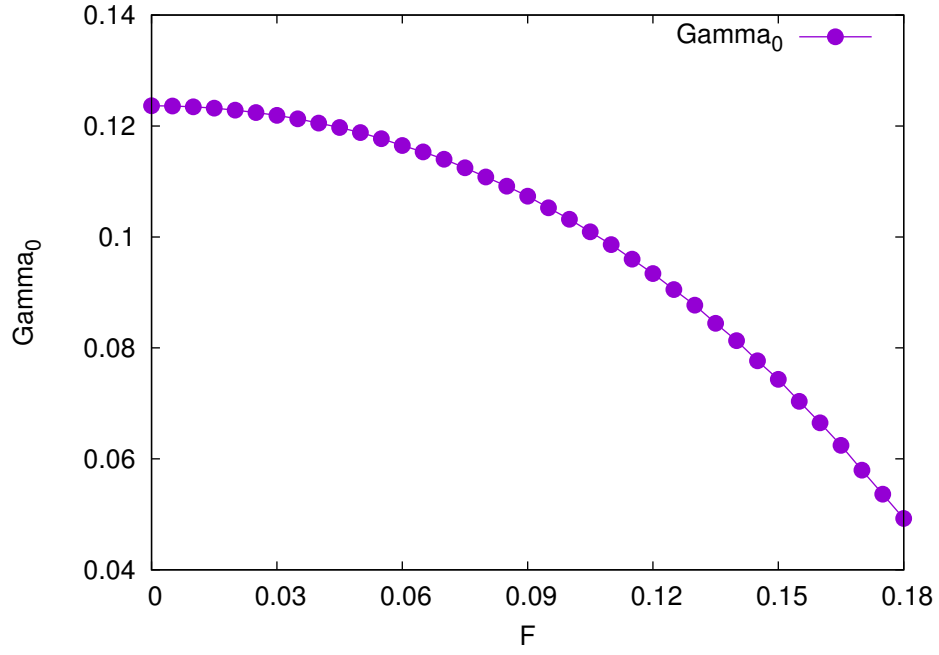


図 39 式 (6.29) で定義される Γ_0 と、外場 F の関係。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, \text{sample 数 } 100000000, F = 0.0 \sim 0.18$ 。

T_{e4} を 4 次までの係数を用いて

$$\begin{aligned}
 T_{e4} &:= \frac{1}{2} \frac{d_0}{\Gamma_0} \\
 &= \frac{1}{2} \frac{D_0 + D_2 \langle \tilde{V} \rangle^2 + D_4 \langle \tilde{V} \rangle^4}{\gamma_0 + 3\gamma_2 \langle \tilde{V} \rangle^2 + 5\gamma_4 \langle \tilde{V} \rangle^4}
 \end{aligned} \tag{6.31}$$

と定義する。 T_{e4} を T_k と plot すると、図 40 を得る。

図 37 の T_{e3} と比較してみても、外場 F の十分な範囲で運動論的温度 T_k と T_{e4} は一致しているように見える。

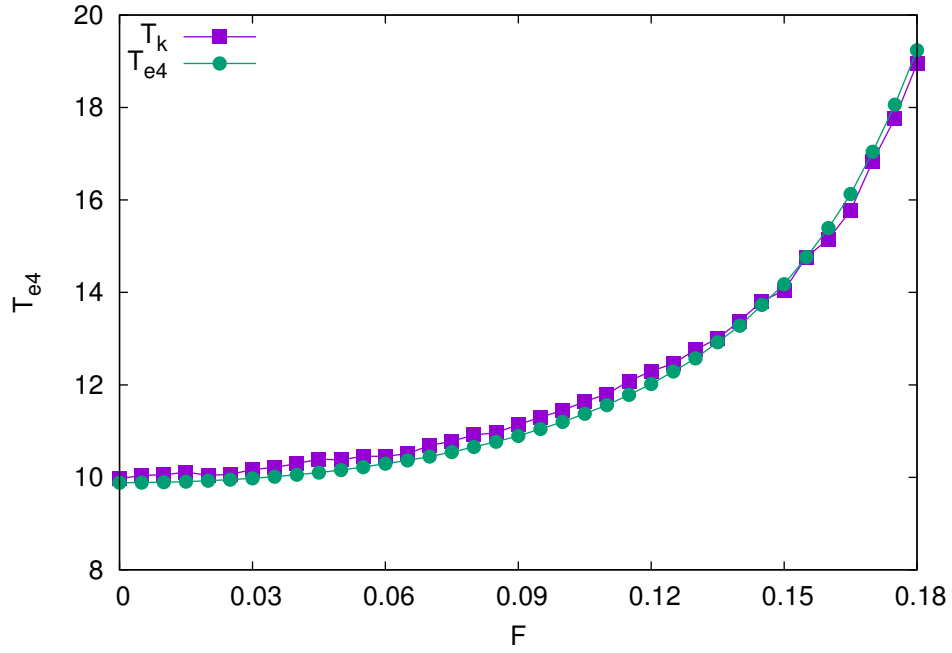


図 40 式 (6.31) で定義される T_{e4} と、運動論的温度 T_k の関係。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, sample$ 数 10000000, $F = 0.0 \sim 0.18$ 。外場 F の十分な範囲で、 T_{e3} と T_k は等しいように見える。

6.4.3 第五の有効温度 T_{e5}

第三の有効温度、第四の有効温度を求めた時と同様に、速度 $\tilde{V}$ の 6 次までの係数を用いて、 d_0, Γ_0 を

$$d_0 = D_0 + D_2 \langle \tilde{V} \rangle^2 + D_4 \langle \tilde{V} \rangle^4 + D_6 \langle \tilde{V} \rangle^6 \quad (6.32)$$

$$\Gamma_0 = \gamma_0 + 3\gamma_2 \langle \tilde{V} \rangle^2 + 5\gamma_4 \langle \tilde{V} \rangle^4 + 7\gamma_6 \langle \tilde{V} \rangle^6 \quad (6.33)$$

と定義する。 d_0, Γ_0 の結果を、図 41、図 6.5 に示す。

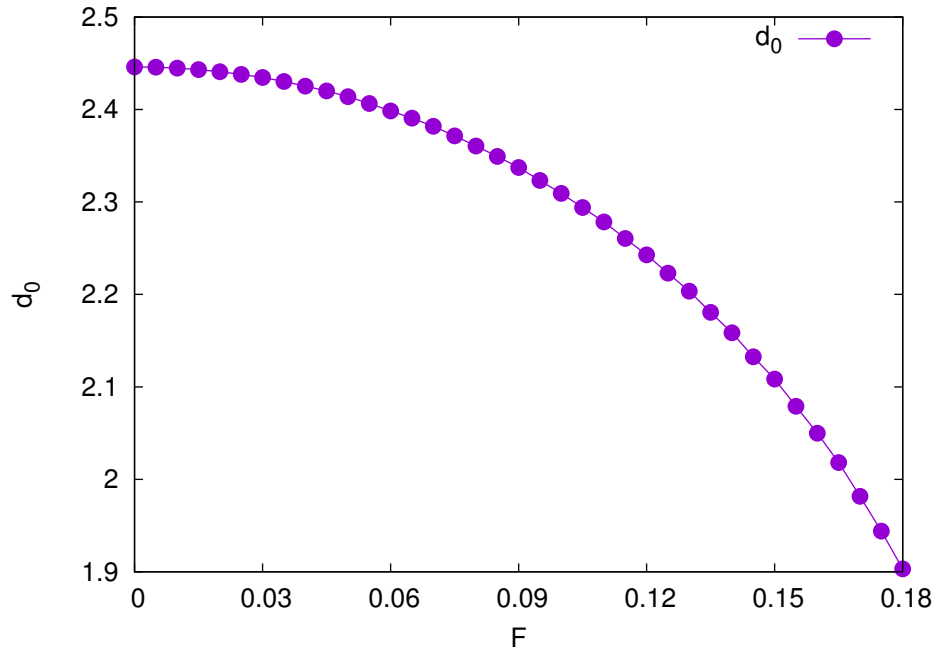


図 41 式 (6.32) で定義される d_0 と、外場 F の関係。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, \text{sample 数 } 100000000, F = 0.0 \sim 0.18$ 。

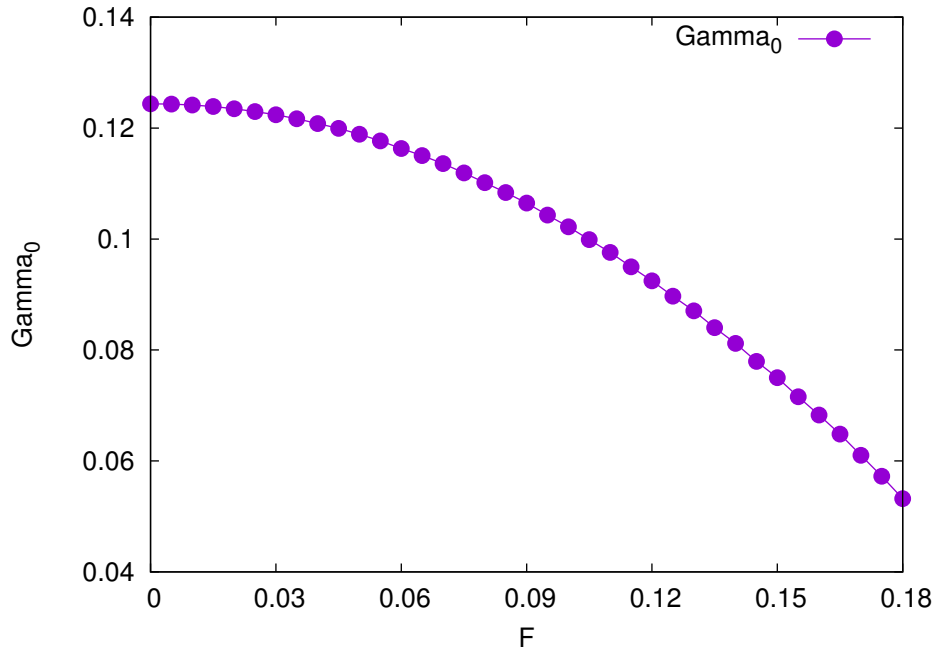


図 42 式 (6.33) で定義される Γ_0 と、外場 F の関係。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, \text{sample 数 } 100000000, F = 0.0 \sim 0.18$ 。

これら値を用いて、 T_{e5} を、

$$\begin{aligned}
 T_{e5} &:= \frac{1}{2} \frac{d_0}{\Gamma_0} \\
 &= \frac{1}{2} \frac{D_0 + D_2 \langle \tilde{V} \rangle^2 + D_4 \langle \tilde{V} \rangle^4 + D_6 \langle \tilde{V} \rangle^6}{\gamma_0 + 3\gamma_2 \langle \tilde{V} \rangle^2 + 5\gamma_4 \langle \tilde{V} \rangle^4 + 7\gamma_6 \langle \tilde{V} \rangle^6}
 \end{aligned} \tag{6.34}$$

と定義する。 T_{e5} を plot すると、図 43 を得る。こちらも、 T_{e4} と同様、外場 F の十分な範囲で、 T_{e5} と T_k は等しいように見える。

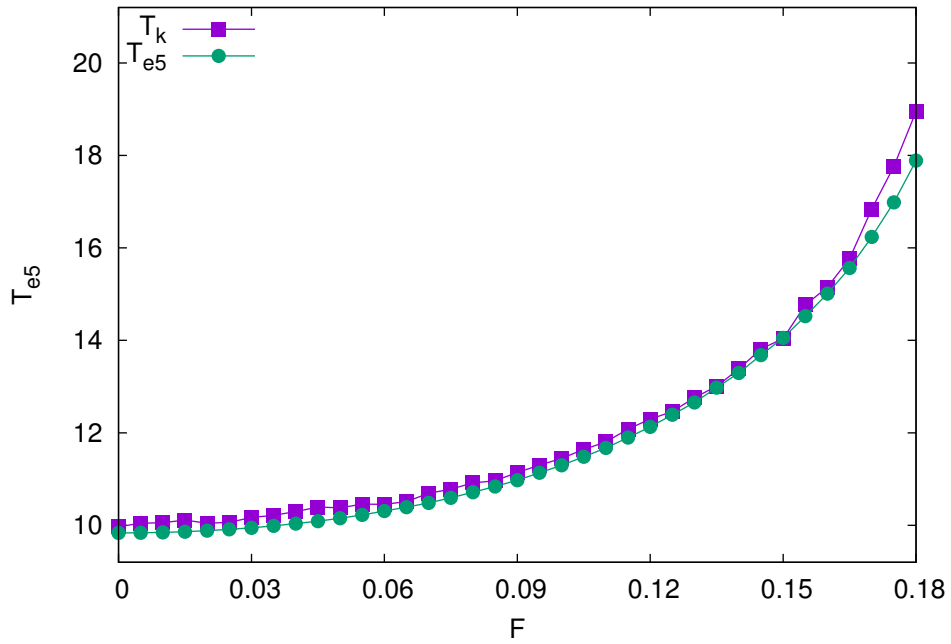


図 43 式 (6.34) で定義される T_{e5} と、運動論的温度 T_k の関係。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, sample$ 数 10000000, $F = 0.0 \sim 0.18$ 。外場 F の十分な範囲で、 T_{e5} と T_k は等しいように見える。

また、 T_{e3}, T_{e4}, T_{e5} を、外場 F が $0 \leq F \leq 0.15$ の範囲で拡大したものが図 44 である。

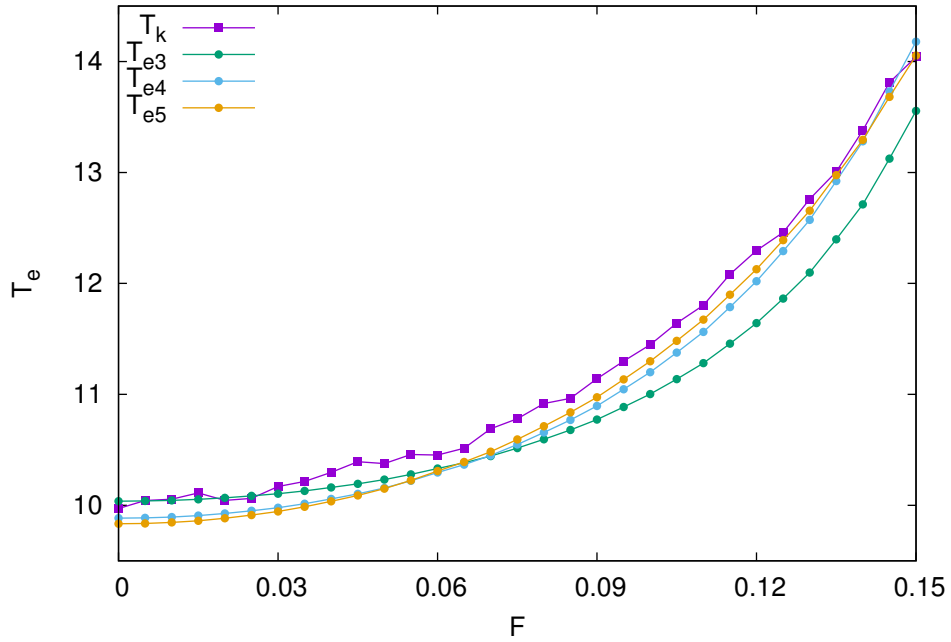


図 44 T_{e3}, T_{e4}, T_{e5} 、運動論的温度 T_k 。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, \text{sample 数 } 10000000, F = 0.0 \sim 0.18$ 。係数の次数が増えるに従って、 T_{e3}, T_{e4}, T_{e5} と T_k が近づいていっているのがわかる。

図 44 を見てみると、係数の次数が増えるに従って、 T_{e3}, T_{e4}, T_{e5} と T_k に近づいていっているのがわかる。

以上のような結果から、非平衡系での温度は絶対系と相対系（揺らぎの系）でそれぞれ違う温度を有効温度として持ち、絶対系では環境（熱浴）の温度 T 、相対系では、運動論的温度 T_k が、それぞれの有効温度となることが示唆される。

6.5 非平衡系での速度相関関数

平衡状態ならば、微粒子の運動は線形ランジュバン方程式

$$M\dot{V} = -\gamma\tilde{V} + R(t) \quad (6.35)$$

にを満たすと仮定すると、上の微分方程式は形式的に解くことができ、微粒子の速度 $\tilde{V}(s)$ は

$$\tilde{V}(t) = \int_{-\infty}^t \frac{R(s)}{M} e^{-\frac{\gamma}{M}(t-s)} ds \quad (6.36)$$

と求めることができる。ここから、速度相関関数が

$$\langle \tilde{V}(t)\tilde{V}(t') \rangle = \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^{t'} \frac{\langle R(s)R(s') \rangle}{M^2} e^{-\frac{\gamma}{M}(s+s')} ds ds' \quad (6.37)$$

$$= \frac{k_B T}{M} e^{-\frac{\gamma}{M}(t-t')} \quad (6.38)$$

となることがわかる。ここから測定された速度相関関数の指数部分と式 (6.38) を比較して、平衡状態での抵抗係数 γ を決定できた。

しかし、微粒子の運動が非線形ランジュバン方程式に従うと仮定するとき、非線形ランジュバン方程式

$$M\dot{V} = -\gamma(\tilde{V})\tilde{V} + \sqrt{D(\tilde{V})}\xi(s) \quad (6.39)$$

$$M\dot{V} = -(\gamma_0 + \gamma_2\tilde{V}^2 + \gamma_4\tilde{V}^4 + \dots)\tilde{V} + \sqrt{D_0 + D_2\tilde{V}^2 + D_4\tilde{V}^4 + \dots}\xi(s) \quad (6.40)$$

は、高次の非線形微分方程式なので、形式的に解くことはできない。

非線形ランジュバン方程式に従うと仮定しても、平衡系で線形ランジュバン方程式を満たすと仮定する場合と同じように、速度相関関数から非線形抵抗 $\gamma(\tilde{V})$ を導出できないだろうか？

非平衡定常系において、粗視化した速度の速度相関関数

$$C_r(s-s') = \langle \tilde{V}(s)\tilde{V}(s') \rangle - \langle \tilde{V}(s) \rangle \langle \tilde{V}(s') \rangle \quad (6.41)$$

を外場 F を変えて測定すると、図 45 の結果が得られた。

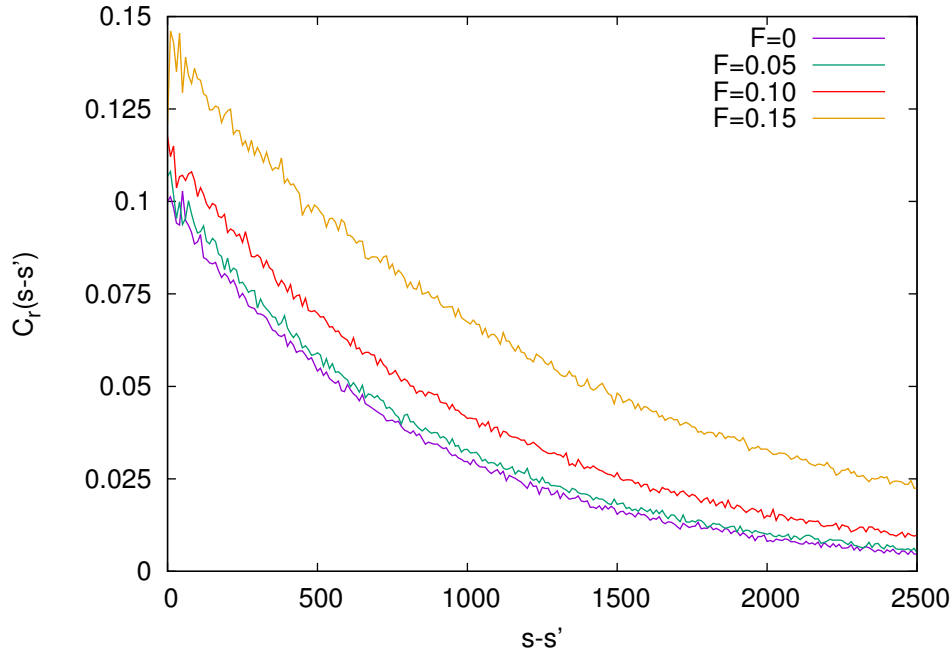


図 45 式 (6.41) で定義される非平衡定常系での速度相関関数 $C_r(s-s')$ 。図は、 $F = 0, 0.05, 0.1, 0.15$ を plot したもの。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, sample$ 数 50000。

また、図 45 のグラフの縦軸に $\log$ をとると、図 46 のようになった。

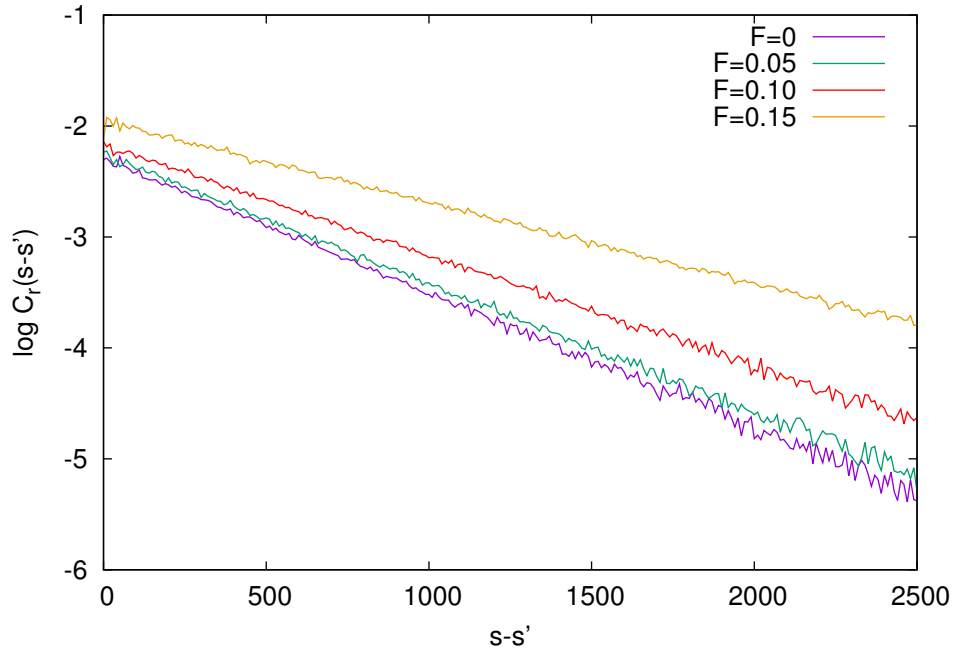


図 46 図 45 の速度相関関数 $C_r(s-s')$ に $\log$ をとったもの ($\log C_r(s-s')$)。図は、 $F = 0, 0.05, 0.1, 0.15$ を plot したもの。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000$, sample 数 50000。 $\log$ をとったものが直線になることから、非平衡定常系で非線形ランジュバン方程式を仮定した時の速度相関関数 $C_r(s-s')$ は、線形ランジュバン方程式の速度相関と同様、指数形であることが予想できる。

図 46 を見てみると、速度相関関数に $\log$ をとると、関数は直線の形になっていることがわかる。ここから、非平衡定常状態でも、速度相関関数は指数的な関数で表されることがわかる。

この直線を、 $y = ax + b$ という 1 次関数で近似できるとして、線形最小自乗法を用いて a, b の値を求めた。ここで、傾き a の値は速度相関関数における指数部分であり、線形ランジュバン方程式から導出した速度相関関数の指数部分は、 $-\frac{\gamma}{M}$ となっていたことから、傾きの値 a には $-M$ をかけた数値は、有益な量となることが予想できる。求めた $-Ma$ の値と、外場 F との関係は、図 47 のようになった。

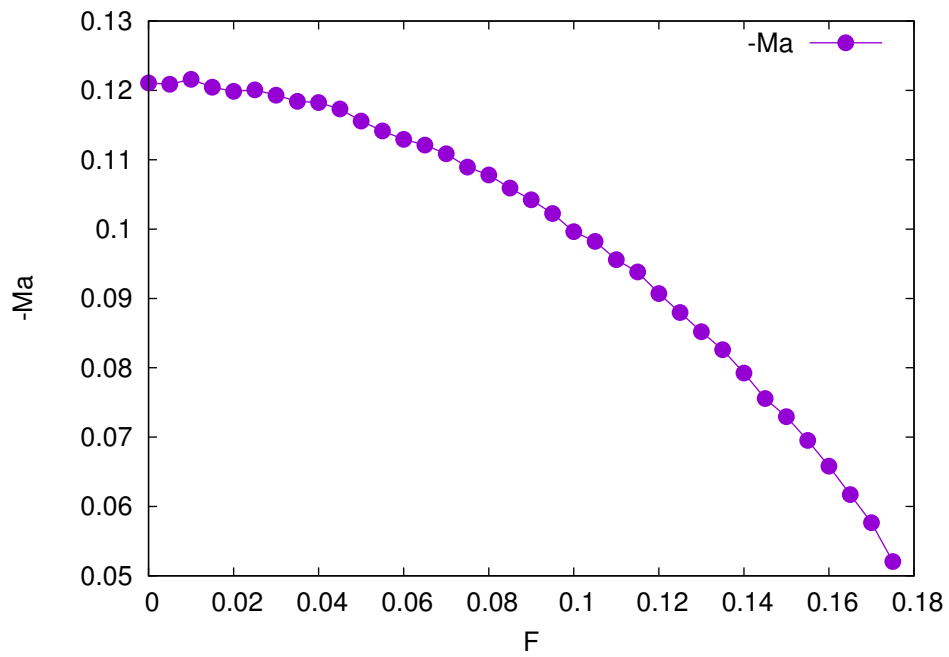


図 47 非平衡定常系での速度相関関数の指数部分 a に、 $-M$ をかけたもの。線形ランジュバン方程式から導出される速度相関関数の、 γ の値と等しい量。

さらに、図 47 のグラフに加えて、非平衡定常系における、相対系での抵抗係数にあたる Γ_0 のグラフを、同時に plot したものが図 48 である。

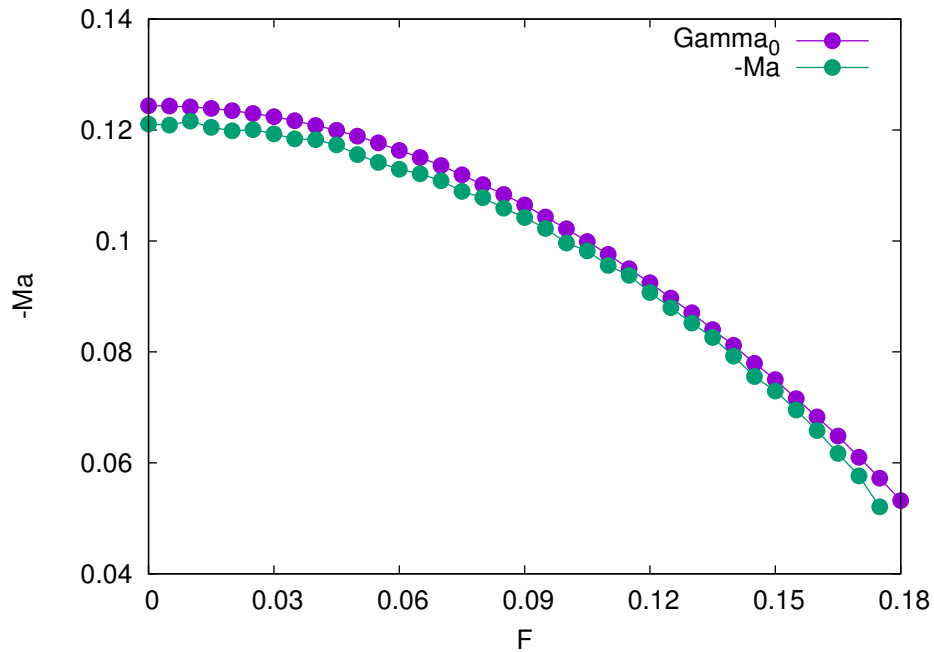


図 48 図 47 と図 6.5 を同時に plot したグラフ。2つのグラフはほぼ一致していることが確認できる。ここから、非平衡定常系において非線形ランジュバン方程式を仮定した時の、速度相関関数から、相対系での抵抗係数 Γ_0 の値が得られることがわかる。また、絶対系での非線形ランジュバン方程式の各係数が、妥当に求められていることも言える。

図 48 において、 Γ_0 と $-Ma$ の 2 つのグラフはほぼ一致していることが確認できる。ここから、非平衡定常系において、非線形ランジュバン方程式を仮定した時の速度相関関数を測定しても、平衡系で線形ランジュバン方程式を仮定した時と同様に、相対系での抵抗係数 Γ_0 の値を得られることがわかる。また、求めた絶対系での非線形ランジュバン方程式の各係数が、妥当な数値であったことも結論づけられる。

7 まとめと今後の課題

まとめ

ランジュバン方程式の決定について

1. 質量 $m \ll M$ となる粒子 m 、微粒子 M が力学的相互作用する系を考えると、微粒子 M の運動を粗視化して観察すれば、ブラウン運動の性質を取り出すことができる。
2. 平衡系では、微粒子の運動は、線形ランジュバン方程式に従うと仮定する。ランジュバン方程式を決定するとは、抵抗力、揺動力の2つの力を決定することであるが、抵抗力の抵抗係数 γ は、速度相関関数の指数部分から決定することができる。さらに得られた γ の値を用いれば、伊藤のランジュバン方程式の式変形から揺動力を定義することができ、その大きさ D を数値計算から決定することができる。
3. 非平衡系では、微粒子の運動は非線形ランジュバン方程式に従うと仮定する。抵抗係数 $\gamma_0, \gamma_2, \gamma_4, \dots$ は、定常状態での平均した力の釣り合いの式 $F = \langle \gamma(\tilde{V})\tilde{V} \rangle$ から決定することができる。また、平衡系と同じく抵抗係数 $\gamma_0, \gamma_2, \gamma_4, \dots$ がわかっているならば、伊藤のランジュバン方程式の式変形から、揺動力を定義し、その大きさ $D(\tilde{V})$ を数値計算から決定することができる。

有効温度について

1. 運動論的温度 $T_k := M \langle (\tilde{V} - \langle \tilde{V} \rangle)^2 \rangle$ は、非平衡系では熱浴の温度 T と一致せず、ある温度 T の領域では $T_k = (1 + aF^2)T$ となる外場 F に2乗の依存性がある。
2. 非平衡系での有効温度を、揺動と散逸の比から定義する。非線形ランジュバン方程式の決定から得られた揺動と散逸の各係数を用いて有効温度について検討すると、絶対系では、有効温度は熱浴の温度 T と等しくなった。
3. 非平衡定常系での定常速度 $\langle \tilde{V} \rangle$ を用いて、揺らぎの速度 $u := \tilde{V} - \langle \tilde{V} \rangle$ を定義する。得られた絶対系での非線形ランジュバン方程式を、揺らぎの速度 u を用いて相対系での運動方程式に書き変える。抵抗力 $\gamma(\tilde{V})\tilde{V}$ を u と $\langle \tilde{V} \rangle$ を用いて書き変えた時の、揺らぎの速度 u の1次の係数を Γ_0 と定義する。同様に、揺動力の大きさ $D(\tilde{V})$ も u と $\langle \tilde{V} \rangle$ を用いて書き換え、その際の u の0次の項を d_0 と定義し、相対系での揺動と散逸の比 $\frac{d_0}{2\Gamma_0}$ で定義される有効温度 T_{eff} を測ると、相対系での有効温度 T_{eff} は運動論的温度 T_k とほぼ一致した。

今後の課題

京都大学大学院の芳賀大樹氏の論文「Nonequilibrium Langevin equation and effective temperature for particle interacting with spatially extended environment」[1]によれば、非平衡定常状態での運動論的温度

T_k は、上昇する場合だけではないことを示唆している。本研究でも、パラメーターの取り方によってそのような運動論的温度 T_k が見られるか検証する必要がある。

今回の研究では、1次元系のみを扱ったが、2次元、3次元のモデルも考えられる。また、今回微粒子は質点であるとしたが、体積がある事を考慮すればさなる知見が得られる可能性がある。

8 付録

ここでは、本編では直接登場しなかったが、本編への思考に至った要因となるものや、測定したデータについて書き記しておく。

8.1 粗視化の必要性

4.1 章の「粗視化」で、「微粒子の運動を粗視化しなければブラウン運動の性質が取り出せなかった」と述べているが、粗視化せずに揺動力を取り出そうとすると、どのようになるか述べる。

8.1.1 トライアル 1

まずは、 γ の決定法、これは釣り合いの方程式から、

$$F = \langle \gamma(V)V \rangle \quad (8.1)$$

が成り立っている。ここで、平衡系では、 γ は定数とみなせるから (γ が速度に依存するのは非線形応答領域のみという仮定)

$$F = \gamma \langle V \rangle \quad (8.2)$$

となる。粗視化する前の微粒子の運動方程式は

$$M\dot{V} = -\frac{\partial H_{int}}{\partial X} + F \quad (8.3)$$

であったが、この両辺に統計平均 $\langle \rangle$ をとると

$$\langle M\dot{V} \rangle = \left\langle -\frac{\partial H_{int}}{\partial X} \right\rangle + F \quad (8.4)$$

$$0 = -\left\langle \frac{\partial H_{int}}{\partial X} \right\rangle + F \quad (8.5)$$

$$\left\langle \frac{\partial H_{int}}{\partial X} \right\rangle = F \quad (8.6)$$

となる。平衡系では、微粒子にかかる力の方向には偏りがないので、左辺 $\langle M\dot{V} \rangle = 0$ となることを用いた。ここまでの過程は実際正しくて、 F を横軸、縦軸に $\langle \frac{\partial H_{int}}{\partial X} \rangle$ を $y = x$ と一緒に plot してみると、図 49 のようになり、十分な数のサンプルをとれば、式 (8.6) が成り立っているのがわかる。

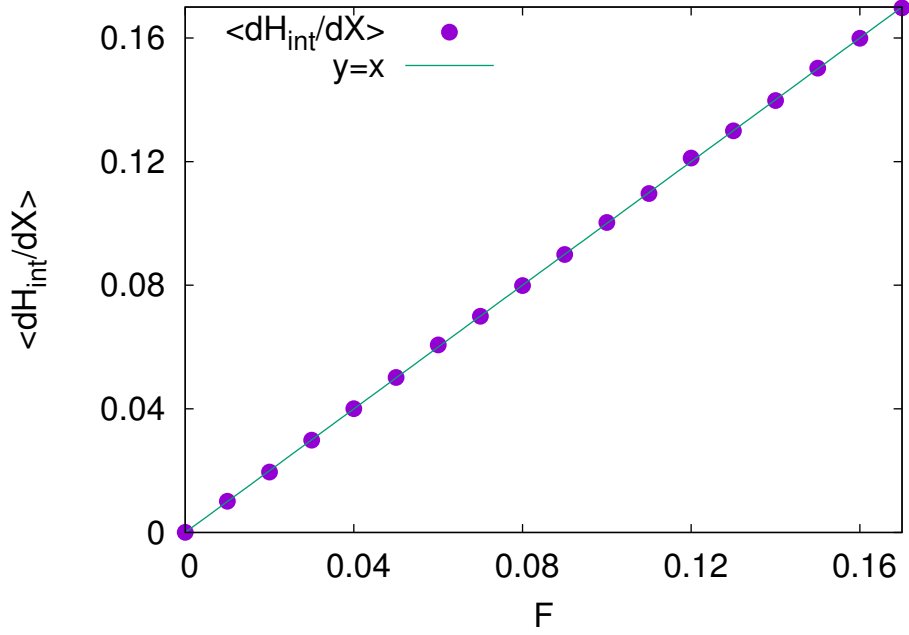


図 49 F と $\langle \frac{\partial H_{int}}{\partial X} \rangle$ を $y = x$ と plot したものの。サンプル数 10000000, $T = 10, L = 1, k = 5, \gamma' = 1, M = 100, m = 1, dt = 0.01, \gamma' = 1, k_B = 1, F = 0$ 。式 (8.6) の関係が成り立っている。

ここで、外場 F が十分に小さい線形応答領域の時、微粒子の運動は、ランジュバン方程式

$$M\dot{V} = -\gamma V + F + \sqrt{D}\xi(t) \quad (8.7)$$

に従っていると仮定する。ここで、式 (8.7) の両辺に統計平均 $\langle \rangle$ をとると

$$\langle \gamma V \rangle = F \quad (8.8)$$

となる。($\langle M\dot{V} \rangle = 0, \langle \sqrt{D}\xi(t) \rangle = 0$ を用いた。) ここで、式 (8.6)、式 (8.8) から、

$$\langle \gamma V \rangle = F = \left\langle \frac{\partial H_{int}}{\partial X} \right\rangle \quad (8.9)$$

であり、平衡状態では γ は定数だから

$$\gamma \langle V \rangle = \left\langle \frac{\partial H_{int}}{\partial X} \right\rangle \quad (8.10)$$

が導ける。もとの運動方程式 (8.3) が、 $F = 0$ の時

$$M\dot{V} = -\frac{\partial H_{int}}{\partial X} \quad (8.11)$$

となるが、ここに $\langle \frac{\partial H_{int}}{\partial X} \rangle$ を加えて引く ($\pm \langle \frac{\partial H_{int}}{\partial X} \rangle$ を加える) と

$$M\dot{V} = -\left\langle \frac{\partial H_{int}}{\partial X} \right\rangle - \left(\frac{\partial H_{int}}{\partial X} - \left\langle \frac{\partial H_{int}}{\partial X} \right\rangle \right) \quad (8.12)$$

となる。上の式の右辺第 1 項は、式 (8.10) から γV と等しい量であるから、第 2 項を $R(t)$ と定義する。

$$R(t) := -\left(\frac{\partial H_{int}(t)}{\partial X} - \left\langle \frac{\partial H_{int}}{\partial X} \right\rangle \right) \quad (8.13)$$

こうして定義した $R(t)$ の、相関関数 $C_R(t-t')$ は

$$C_R(t-t') = \langle R(t)R(t') \rangle - \langle R(t) \rangle \langle R(t') \rangle \quad (8.14)$$

と定義できる。 $t-t'=u$ とおけば、 $C_R(t-t') = C_R(u)$ となる。

ここで、揺動散逸定理 $D = 2\gamma k_B T$ が成り立っているならば、

$$\int_0^\infty C_R(u) du = 2\gamma k_B T \quad (8.15)$$

が成り立つはずである。実際に、熱浴の温度 T を変えて $C_R(u)$ を測ってみると、図 50 のようになる。

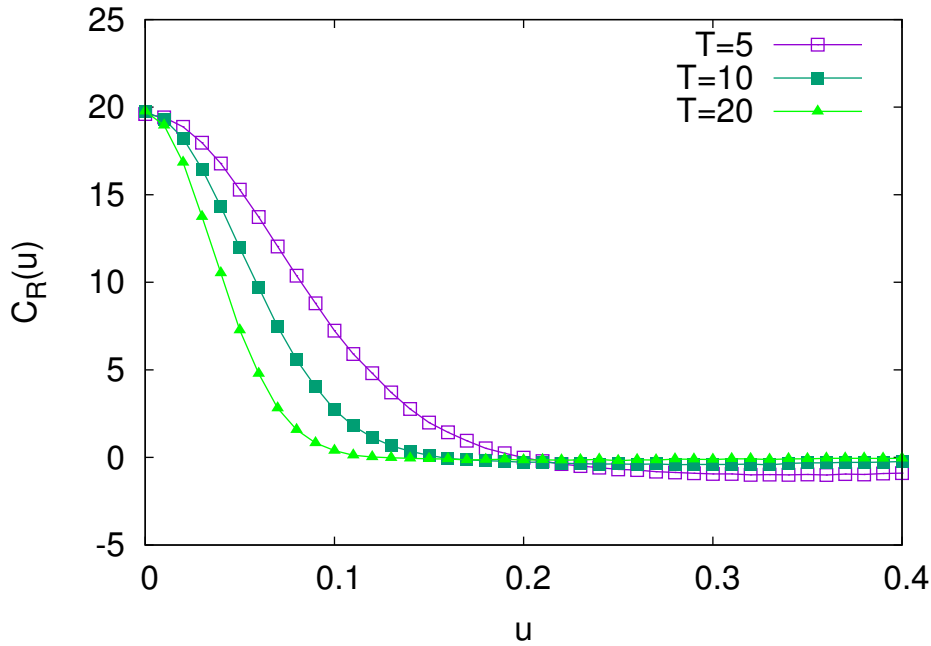


図 50 式 (8.13) で定義した揺動力の相関関数 $C_R(u)$ (式 (8.19))。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, L = 1, k = 5, k_B = 1, \gamma' = 1$, サンプル数 100000, $F = 0$ 。 $T = 5, 10, 20$ の時の $C_R(u)$ を plot したものである。

図 50 の積分値が、理論上では $2\gamma k_B T$ となるべき量である。表 5 は、それぞれの温度での C_R の積分値、速度相関から求めた γ の値、熱浴の温度 T から算出した $2\gamma k_B T$ の値を示したものである。

C_R の積分値と $2\gamma k_B T$ が全く一致していないことがわかる。

8.1.2 トライアル 2

図 50 を見てみると、揺動力の同時刻相関 $C_R(0)$ が、みな同じ値になっていることがわかる。同時刻相関は分散値と等しく、揺動力の分散値は揺動力の特徴的大きさである。この値が、温度 T によって変化していないのは、揺動散逸定理と矛盾する。

ここで、時々刻々の速度 V を数値計算のデータとして使う方向で考える。時々刻々の速度 V の揺らぎは、熱運動する環境粒子の運動によって変化する。つまり、温度 T によって変化する量である。

温度 T	5	10	20
積分値	1.662	1.258	0.9488
γ	0.3543	0.1268	0.04772
$2\gamma k_B T$	3.543	2.536	1.9088

表5 ある温度 T における、式 (8.13) で定義される揺動力の相関関数の積分値 (式 8.15) の左辺、相関関数から算出した γ の値、 $2\gamma k_B T$ の値。積分値は、十分に $C_R = 0$ と見なせるような範囲 (図 50 の $u = 0.4$) までの積分である。積分値と $2\gamma k_B T$ の値は一致していない (式 (8.15) が成り立っていない) ことが確認できる。

平衡状態のランジュバン方程式

$$M\dot{V} = -\gamma V + \sqrt{D}\xi(t) \quad (8.16)$$

を考える。ここで、定数 γ の値は、速度相関から求めたものを使うことにする。上の運動方程式を

$$\sqrt{D}\xi(t) = M\dot{V} + \gamma V \quad (8.17)$$

と変形する。今、 γ がわかっているので、右辺の量は計測可能である。これより、時刻 t における揺動力を $R(t)$ を

$$R(t) := M\dot{V} + \gamma V \quad (8.18)$$

と定義して、相関関数

$$C_R(t - t') = \langle R(t)R(t') \rangle - \langle R(t) \rangle \langle R(t') \rangle \quad (8.19)$$

を測る。結果は、図 51 のようになった。

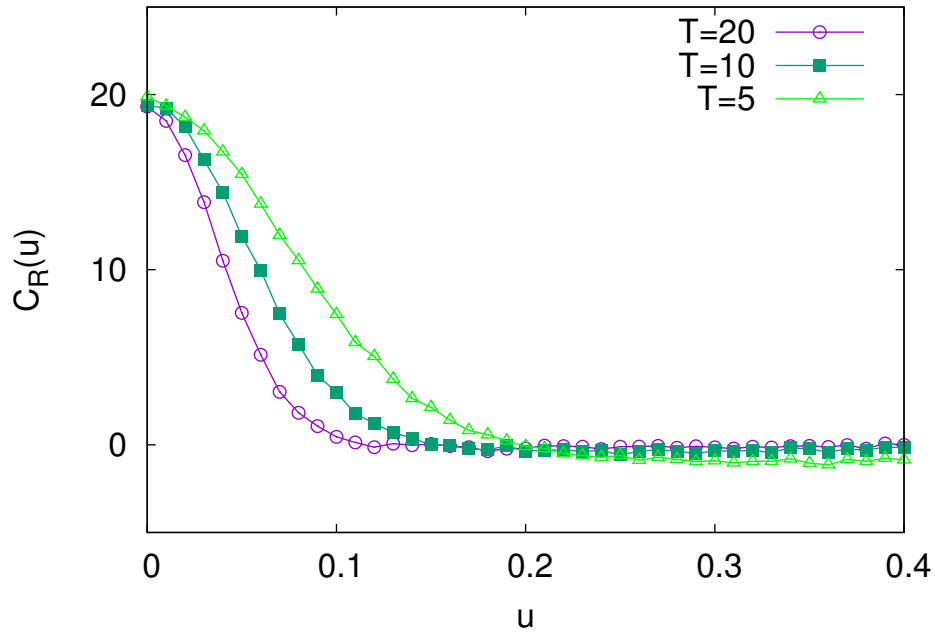


図 51 式 (8.18) で定義した揺動力の相関関数 $C_R(u)$ 。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, L = 1, k = 5, k_B = 1, \gamma' = 1$, サンプル数 50000, $F = 0$. $T = 5, 10, 20$ の時の $C_R(u)$ を plot したもの。図 50 と比較すると、式 (8.18) の定義でも、相関関数の形に大きな変化は見られない

図 50 と比較してみても、あまり変わらない結果だった。積分値と $2\gamma k_B T$ の関係は表 6

温度 T	5	10	20
積分値	1.669	1.263	0.9498
γ	0.3543	0.1268	0.04772
$2\gamma k_B T$	3.543	2.536	1.9088

表 6 ある温度 T における、式 (8.18) で定義される揺動力の相関関数の積分値 (式 (8.15) の左辺)、相関関数から算出した γ の値、 $2\gamma k_B T$ の値。積分値は、十分に $C_R = 0$ と見なせるような範囲 (図 50 の $u = 0.4$) までの積分である。積分値と $2\gamma k_B T$ の値は一致していない (式 (8.15) が成り立っていない) ことが確認できる。

となり、ここでも積分値 $= 2\gamma k_B T$ の関係は成り立っていないことがわかる。

以上のような結果から、このモデルにおいては粗視化しなければブラウン運動としての性質は取り出せないことがわかった。

8.2 フォッカー・プランク方程式による係数の決定法

フォッカー・プランク方程式は、ブラウン運動する粒子の速度分布関数 $\rho(V, t)$ が満たす微分方程式である。非線形ランジュバン方程式は、先に挙げた方法を用いれば係数を決定することができるが、フォッカー・プランク方程式を用いても非線形ランジュバン方程式を決定することができる。

8.2.1 フォッカー・プランク方程式の導出

フォッカー・プランク方程式はランジュバン方程式から出発して、導出することができる。フォッカー・プランク方程式は、あるランジュバン方程式を元にして作られるので、ランジュバン方程式の数だけあるといえる。以下のようなランジュバン方程式から、フォッカー・プランク方程式を導出していく。

$$\dot{V} = F(V) + R(t) \quad (8.20)$$

線形ランジュバン方程式なら $F(V) = -\frac{\gamma}{M}V, R(t) = \frac{\sqrt{2\gamma k_B T}}{M}\xi(t)$ となる。このような形式で書いたのは、導出の際の記述を煩雑にしないためである。

この方程式の強力なところは、ランジュバン方程式が非線形方程式でも成り立つところである。

$F(V) = \frac{F}{M} - \frac{\gamma}{M}V - \frac{\gamma_2}{M}V^3, R(t) = \sqrt{D(V)}\xi(t) = \frac{\sqrt{D_0 + D_2 V^2}}{M}\xi(t)$ といった非線形項を加えても、フォッカー・プランク方程式は成り立つ。

ここでは、 $F(V), R(t)$ はそれぞれ $F(V) = \frac{F}{M} - \frac{\gamma}{M}V - \frac{\gamma_2}{M}V^3, R(t) = \sqrt{D(V)}\xi(t) = \frac{\sqrt{D_0 + D_2 V^2}}{M}\xi(t)$ といった非線形項を含むと仮定して、式 (8.20) から、フォッカー・プランク方程式を導出する。

式 (8.20) の両辺を次のように $t + \Delta t$ で積分する。(離散化)

$$\int_t^{t+\Delta t} \dot{V}(t') dt' = \int_t^{t+\Delta t} F(V(t')) dt + \int_t^{t+\Delta t} R(t') dt' \quad (8.21)$$

この時、 Δt は十分小さく、 Δt の間に $F(V(t'))$ が変化しないと仮定すれば

$$\int_t^{t+\Delta t} F(V(t')) dt \approx F(V(t)) \Delta t \quad (8.22)$$

とすることができるだろう。

$\Delta V := V(t + \Delta) - V(t)$ と定義すると (8.21) は

$$\Delta V = F(V) \Delta t + \Delta W \quad (8.23)$$

となる。ここで、 ΔW は

$$\Delta W := \int_t^{t+\Delta t} R(t') dt' \quad (8.24)$$

である。 ΔW には、

$$\langle \Delta W \rangle = 0 \quad (8.25)$$

$$\langle \Delta W^2 \rangle = \langle D(V) \rangle \Delta t \quad (8.26)$$

という性質がある。

ここで、ある任意関数 $f(V(t))$ を $f(V(t + \Delta t))$ でテーラー展開する。
 まず、比較として、変数 V が t についてなめらかな時 (V がランジュバン方程式に従っていない時) を考える。

$$f(V(t + \Delta t)) = f(V(t)) + \frac{df}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2 f}{dt^2} \Delta t^2 + \dots \quad (8.27)$$

合成関数の微分から、

$$f(V(t + \Delta t)) = f(V(t)) + \frac{df}{dV} \frac{dV}{dt} \Delta t + \Delta t \text{ の 2 次以上} \quad (8.28)$$

となる。強調しておきたいのは、 Δt のオーダーでは $\frac{df}{dV}$ しか含まれないという事だ。2 次 $\frac{d^2 f}{dV^2}$ 以上はない。
 さて、変数 V がもしランジュバン方程式に従うならば、これがどう変化するだろうか。ある任意関数 $f(V)$ を変数 V で展開すると

$$f(V + \Delta V) = f(V) + \frac{\partial f}{\partial V} \Delta V + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} \Delta V^2 + \Delta V \text{ の 3 次以上の項} \quad (8.29)$$

この式に (8.23) を代入すると

$$f(V + \Delta V) = f(V) + \frac{\partial f}{\partial V} (F(V) \Delta t + \Delta W) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} (F(V) \Delta t + \Delta W)^2 + \Delta V \text{ の 3 次以上の項} \quad (8.30)$$

ここで、両辺に統計平均をとると、それぞれの項は

$$\langle f(V + \Delta V) \rangle = \langle f(V) \rangle + \left\langle \frac{\partial f}{\partial V} (F(V) \Delta t + \Delta W) \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} (F(V) \Delta t + \Delta W)^2 \right\rangle + \langle \Delta V \text{ の 3 次以上の項} \rangle \quad (8.31)$$

となる。

結論から述べると、なめらかな関数の場合、 Δt のオーダーでは $\frac{\partial f}{\partial V}$ しか含まないが、 $V(t)$ がランジュバン方程式に従う場合、 Δt のオーダーに $\frac{\partial f}{\partial V}$ 以外の項が現れるのである。

怪しいのは、上の式の右辺第三項から出てくる ΔW^2 の項、つまり

$$\left\langle \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(V(t))}{\partial V^2} \Delta W^2 \right\rangle \quad (8.32)$$

について調べる。

ΔW はもともと

$$\Delta W := \int_t^{t+dt} R(t') dt' \quad (8.33)$$

と定義されたものだった。 $f(V(t))$ での時刻は t だが、 ΔW での時刻は t から $t + dt$ である。マルコフ過程から、時刻 t での $R(t)$ と時刻 $t + dt$ での $R(t + dt)$ は、全く時間相関がない。つまり、 $R(t)$ と $R(t + dt)$ は統計的に独立である。ここで、 ΔW と $f(V(t))$ は、時刻 t のみで重なり、 ΔW の中に現れる t' は、 $t \leq t'$ だから、

$$\left\langle \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(V(t))}{\partial V^2} \Delta W^2 \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial^2 f(V(t))}{\partial V^2} \right\rangle \langle \Delta W^2 \rangle \quad (8.34)$$

となり、式 (8.26) から

$$= \frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial^2 f(V(t))}{\partial V^2} \right\rangle \langle D(V) \rangle \Delta t \quad (8.35)$$

となる。これは、 Δt のオーダーとなっている。

式 (8.31) の右辺第 2 項は

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial V} (F(V) \Delta t + \Delta W) \right\rangle = \left\langle \frac{\partial f}{\partial V} (F(V) \Delta t) \right\rangle + \left\langle \frac{\partial f}{\partial V} \Delta W \right\rangle \quad (8.36)$$

となるが、上の式の右第 2 項は、式 (8.25) から

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial V} \Delta W \right\rangle = \left\langle \frac{\partial f}{\partial V} \right\rangle \langle \Delta W \rangle = 0 \quad (8.37)$$

となる。したがって

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial V} (F(V) \Delta t + \Delta W) \right\rangle = \left\langle \frac{\partial f}{\partial V} (F(V) \Delta t) \right\rangle \quad (8.38)$$

次に、式 (8.31) の右辺第 3 項は

$$\left\langle \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} (F(V) \Delta t + \Delta W)^2 \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} F(V) \Delta t^2 \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} 2F(V) \Delta t \Delta W \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} \Delta W^2 \right\rangle \quad (8.39)$$

右辺第 2 項は、式 (8.34) と同じ理由で Δt と ΔW が統計独立となり、式 (8.25) から 0 となる。また、右辺第 3 項は式 (8.26) を使えば

$$\left\langle \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} \Delta W^2 \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} D(V) \right\rangle \Delta t \quad (8.40)$$

となり、結局式 (8.39) は

$$\left\langle \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} (F(V) \Delta t + \Delta W)^2 \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} F(V) \Delta t^2 \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} D(V) \right\rangle \Delta t \quad (8.41)$$

式 (8.41) 式 (8.38) を式 (8.31) に代入すると

$$\begin{aligned} \langle f(V + \Delta V) \rangle &= \langle f(V) \rangle + \\ &\left\langle \frac{\partial f}{\partial V} F(V) \Delta t \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} F(V) \Delta t^2 \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} D(V) \right\rangle \Delta t + \langle \Delta V \text{ の 3 次以上の項} \rangle \end{aligned} \quad (8.42)$$

ここで、 $R(t)$ はガウス過程ということは、 ΔW がガウス分布に従うということである。この時、 $\langle \Delta W^3 \rangle = 0$ となる。(ガウス分布の歪度は 0) このことから、

$$\langle \Delta V \text{ の 3 次以上の項} \rangle \propto \Delta t^2 \text{ 以上} \quad (8.43)$$

が示せる。したがって、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle f(V) \rangle &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle f(V(t + \Delta t)) \rangle - \langle f(V(t)) \rangle}{\Delta t} \\ &= \left\langle \frac{\partial f}{\partial V} F(V(t)) \right\rangle + \left\langle \frac{D(V)}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} \right\rangle \end{aligned} \quad (8.44)$$

これは、関数 $f(V(t))$ の平均値の方程式を表している。

いよいよ分布関数を用いてフォッカー・プランク方程式を導出していく。
ここで、いくつかの仮定をおく。まず、分布関数 $\rho(V, t)$ は

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \rho(V, t) = 0 \quad (8.45)$$

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\partial \rho(V, t)}{\partial V} = 0 \quad (8.46)$$

が成り立つという仮定をおく。また、平均値は、分布関数を使って

$$\langle f(V(t)) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(V) \rho(V, t) dV \quad (8.47)$$

と表せる。したがって

$$\frac{d}{dt} \langle f(V(t)) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(V) \frac{\partial \rho(V, t)}{\partial t} dV \quad (8.48)$$

となる。

式 (8.44) も平均値で表すことができ、1 項目は

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial V} F(V(t)) \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f}{\partial V} F(V(t)) \rho(V, t) dV \quad (8.49)$$

これを部分積分すると、

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial V} F(V(t)) \right\rangle = [f(V) F(V) \rho(V, t)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f(V) \frac{\partial}{\partial V} \{F(V(t)) \rho(V, t)\} dV \quad (8.50)$$

式 (8.45) から

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial V} F(V(t)) \right\rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} f(V) \frac{\partial}{\partial V} \{F(V(t)) \rho(V, t)\} dV \quad (8.51)$$

平均値の方程式の第 2 項目は

$$\left\langle \frac{D(V)}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} \frac{D(V)}{2} \rho(V, t) dV \quad (8.52)$$

これも部分積分すると、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} \frac{D(V)}{2} \rho(V, t) dV &= \left[\frac{\partial f}{\partial V} \frac{D(V)}{2} \rho(V, t) \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f}{\partial V} \frac{\partial}{\partial V} \frac{D(V)}{2} \rho(V, t) dV \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f}{\partial V} \frac{\partial}{\partial V} \frac{D(V)}{2} \rho(V, t) dV \end{aligned} \quad (8.53)$$

ここで、式 (8.45) を用いた。

もう一度 (8.53) 部分積分すると、

$$\begin{aligned} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f}{\partial V} \frac{\partial}{\partial V} \frac{D(V)}{2} \rho(V, t) dV &= [f(V) \frac{\partial}{\partial V} \frac{D(V)}{2} \rho(V, t)]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} f(V) \frac{\partial^2}{\partial V^2} \frac{D(V)}{2} \rho(V, t) dV \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(V) \frac{\partial^2 \rho(V, t)}{\partial V^2} dV \end{aligned} \quad (8.54)$$

ここで、式 (8.46) を用いている。

結局、平均値の方程式 (8.44) は

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(V) \frac{\partial \rho(V, t)}{\partial t} dV = - \int_{-\infty}^{\infty} f(V) \frac{\partial}{\partial V} \{F(V(t)) \rho(V, t)\} dV + \int_{-\infty}^{\infty} f(V) \frac{\partial^2}{\partial V^2} \frac{D(V)}{2} \rho(V, t) dV \quad (8.55)$$

となり、これが任意の $f(V)$ で成り立つためには

$$\frac{\partial \rho(V, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial V} \{F(V(t)) \rho(V, t)\} + \frac{\partial^2}{\partial V^2} \frac{D(V)}{2} \rho(V, t) \quad (8.56)$$

とならなければならない。この式が、フォッカー・プランク方程式である。

8.2.2 フォッカー・プランク方程式の利用方法

今回扱う系は非平衡定常系である。つまり分布関数 $\rho(V, t)$ は、定常状態ならば時間変化しないので、フォッカー・プランク方程式 (8.56) の左辺は

$$\frac{\partial \rho(V, t)}{\partial t} = 0 \quad (8.57)$$

となる。式 (8.56) の、右辺第 1 項を移項して

$$\frac{\partial}{\partial V} \{F(V(t)) \rho(V)\} = \frac{\partial^2}{\partial V^2} \frac{D(V)}{2} \rho(V) \quad (8.58)$$

ここで、両辺を V で積分すると

$$F(V(t)) \rho(V) = \frac{\partial}{\partial V} \frac{D(V)}{2} \rho(V) + C \quad (8.59)$$

となる。 C は積分定数であるが、両辺を $V \rightarrow \infty$ の極限をとると

$$\lim_{V \rightarrow \infty} F(V(t)) \rho(V) = 0 \quad (8.60)$$

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial V} \frac{D(V)}{2} \rho(V) = 0 \quad (8.61)$$

となるので (式 (55)(56) を用いている)、結果的に $C = 0$ となる。最終的に、定常状態のフォッカー・プランク方程式

$$F(V(t)) \rho(V) = \frac{\partial}{\partial V} \frac{D(V)}{2} \rho(V) \quad (8.62)$$

が得られる。

式 (8.62) において、 $F(V), D(V)$ は、それぞれ

$$F(V) = \frac{F}{M} - \frac{\gamma_0}{M} V - \frac{\gamma_2}{M} V^3 - \frac{\gamma_4}{M} V^5 \dots \quad (8.63)$$

$$D(V) = \frac{D_0}{M^2} + \frac{D_2}{M^2} V^2 + \frac{D_4}{M^2} V^4 \dots \quad (8.64)$$

である。式 (8.62) の右辺を積の微分で展開し、式 (8.63), (8.64) を式 (8.62) に代入すると

$$F(V(t)) \rho(V) = \frac{1}{2} \frac{\partial D(V)}{\partial V} \rho(V) + \frac{D(V)}{2} \frac{\partial \rho(V)}{\partial V} \quad (8.65)$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{F}{M} - \frac{\gamma_0}{M} V - \frac{\gamma_2}{M} V^3 - \frac{\gamma_4}{M} V^5 \dots \right) \rho(V) \\ &= \frac{1}{2} \left(2 \frac{D_2}{M^2} V + 4 \frac{D_4}{M^2} V^3 \dots \right) \rho(V) + \frac{1}{2} \left(\frac{D_0}{M^2} + \frac{D_2}{M^2} V^2 + \frac{D_4}{M^2} V^4 \dots \right) \frac{\partial \rho(V)}{\partial V} \end{aligned} \quad (8.66)$$

となる。この式を使えば、定常状態の粗視化ブラウン運動の速度分布を測定し、数値計算から $\rho(\tilde{V})$, $\frac{\partial \rho(\tilde{V})}{\partial \tilde{V}}$ の値を出すことは可能なので、求めたい $\gamma(\tilde{V})$ の係数、 $D(\tilde{V})$ の係数の数と同じ数のデータがあれば連立方程式を解いて係数を求める事が可能である。

定常状態の微粒子の速度 $\tilde{V}$ の確率密度分布は、図 52 のようになる

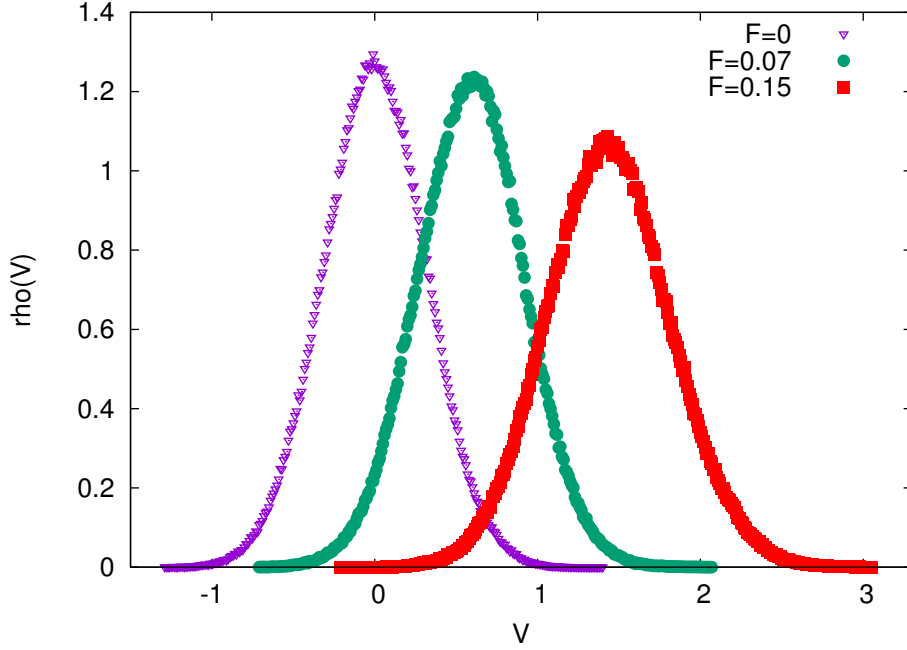


図 52 定常状態の微粒子の速度 $\tilde{V}$ の確率密度分布 $\rho(\tilde{V})$ 。速度 $\tilde{V}$ のサンプル数は 1000000。速度分布を全サンプル数で割って密度にしている。速度 $\tilde{V}$ の区間幅の長さは 0.01 で、分布関数を全体で積分して 1 になるように規格化している。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1\tau = 1000$ のパラメーターで、外場 $F = 0, 0.07, 0.15$ の確率密度分布を plot した。

ここでは、求める未知定数を $\gamma_0, \gamma_2, D_0, D_2$ の 4 つとする。したがって、4 本の連立方程式を解く。 $\gamma_0, \gamma_2, D_0, D_2$ は定数だが、速度 $\tilde{V}$ 、分布 $\rho(\tilde{V})$ は外場 F によって変化する変数である。この F を変化させて、4 本の方程式をつくり、未知定数 $\gamma_0, \gamma_2, D_0, D_2$ を求める。

ここで、確率密度分布 $\rho(\tilde{V})$ をそのまま使うよりも、 $\log \rho(\tilde{V})$ の形に直した方が数値誤差を生みにくく、扱いやすいので、データはすべて $\log$ をとった値からとる。

式 (8.66) の両辺に M をかけて、 $\rho(\tilde{V})$ で割ると

$$\begin{aligned} (F - \gamma_0 \tilde{V} - \gamma_2 \tilde{V}^3 - \gamma_4 \tilde{V}^5) \\ = \frac{1}{2} \left(2 \frac{D_2}{M} \tilde{V} + 4 \frac{D_4}{M} \tilde{V}^3 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{D_0}{M} + \frac{D_2}{M} \tilde{V}^2 \right) \frac{\partial \rho(\tilde{V})}{\partial \tilde{V}} \frac{1}{\rho(\tilde{V})} \end{aligned} \quad (8.67)$$

となる。ここで、右辺最終項の $\frac{\partial \rho(\tilde{V})}{\partial \tilde{V}} \frac{1}{\rho(\tilde{V})}$ は

$$\frac{\partial \rho(\tilde{V})}{\partial \tilde{V}} \frac{1}{\rho(\tilde{V})} = \frac{\partial \log \rho(\tilde{V})}{\partial \tilde{V}} \quad (8.68)$$

と書き換えられる。よって、ある外場 F に対しての $\tilde{V}$, $\frac{\partial \log \rho(\tilde{V})}{\partial \tilde{V}}$ の値を調べれば、連立方程式をたてる事ができる。

ここでは、 $F = 0.15$ のときの分布から、4本の連立方程式のデータを得る。 $F = 0.15$ の時の速度 $\tilde{V}$ の分布に $\log$ をとると、 $\log \rho(\tilde{V})$ は図 53 のようになる。

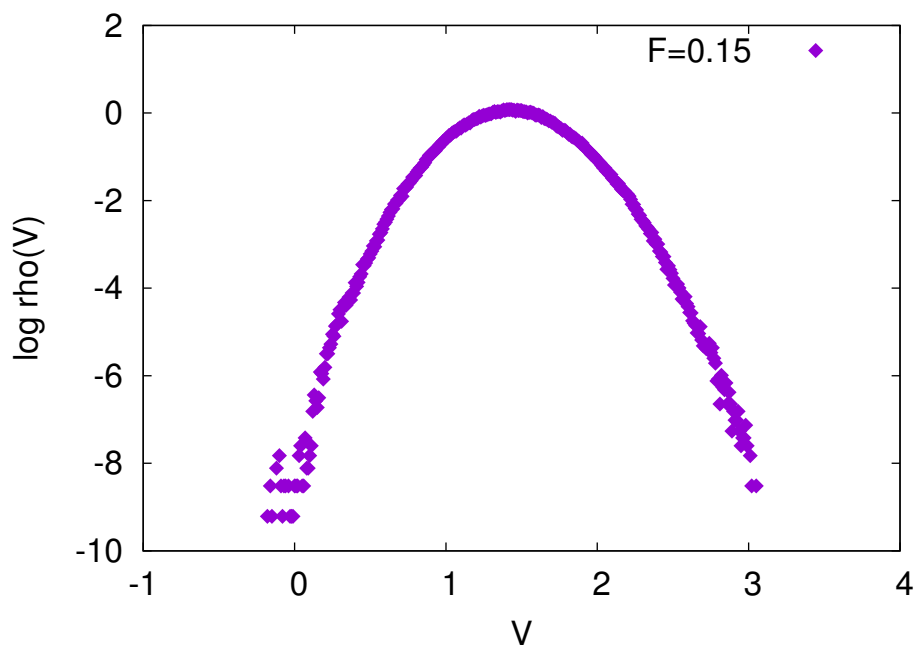


図 53 $F = 0.15$ の時の速度 $\tilde{V}$ の分布 $\rho(\tilde{V})$ 。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000$ の時の粗視化した速度 $\tilde{V}$ の定常状態の速度分布

ここで、 $\frac{\partial \log \rho(\tilde{V})}{\partial \tilde{V}}$ のデータとして用いる点を $\tilde{V} = 0.7, 1.2, 1.7, 2.3$ の 4 点とする。図 54 は、図 53 のグラフにデータに使う 4 点の速度 $\tilde{V} = 0.7, 1.2, 1.7, 2.3$ を書き加えたグラフである。

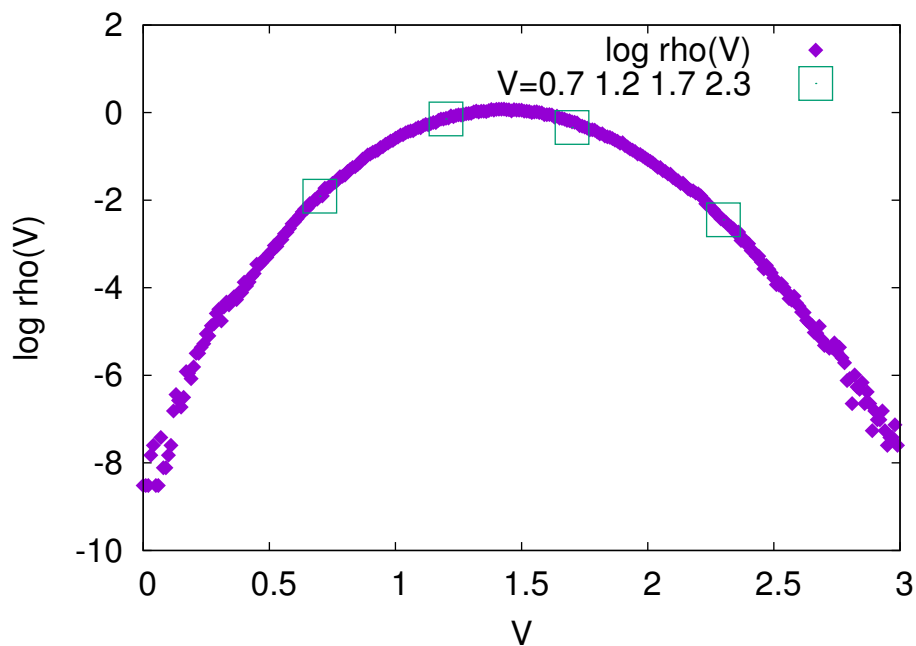


図 54 図 53 の $F = 0.15$ の時の速度 $\tilde{V}$ の分布 $\rho(\tilde{V})$ のグラフに、連立方程式のデータをとる $\tilde{V} = 0.7, 1.2, 1.7, 2.3$ の点をポイントを書き加えたグラフ

各速度のポイントでの $\frac{\partial \log \rho(\tilde{V})}{\partial \tilde{V}}$ の値の決定は、図 55, 57, 57, 58 のように、得られた速度分布の $\log$ をとった値から、ポイントである速度 $\tilde{V} \pm 0.1$ の範囲で、分布関数は直線とであるとみなし、最小自乗法でその傾きと切片を求めることによって $\frac{\partial \log \rho(\tilde{V})}{\partial \tilde{V}}$ の値を決定した。

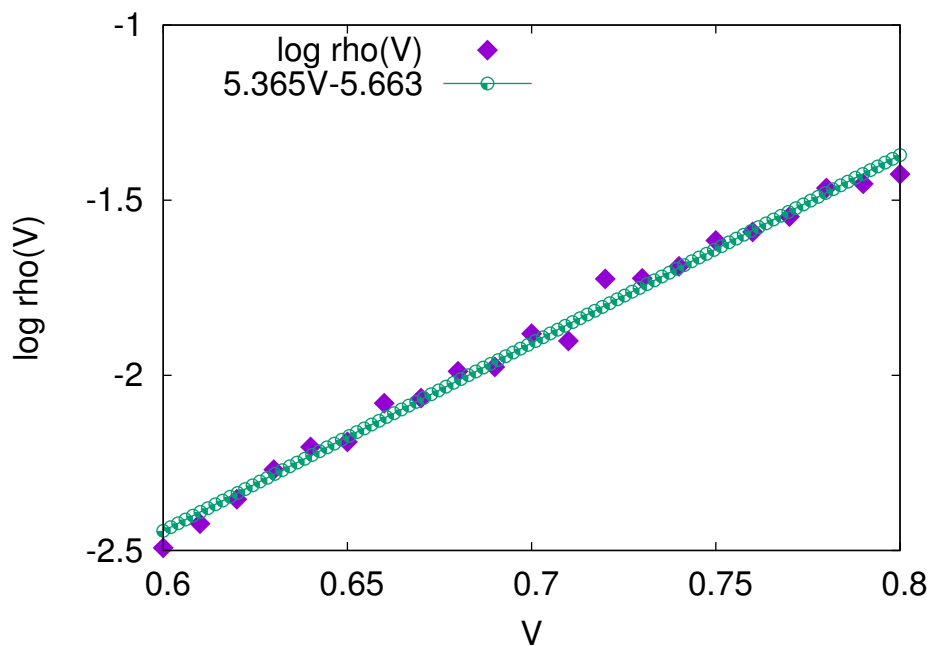


図 55 図 54 の $\tilde{V} = 0.7$ を中心に、 ± 0.1 の範囲の $\log \rho(\tilde{V})$ を plot した。直線は、 $\tilde{V} = 0.6 \sim 0.8$ の間の $\log \rho(\tilde{V})$ を直線とみなし、最小自乗法を用いて導出した近似直線 $5.365\tilde{V} - 5.663$

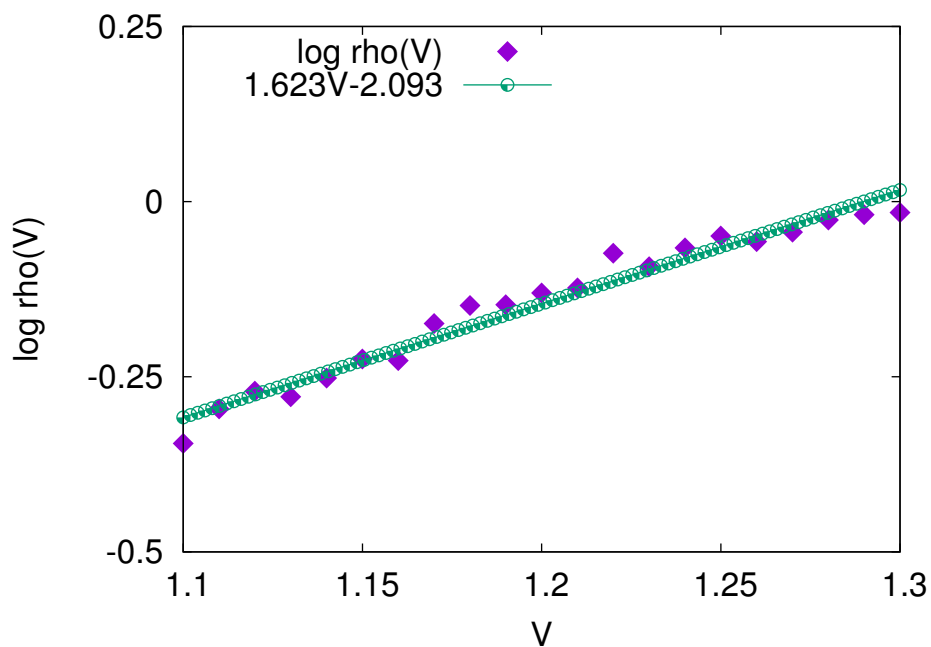


図 56 図 54 の $\tilde{V} = 1.2$ を中心に、 ± 0.1 の範囲の $\log \rho(\tilde{V})$ を plot した。直線は、 $\tilde{V} = 1.1 \sim 1.3$ の間の $\log \rho(\tilde{V})$ を直線とみなし、最小自乗法を用いて導出した近似直線 $1.623\tilde{V} - 2.093$

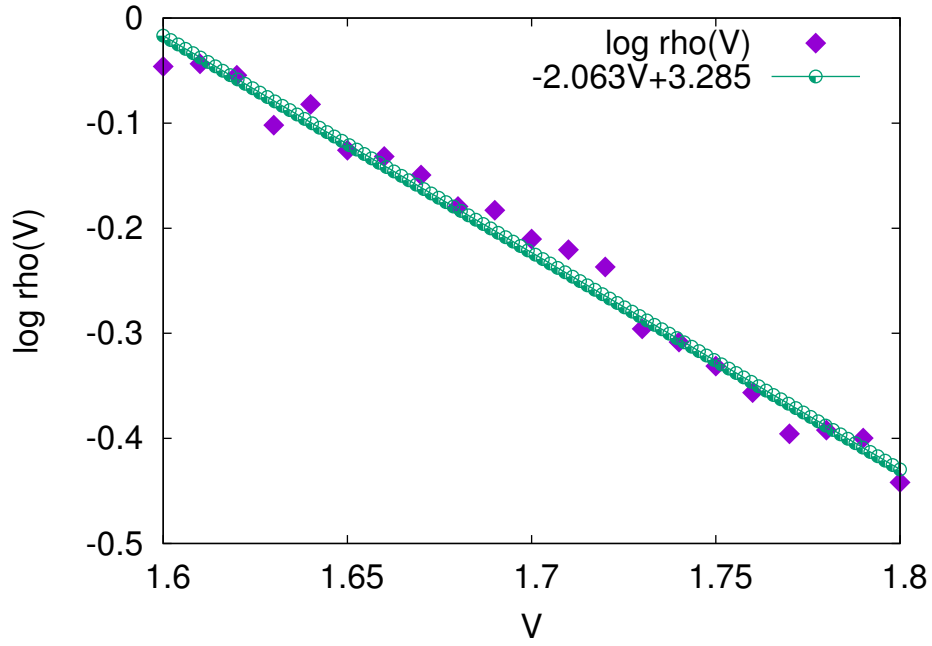


図 57 図 54 の $\tilde{V} = 1.7$ を中心に、 ± 0.1 の範囲の $\log \rho(\tilde{V})$ を plot した。直線は、 $\tilde{V} = 1.6 \sim 1.8$ の間の $\log \rho(\tilde{V})$ を直線とみなし、最小自乗法を用いて導出した近似直線 $-2.063\tilde{V} + 3.285$

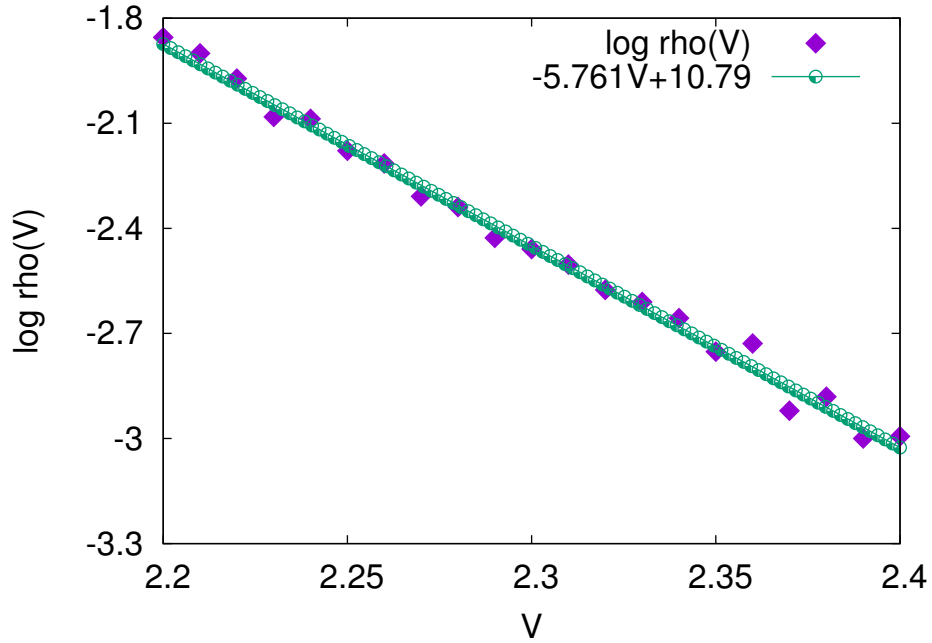


図 58 図 54 の $\tilde{V} = 2.3$ を中心に、 ± 0.1 の範囲の $\log \rho(\tilde{V})$ を plot した。直線は、 $\tilde{V} = 2.2 \sim 2.4$ の間の $\log \rho(\tilde{V})$ を直線とみなし、最小自乗法を用いて導出した近似直線 $-5.761\tilde{V} + 10.79$

$F = 0.15$ での各速度に対する $\frac{\partial \log \rho(\tilde{V})}{\partial \tilde{V}}$ 値は、表 7 のようになった。

$\tilde{V}$	0.7	1.2	1.7	2.3
$\frac{\partial \log \rho(\tilde{V})}{\partial \tilde{V}}$	5.365	1.623	-2.063	5.761

表 7 $F = 0.15$ での速度 $\tilde{V}$ と $\frac{\partial \log \rho(\tilde{V})}{\partial \tilde{V}}$ の数値

表 7 の数値と、 $F = 0.15, M = 100$ を用いて、式 (8.68) 連立方程式を解くと、未知定数 $\gamma_0, \gamma_2, D_0, D_2$ は以下の表 8 ように求まる。また、フォッカー・プランク方程式を用いずに導出した未知定数 $\gamma_0, \gamma_2, D_0, D_2$ は

γ_0	γ_2	D_0	D_2
0.1345	-0.01188	2.618	-0.5152

表 8 連立方程式 (8.68) から、表 7 から得られた数値を用いて求めた未知定数

以下の表 9(表 2 の再掲) になる

γ_0	γ_2	D_0	D_2
0.1210	-0.006744	2.4433	-0.1682

表 9 速度 $\tilde{V}^2$ まで考慮した $\gamma(\tilde{V}), D(\tilde{V})$ の係数。表 2 の再掲。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, sample$ 数 10000000, $F = 0.0 \sim 0.18$ 測定された $\langle \tilde{V} \rangle, \langle \tilde{V}^2 \rangle, \langle \tilde{V}^3 \rangle$, の値と、 $F, \langle D(\tilde{V}) \rangle$ の値から、最小自乗法を用いて決定した。

表 8 と表 9 の値を比較すると、フォッカー・プランク方程式を用いても妥当な数値が出せることがわかる。しかし、この方法では、入力する数値に対して出力される解が敏感に変動したため、最終的に 6.2 章、6.3 章の $F = \gamma(\tilde{V})$ の力の釣り合いを利用する方法と、伊藤のランジュバン方程式の変形から $D(\tilde{V})$ を求める方法を用いることとなった。

8.3 平衡状態の γ の質量 M , 温度 T 依存性

今回の実験で用いたモデルでの平衡系での γ の質量 M , 熱浴の温度 T への依存性を調べる。
 微粒子の質量 M と、熱浴の温度 T を変えて、式 (4.22) の線形応答関係から γ を求めた。結果を図 59 と図 60 に示す。

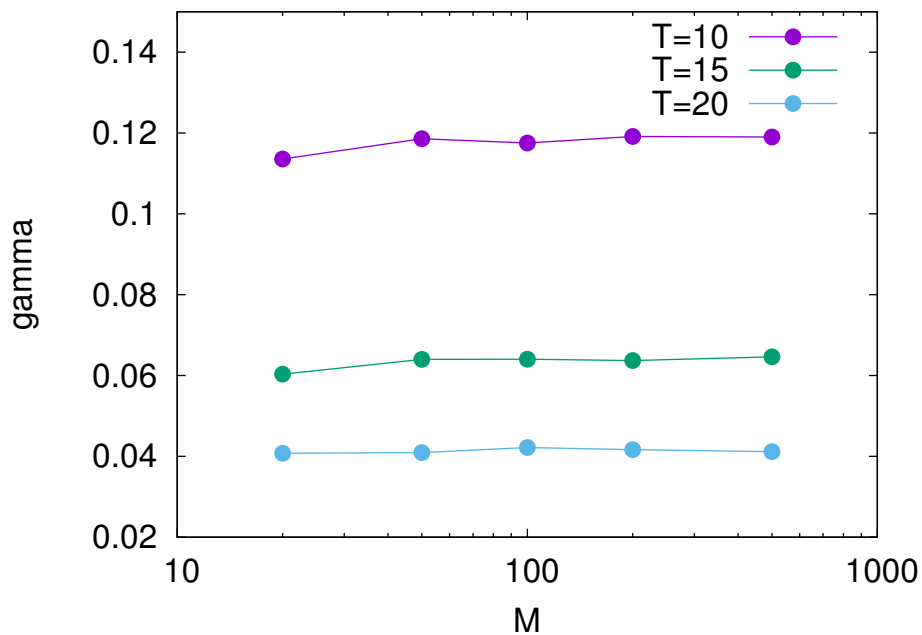


図 59 微粒子の質量 M と γ 図 19 の $F = \gamma \langle \tilde{V} \rangle$ の関係から求めた、 γ と微粒子の質量 M の関係。
 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1$ 。微粒子の質量 M と、抵抗係数 γ には、依存性が無いことがわかる。

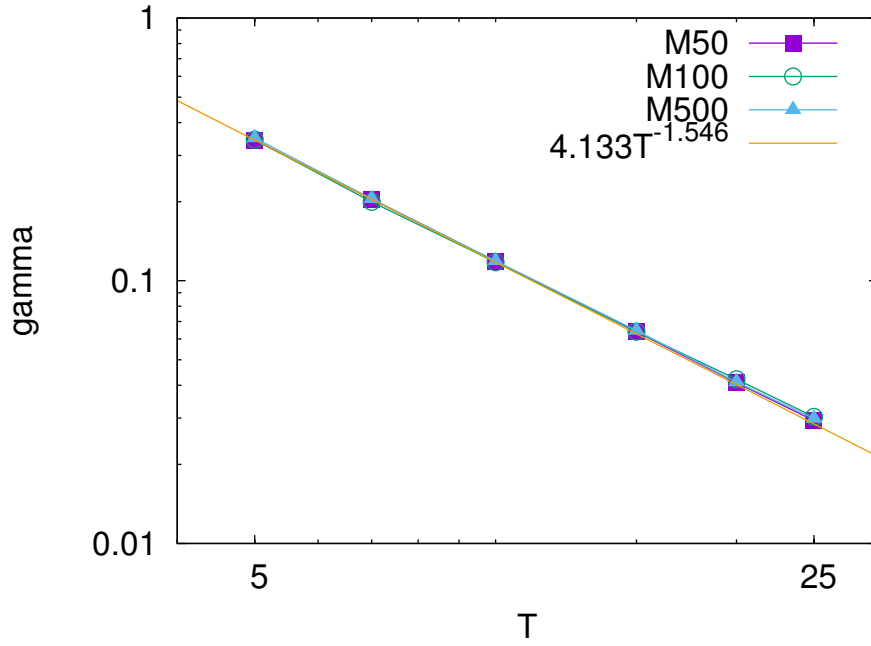


図 60 熱浴の温度 T と γ の関係。 γ は図 19 の $F = \gamma\langle\tilde{V}\rangle$ の関係から求めている。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, k_B = 1$ 熱浴の温度 T と γ はべき的な依存性があり、おおよそ $\gamma = 4.133T^{-1.546}$ の関係が成り立つ。

図 59 を見てみると、質量 M が変化しても、 γ の値は変わっていない。このことから、 γ は微粒子の質量 M に依存しないことがわかる。

図 60 を見てみると、熱浴の温度 T の変化にともなって γ の値は変わっており、 γ は熱浴の温度 T に依存することがわかる。両対数 plot した温度 T と γ の関係がほぼ直線とみなせることから、 $M = 100$ の γ の温度 T 依存性を最小自乗法で近似すると、 γ の温度 T 依存性は、およそ

$$\gamma = 5.482T^{-1.697} \quad (8.69)$$

となった。

8.4 運動論的温度 T_k のパラメーター a の依存性

運動論的温度 T_k は

$$T_k := M \langle (\tilde{V} - \langle \tilde{V} \rangle)^2 \rangle \quad (8.70)$$

で定義されるが、運動論的温度 T_k は、図 61 のように、外場 F に対して

$$T_k = (1 + aF^2)T \quad (8.71)$$

という依存性がみられる。ここで、 T は熱浴の温度である。この運動論的温度のパラメーター a の質量 M 、熱浴の温度 T 、粗視化パラメーター τ の依存性を調べる。

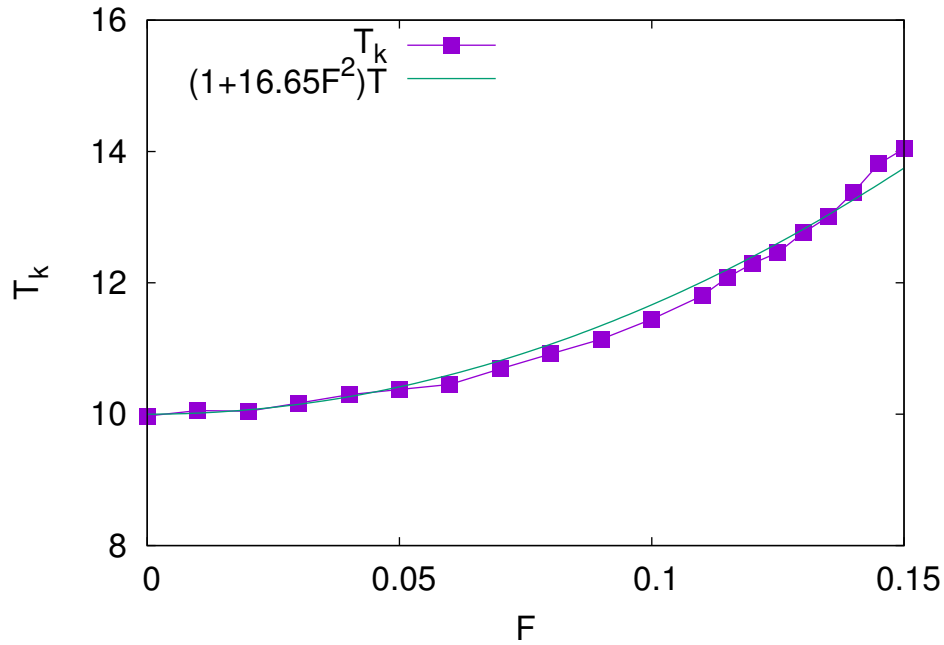


図 61 運動論的温度 T_k の外場 F 依存性。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, sample$ 数 100000000, $F = 0.0 \sim 0.15$ 。外場 F にともなって、上昇していることがわかる。

まず、粗視化パラメーター τ 依存性について調べる。粗視化 τ を変えて運動論的温度を測ったところ、図 62 が得られた。

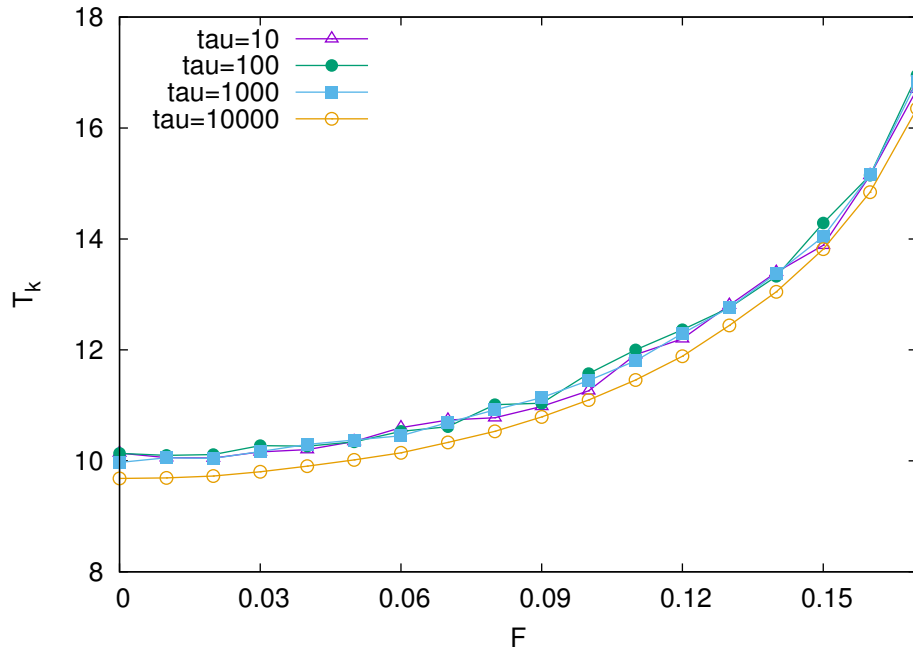


図 62 運動論的温度 T_k の外場 F 、粗視化パラメーター τ 依存性。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, sample$ 数 100000000, $F = 0.0 \sim 0.18$ 。 τ を変化させてもグラフ上の点の位置はほとんど変わらないので、運動論的温度の上昇のパラメーター a は、粗視化パラメーター τ によって変化しないことがわかる。

図 62 を見てみると、運動論的温度は粗視化パラメーター τ によって変化しないことが読み取れる。

次に、微粒子の質量 M 依存性について調べる。粗視化パラメーター τ を 1 に固定し、微粒子の質量 M 、熱浴の温度 T を変えて、この定数 a を調べると図 63、図 64 が得られた。

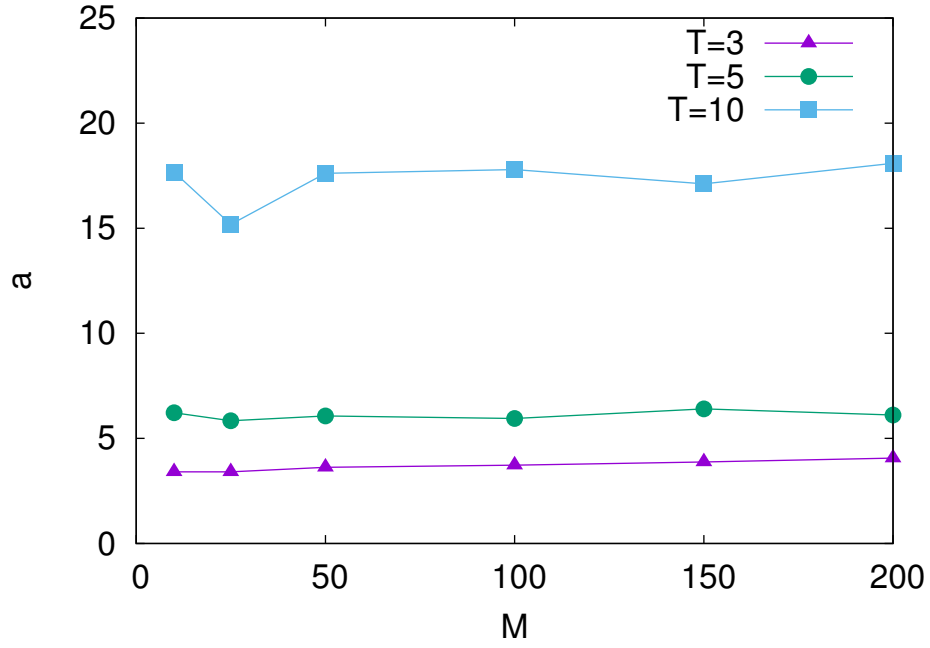


図 63 微粒子の質量 M と a の関係。 $m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, k_B = 1, \tau = 1$, sample 数 100000。微粒子の質量 M を変化させても、運動論的溫度の上昇パラメーター a は変化しないことがわかる。

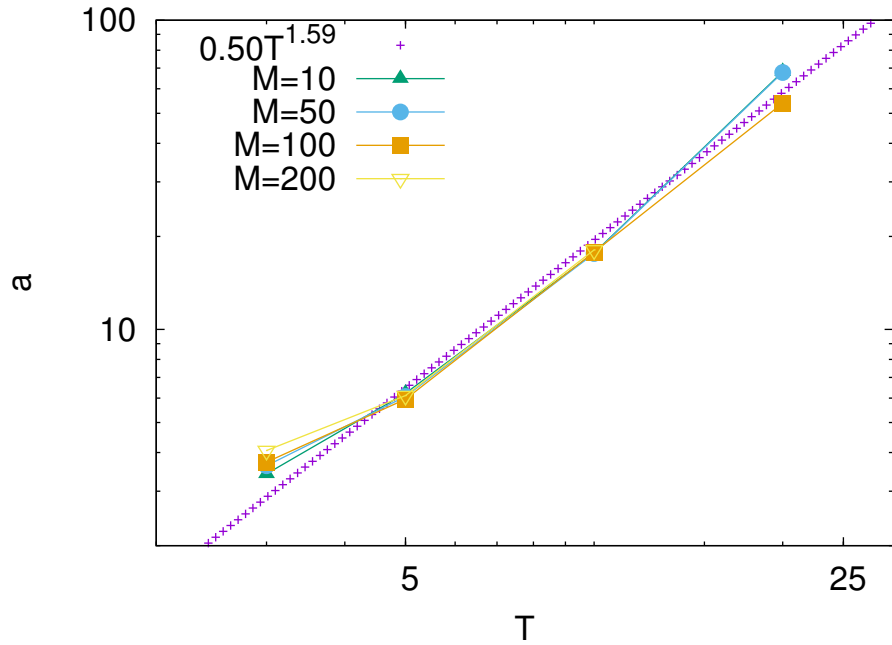


図 64 熱浴の温度 T と a の関係 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, k_B = 1, \tau = 1$, sample 数 1000000。熱浴の温度 T の領域がおおよそ $3 \leq T \leq 20$ の範囲では、運動論的溫度の上昇パラメーター a はおよそべき的な依存性があることがわかる。

図 63 から、定数 a は微粒子の質量の依存しない事がわかる。さらに、図 64 から、熱浴の温度 T が 3 から 20 の範囲では、 a は熱浴の温度 T に、およそ

$$a = 0.4596T^{1.5897} \quad (8.72)$$

という依存性があることがわかった。

なお、微粒子の質量が $25 \leq M$ より大きい範囲で、熱浴の温度 T が $T = 1$ のときは、運動論的温度 T_k は式 (8.71) のように外場 F の 2 乗の依存性は見られず、むしろ外場 F に線形に依存する傾向の方が強かった。

また、同じく微粒子の質量が $25 \leq M$ の範囲で、熱浴の温度が $25 \leq T$ のときも同様に運動論的温度は式 (8.71) のように外場 F の 2 乗の依存性は見られず、外場 F の 3 乗や 4 乗に依存する傾向が見られた。

8.5 積分定義による係数の違い

本研究では、微粒子の運動は、伊藤のランジュバン方程式

$$dx_t = a(x_t, t) + b(x_t, t) \cdot dB_t \quad (8.73)$$

に従うと仮定して、非線形ランジュバン方程式

$$Md\tilde{V} = -\gamma(\tilde{V})\tilde{V}dt + Fdt + \sqrt{D(\tilde{V})} \cdot dB_t \quad (8.74)$$

の係数 $\gamma_0, \gamma_2, \gamma_4, \dots, D_0, D_2, D_4, \dots$ を導出した。ここで、 $\cdot$ は伊藤積と呼ばれる積分定義を用いている事を表している。

伊藤のランジュバン方程式の

$$b(x_t, t)dB_t = \int_t^{t+dt} \sqrt{D(\tilde{V})}\xi(t)dt \quad (8.75)$$

の部分の積分定義は、一つだけではなく、無数に存在する。

積分定義の違いによって、積分値も異なる。本研究では伊藤の積分定義から決めた非線形ランジュバン方程式の係数を決めたが、積分定義によって係数も変わってくる。積分定義の違いによって、係数の値がどのように変わるのか、また、その変化によって、有効温度がどのように変わるのだろうか？

今回は積分定義の中から

1. Ito の積分定義
2. Stratonovich の積分定義
3. Anti - Ito の積分定義

の3つ積分定義に関して、係数がどのように変わってくるか、またそれぞれの積分定義で有効温度はどのようになるのか検証する。なお、以下で式の煩雑さを避けるため

$$f(t) := b(x_t, t) \quad (8.76)$$

と定義する。

1. Ito の積分定義

本研究で用いた積分定義である。Ito の積分定義では、 $f(t)dB_t$ の積分を以下のように定義する。

$$f(t) \cdot dB_t := \lim_{\Delta t \rightarrow 0} f(t)[B_{t+\Delta t} - B_t] \quad (8.77)$$

図 65 は、 $f(t), B_{t+\Delta t} - B_t$ の様子を表したものである。 $f(t)$ は過去の情報で決まる値であり、 $f(t+\Delta t)$ は未来の情報である。伊藤の積分定義は、確率過程として最も一般的な定義であり、過去の情報 $f(t)$ だけを使って値を決めている。伊藤の積分定義では、伊藤積 “ $\cdot$ ” と表記する。

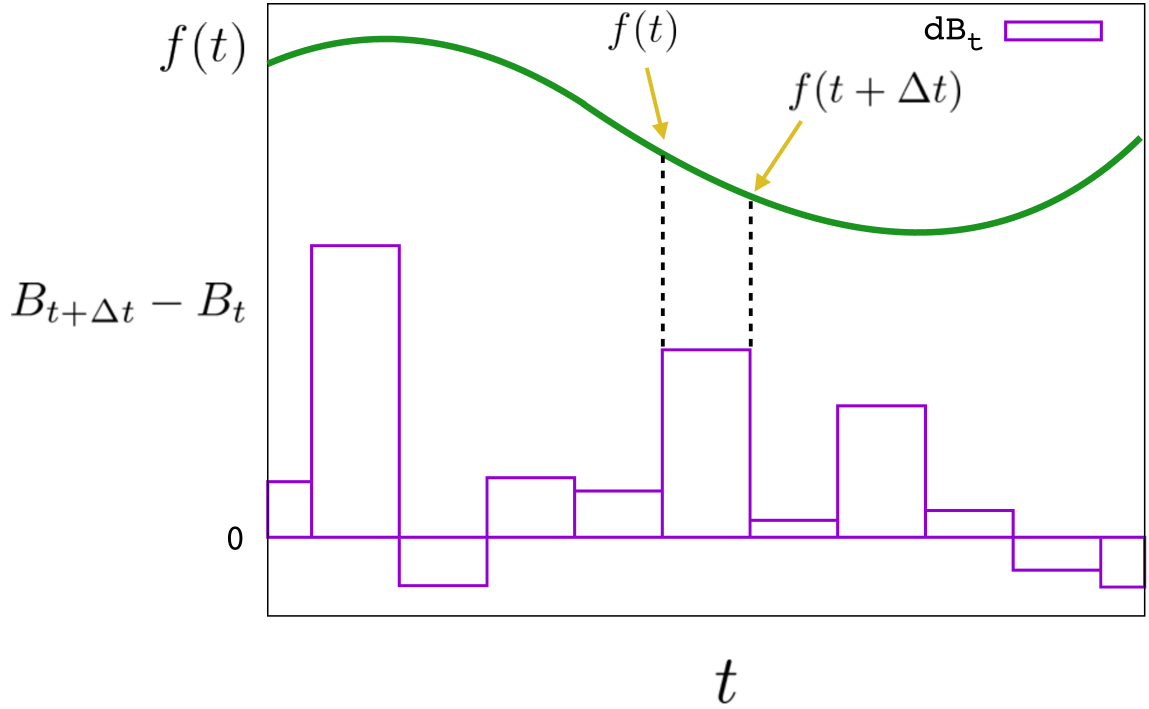


図 65 積分定義による積分値の違い。 $f(t)$ と $f(t + \Delta t)$ は違う値なので、積分定義によって積分値が違う。

2. Stratonovich の積分定義

Stratonovich の積分定義では、 $f(t)dB_t$ の積分を以下のように定義する。

$$f(t) \circ dB_t := \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(t) + f(t + \Delta t)}{2} [B_{t+\Delta t} - B_t] \quad (8.78)$$

伊藤の積分定義と違い、過去の情報 $f(t)$ と未来の情報 $f(t + \Delta t)$ の 2 つを使って値を決めている。Stratonovich 積分は ” $\circ$ ” と表記する。

3. Anti - Ito の積分定義

Anti - Ito の積分定義では、 $f(t)dB_t$ の積分を以下のように定義する。

$$f(t) \otimes dB_t := \lim_{\Delta t \rightarrow 0} f(t + \Delta t) [B_{t+\Delta t} - B_t] \quad (8.79)$$

未来の情報 $f(t + \Delta t)$ だけを使って値を決めている。ちょうど、伊藤の積分定義と反対側の値を使うことから、Anti - Ito の積分定義と呼ばれている。Anti - Ito 積分は ” $\otimes$ ” と表記する。

また、3 つの積分定義の間には、以下の変換公式が成り立つ。

Ito 積分と Stratonovich 積分の変換公式

$$f(x_t) \cdot dB_t = f(x_t) \circ dB_t - \frac{b(x_t, t)}{2} \frac{df(x_t)}{dx_t} dt \quad (8.80)$$

Ito 積分と Anti-Ito 積分の変換公式

$$f(x_t) \cdot dB_t = f(x_t) \circ dB_t - b(x_t, t) \frac{df(x_t)}{dx_t} dt \quad (8.81)$$

3つの積分定義で、感覚として理解しやすいのは、過去の情報だけを使って未来の値を決める Ito の積分定義だが、実際、Ito の積分定義は物理系に合わないのである。

ニュートンの運動方程式の形で書ける普通の関数なら、以下のように全微分が成り立つ。

$$f(x_{t+dt}) = f(x_t + dx_t) \quad (8.82)$$

$$= f(x_t) + \frac{df}{dx} dx_t \quad (8.83)$$

つまり、普通の関数なら $df(x_t) = \frac{df}{dx} dx_t$ が成り立つ。

しかし、伊藤のランジュバン方程式

$$dx_t = a(x_t, t)dt + b(x_t, t)dB_t \quad (8.84)$$

が伊藤積分やアンチ伊藤積分の定義で書かれる時は、全微分が成り立たないのである。

ここで、伊藤のランジュバン方程式が伊藤積分で書かれるとき、

$$df(x_t) = f(x_t + dx_t) - f(x_t) \quad (8.85)$$

$$= f' dx_t + \frac{f''}{2!} (dx_t)^2 + \mathcal{O}(dx_t^3) \quad (8.86)$$

となるが、 $(dx_t)^2$ に式 (8.84) を代入すると、

$$(dx_t)^2 = [a(x_t, t)dt + b(x_t, t) \cdot dB_t]^2 \quad (8.87)$$

$$(dx_t)^2 = b^2(x_t, t)dt + \mathcal{O}(dt^{\frac{3}{2}}) \quad (8.88)$$

ここで、 $dB_t^2 = dt$ を用いた。このように、 $(dx_t)^2$ に dt のオーダーが含まれることがわかる。よって $df(x_t)$ は

$$df(x_t) = f' dx_t + \frac{f''}{2!} b^2(x_t, t)dt + \mathcal{O}(dt^{\frac{3}{2}}) \quad (8.89)$$

となり全微分系にならない。アンチ伊藤の積分定義の時も、同様に全微分形式にならない。

しかし Stratonovich の積分定義

$$dx_t = a(x_t, t)dt + b(x_t, t) \circ dB_t \quad (8.90)$$

の場合、Ito と Stratonovich 変換公式を用いると dx_t は

$$dx_t = a(x_t, t)dt + b(x_t, t) \cdot dB_t + \frac{b(x_t, t)}{2} b' dt \quad (8.91)$$

となる。この時、 $df(x_t)$ がどのようなになるか調べる。なお、以降では簡単のため $a(x_t, t) := a, b(x_t, t) := b, f(x_t) := f$ と表記する。

$$df(x_t) = f(x_t + dx_t) - f(x_t) \quad (8.92)$$

$$= f' dx_t + \frac{f''}{2!} (dx_t)^2 + \dots \quad (8.93)$$

$$= f'(adt + b dB_t + \frac{bb'}{2} dt) \quad (8.94)$$

$$+ \frac{f''}{2!} (adt + b dB_t + \frac{bb'}{2} dt)^2 + \dots \quad (8.95)$$

$$= (f'a + f'\frac{bb'}{2} + \frac{f''}{2} b^2) dt + f'b \cdot dB_t \dots \quad (8.96)$$

$$(8.97)$$

ここで、式 (8.80) から、 $f'b \cdot dB_t$ を Stratonovich 積分に変換すると

$$= (f'a + f'\frac{bb'}{2} + \frac{f''}{2} b^2) dt + (f'b) \cdot dB_t \dots \quad (8.98)$$

$$= (f'a + f'\frac{bb'}{2} + \frac{f''}{2} b^2) dt + f'b \circ dB_t - \frac{1}{2} (f'b)' b dt \dots \quad (8.99)$$

$$= (f'a + f'\frac{bb'}{2} + \frac{f''}{2} b^2) dt + f'b \circ dB_t - \frac{f''}{2} b^2 dt - f'\frac{bb'}{2} dt \dots \quad (8.100)$$

$$= f'(adt + b \circ dB_t) \quad (8.101)$$

$$= f' dx_t \quad (8.102)$$

となり、全微分系が成り立つので、物理系と合う。

Ito 積分と Stratonovich 積分の変換公式を使って伊藤の積分定義で定義した非線形ランジュバン方程式

$$Md\tilde{V} = -\gamma(\tilde{V})\tilde{V}dt + Fdt + \sqrt{D(\tilde{V})} \cdot dB_t \quad (8.103)$$

を変形すると、

$$d\tilde{V} = -\frac{\gamma}{M}(\tilde{V})\tilde{V}dt + \frac{F}{M}dt + \frac{\sqrt{D(\tilde{V})}}{M} \cdot dB_t \quad (8.104)$$

$$d\tilde{V} = -\frac{\gamma}{M}(\tilde{V})\tilde{V}dt + \frac{F}{M}dt + \frac{\sqrt{D(\tilde{V})}}{2M} \frac{d}{d\tilde{V}} \frac{\sqrt{D(\tilde{V})}}{M} dt + \frac{\sqrt{D(\tilde{V})}}{M} \circ dB_t \quad (8.105)$$

$$d\tilde{V} = -\frac{\gamma}{M}(\tilde{V})\tilde{V}dt + \frac{F}{M}dt + \frac{\sqrt{D(\tilde{V})}}{2M^2} \frac{d\sqrt{D(\tilde{V})}}{d\tilde{V}} dt + \frac{\sqrt{D(\tilde{V})}}{M} \circ dB_t \quad (8.106)$$

$$d\tilde{V} = -\frac{\gamma}{M}(\tilde{V})\tilde{V}dt + \frac{F}{M}dt + \frac{1}{4M^2} \frac{dD(\tilde{V})}{d\tilde{V}} dt + \frac{\sqrt{D(\tilde{V})}}{M} \circ dB_t \quad (8.107)$$

$$Md\tilde{V} = -(\gamma(\tilde{V})\tilde{V} + \frac{1}{4M} \frac{d\sqrt{D(\tilde{V})}}{d\tilde{V}})dt + Fdt + \sqrt{D(\tilde{V})} \circ dB_t \quad (8.108)$$

ここで

$$\gamma(\tilde{V}) = \gamma_0 + \gamma_2 \tilde{V}^2 + \gamma_4 \tilde{V}^4 + \gamma_6 \tilde{V}^6 + \dots \quad (8.109)$$

$$D(\tilde{V}) = D_0 + D_2 \tilde{V}^2 + D_4 \tilde{V}^4 + D_6 \tilde{V}^6 + \dots \quad (8.110)$$

なので、式 (8.108) の右辺第一項の $\gamma(\tilde{V})\tilde{V} + \frac{1}{4M} \frac{d\sqrt{D(\tilde{V})}}{d\tilde{V}}$ は

$$\gamma(\tilde{V}) + \frac{d\sqrt{D(\tilde{V})}}{d\tilde{V}} = \gamma_0 + \gamma_2\tilde{V}^2 + \gamma_4\tilde{V}^4 + \cdots + \frac{1}{2M} \frac{d}{d\tilde{V}}(D_0 + D_2\tilde{V}^2 + D_4\tilde{V}^4 \cdots) \quad (8.111)$$

$$= \gamma_0 + \gamma_2\tilde{V}^2 + \gamma_4\tilde{V}^4 + \cdots + \frac{1}{4M}(2D_2\tilde{V} + 4D_4\tilde{V}^3 + 6D_6\tilde{V}^5 + \cdots) \quad (8.112)$$

$$= (\gamma_0 + \frac{D_2}{2M})\tilde{V} + (\gamma_2 + \frac{D_4}{M})\tilde{V}^3 + (\gamma_4 + \frac{3D_6}{2M})\tilde{V}^5 \cdots \quad (8.113)$$

となる。ここで、新たに

$$\gamma_s(\tilde{V}) = \gamma_{s0} + \gamma_{s2}\tilde{V}^2 + \gamma_{s4}\tilde{V}^4 + \cdots \quad (8.114)$$

となる $\gamma_s(\tilde{V})$ を定義すると、 $\gamma_s(\tilde{V})$ の係数はそれぞれ

$$\gamma_{s0} = \gamma_0 + \frac{D_2}{2M} \quad (8.115)$$

$$\gamma_{s2} = \gamma_2 + \frac{D_4}{M} \quad (8.116)$$

$$\gamma_{s4} = \gamma_4 + \frac{3D_6}{2M} \quad (8.117)$$

⋮

となる。

同様に、Ito 積分と Anti-Ito 積分の変換公式 (8.81) を用いて、伊藤のランジュバン方程式を Anti-Ito 形に変換すると

$$Md\tilde{V} = -(\gamma(\tilde{V})\tilde{V} + \frac{1}{2M} \frac{d\sqrt{D(\tilde{V})}}{d\tilde{V}})dt + Fdt + \sqrt{D(\tilde{V})} \otimes dB_t \quad (8.118)$$

となり、Stratonovich の場合と同様に

$$\gamma_A(\tilde{V}) = \gamma_{A0} + \gamma_{A2}\tilde{V}^2 + \gamma_{A4}\tilde{V}^4 + \cdots \quad (8.119)$$

となる $\gamma_A(\tilde{V})$ を仮定すると、

$$\gamma_{A0} = \gamma_0 + \frac{D_2}{M} \quad (8.120)$$

$$\gamma_{A2} = \gamma_2 + \frac{2D_4}{M} \quad (8.121)$$

$$\gamma_{A4} = \gamma_4 + \frac{3D_6}{M} \quad (8.122)$$

⋮

となる $\gamma_{A0}, \gamma_{A2}, \gamma_{A4}, \cdots$ が得られる。

速度 $\tilde{V}$ の 2 次まで考慮して、 γ_s, γ_A の係数を求めると、表 8.5 のような結果になる。比較のため、伊藤の積分定義から得られた係数も加えた。なお、ここで γ_{s2}, γ_{A2} を導出する際、 $D_4 = 0$ を仮定している。

さらに、 $\tilde{V}^4$ まで考慮した際 γ_s, γ_A の係数は、表 11 のようになる。なお、ここで γ_{s4}, γ_{A4} を導出する際、 $D_6 = 0$ を仮定している。

D_0	D_2
2.4433	-0.1682
γ_0	γ_2
0.1210	-0.006744
γ_{s0}	γ_{s2}
0.1204	-0.006744
γ_{A0}	γ_{A2}
0.1196	-0.006744

表 10 速度 $\tilde{V}^2$ まで考慮した γ_s, γ_A の係数。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, sample$ 数 10000000, $F = 0.0 \sim 0.18$ 。

D_0	D_2	D_4
2.444	-0.1785	0.008708
γ_0	γ_2	γ_4
0.1236	-0.009407	0.0004505
γ_{s0}	γ_{s2}	γ_{s4}
0.1227	-0.009319	0.0004505
γ_{A0}	γ_{A2}	γ_{A4}
0.1219	-0.009232	0.0004505

表 11 速度 $\tilde{V}^4$ まで考慮した γ_s, γ_A の係数。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, sample$ 数 10000000, $F = 0.0 \sim 0.18$ 。

さらに、 $\tilde{V}^6$ まで考慮した際 γ_s, γ_A の係数は、表 12 のようになる。なお、ここで γ_{s6}, γ_{A6} を導出する際、 $D_8 = 0$ を仮定している。

D_0	D_2	D_4	D_6
2.446	-0.1876	0.01422	-0.0006998
γ_0	γ_2	γ_4	γ_6
0.1243	-0.01078	0.001003	-0.00005438
γ_{s0}	γ_{s2}	γ_{s4}	γ_{s6}
0.1234	-0.01065	0.0009922	-0.00005438
γ_{A0}	γ_{A2}	γ_{A4}	γ_{A6}
0.1225	-0.01050	0.0009817	-0.00005438

表 12 速度 $\tilde{V}^6$ まで考慮した γ_s, γ_A の係数。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, sample$ 数 10000000, $F = 0.0 \sim 0.18$ 。

表から、積分定義による違いはあまりないことがわかる。
 また、積分定義に違いによって相対系での有効温度

$$T_{e3} := \frac{1}{2} \frac{D_0 + D_2 \langle \tilde{V} \rangle^2}{\gamma_0 + 3\gamma_2 \langle \tilde{V} \rangle^2} \quad (8.123)$$

$$T_{e4} := \frac{1}{2} \frac{D_0 + D_2 \langle \tilde{V} \rangle^2 + D_4 \langle \tilde{V} \rangle^4}{\gamma_0 + 3\gamma_2 \langle \tilde{V} \rangle^2 + 5\gamma_4 \langle \tilde{V} \rangle^4} \quad (8.124)$$

$$T_{e5} := \frac{1}{2} \frac{D_0 + D_2 \langle \tilde{V} \rangle^2 + D_4 \langle \tilde{V} \rangle^4 + D_6 \langle \tilde{V} \rangle^6}{\gamma_0 + 3\gamma_2 \langle \tilde{V} \rangle^2 + 5\gamma_4 \langle \tilde{V} \rangle^4 + 7\gamma_6 \langle \tilde{V} \rangle^6} \quad (8.125)$$

の $\gamma_0, \gamma_2, \gamma_4, \dots$ の値を、それぞれ $\gamma_{s0}, \gamma_{s2}, \gamma_{s4}, \dots, \gamma_{A0}, \gamma_{A2}, \gamma_{A4}, \dots$ に置き換えて、有効温度が積分定義によって変化するかどうか検証すると、図 66(T_{e3}), 図 67(T_{e4}), 図 68(T_{e5}) のようになる。

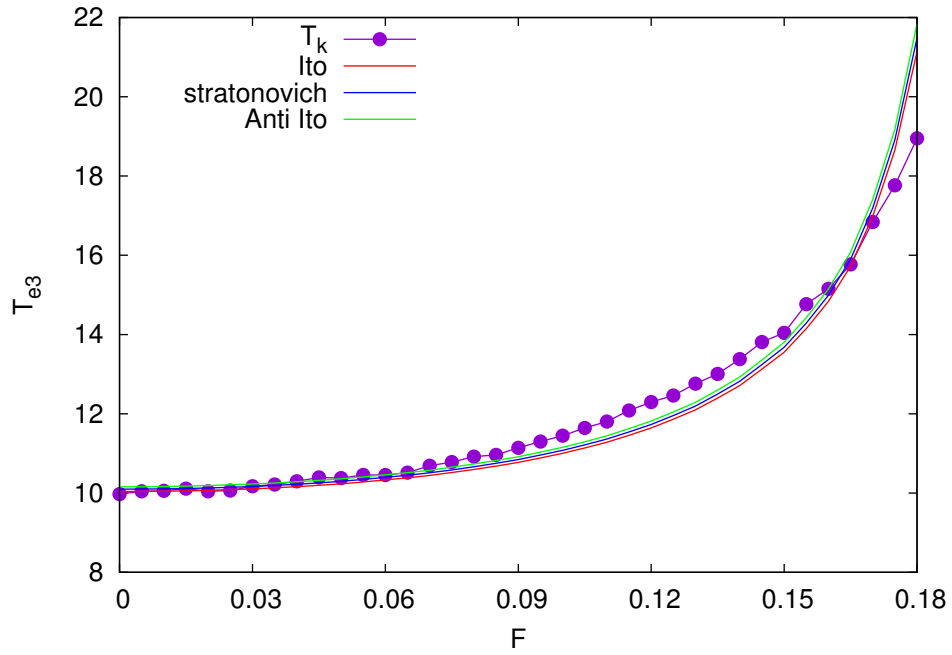


図 66 T_{e3}

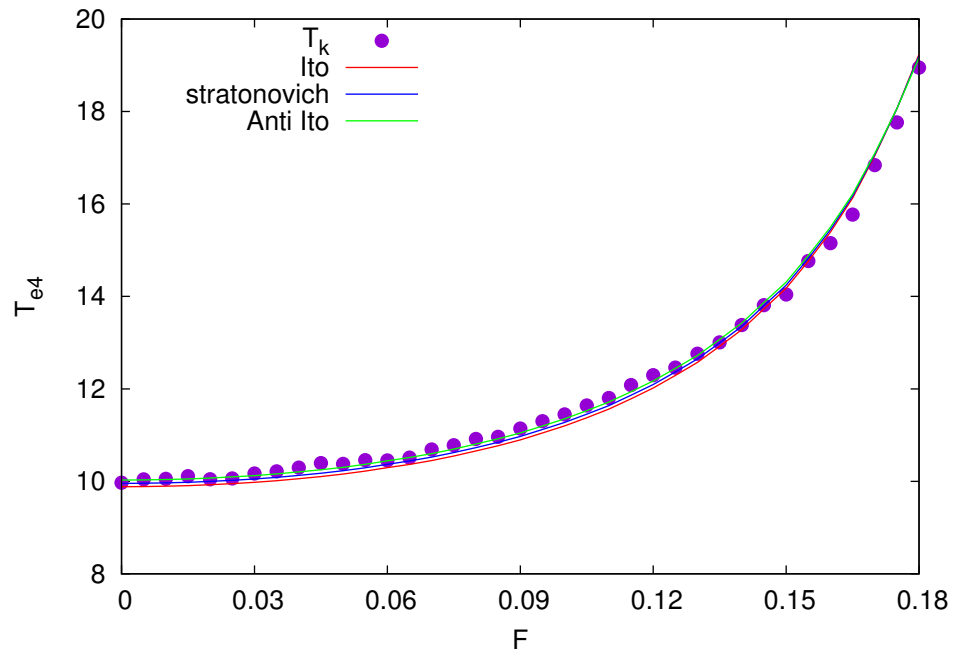


図 67 T_{e4}

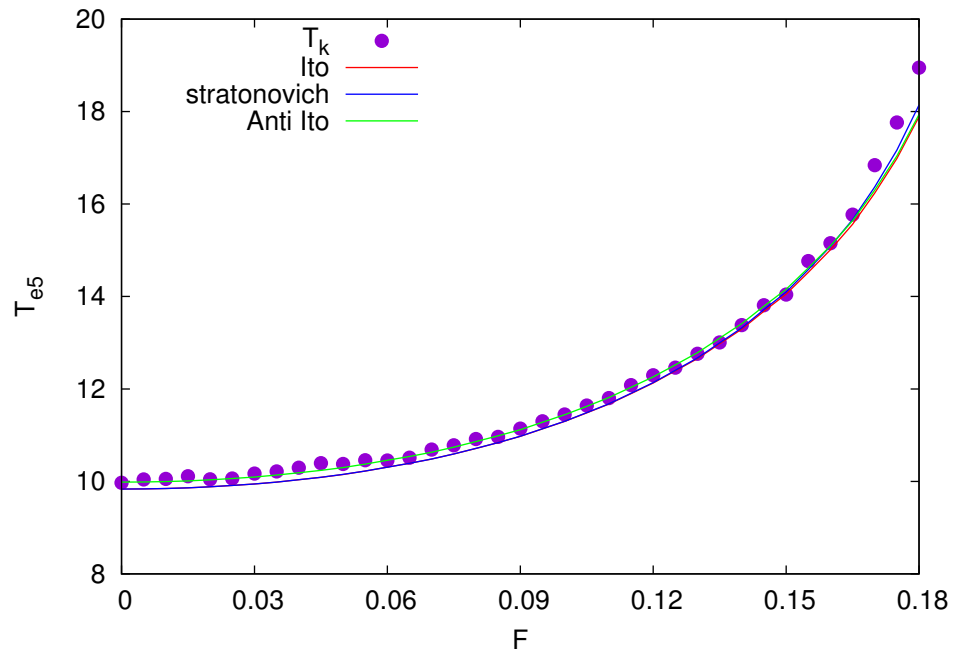


図 68 T_{e5}

有効温度からも、積分定義による違いはほとんどみられないことがわかる。

8.6 非対称ポテンシャル

今までの議論で用いていた、微粒子と環境粒子との力学的相互作用の項 H_{int} は

$$H_{int} = \cos\left(\frac{2\pi}{L}(X - x)\right) \quad (8.126)$$

となっていた。これは、対称ポテンシャルである。

ここで、力学的相互作用の項 H_{int} を、

$$H_{int} = -\cos\frac{2\pi}{L}x - \frac{\cos\left(\frac{4\pi}{L}\left(x - \frac{1}{6}\right)\right)}{4} \quad (8.127)$$

という非対称ポテンシャルを用いて、非線形ランジュバン方程式を決定し、運動論的温度や有効温度について調べる。非対称ポテンシャルは、図 69 のような形をしている。

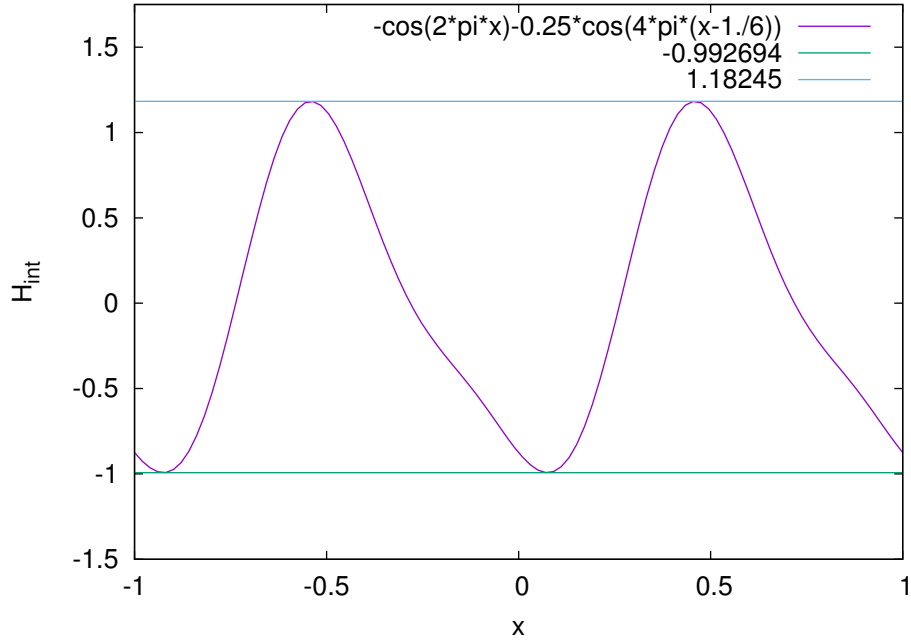


図 69 非対称ポテンシャル H_{int} 。 x の正の方向に急な勾配、負の方向に緩やかな勾配がある。最大値 1.18245 と最小値 -0.992694 なので、対称ポテンシャルの時のポテンシャルの深さ 2 と統一するために、実際の数値計算では H_{int} に $\frac{2}{1.18245+0.992694}$ をかけて深さを 2 にしたものを使った。

微粒子 M が非対称ポテンシャルの底にあるとき、 x の正の方向に急な勾配、負の方向に緩やかな勾配がある。ポテンシャルの最大値は 1.18245 で最小値 -0.992694 なので、対称ポテンシャルの時のポテンシャルの深さ 2 と統一するために、実際の数値計算では H_{int} に $\frac{2}{1.18245+0.992694}$ をかけたものを用いる。

このような非対称ポテンシャルを用いて、本章と同様の方法で非線形ランジュバン方程式を決定する。図 70 は、外場 F と平均速度 $\langle \tilde{V} \rangle$ の関係である。

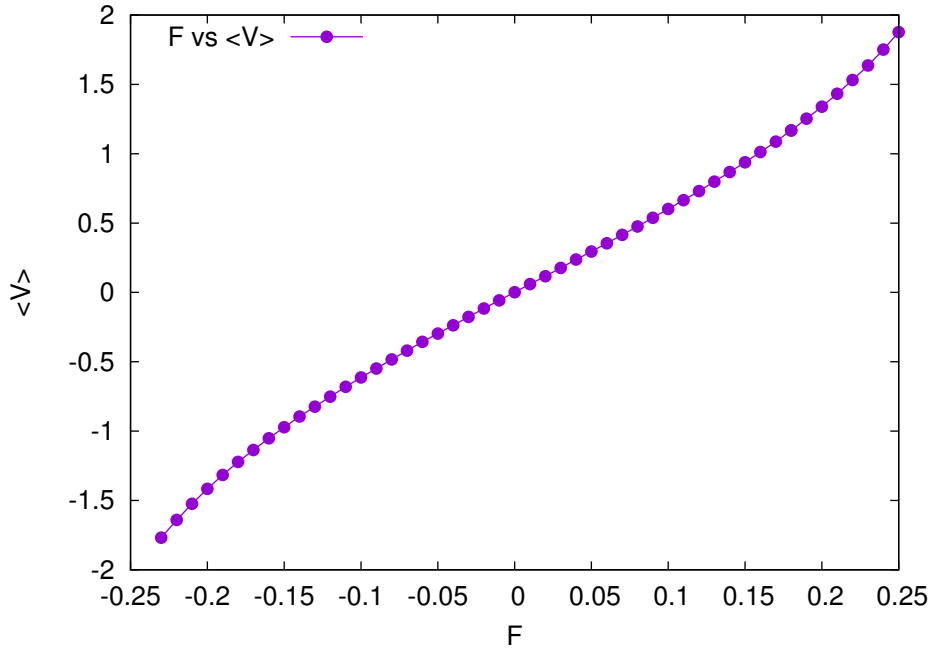


図 70

対称ポテンシャルの時と違い、非対称ポテンシャルでは、外場をかける方向によって、平均速度 $\langle \tilde{V} \rangle$ の絶対値に偏りが生じる。したがって、対称ポテンシャルで用いた式 (??) から式 (5.15) までの奇数次の係数 $\gamma_1, \gamma_3, \gamma_5 \dots$ を 0 とする仮定が使えなくなる。非対称ポテンシャルの場合は、奇数次の項まで求める必要がある。定常状態における平均した力の釣り合いの式

$$F = \gamma_0 \langle \tilde{V} \rangle + \gamma_1 \langle \tilde{V}^2 \rangle + \gamma_2 \langle \tilde{V}^3 \rangle + \gamma_3 \langle \tilde{V}^4 \rangle + \dots \quad (8.128)$$

から、対称ポテンシャルの場合と同様、 F を変化させて得られた $\langle \tilde{V} \rangle, \langle \tilde{V}^2 \rangle, \langle \tilde{V}^3 \rangle, \langle \tilde{V}^4 \rangle, \dots$ の数値から、線形最小自乗法を用いて、非線形項の係数を決定することができる。

γ が決定できていれば、対称ポテンシャルの場合と同様、伊藤のランジュバン方程式の式変形から、 $\langle D(\tilde{V}) \rangle$ を求めることができる。しかし、ここでも平均速度が外場の方向によって偏りをもつことから、 $D_1, D_3, D_5, \dots$ の奇数次の項は 0 と仮定することはできないことに注意する。

具体的に、5 次以降の係数は無視し、4 次の係数まで求めた非線形ランジュバン方程式の各係数は、表 13 のようになった。

γ_0	γ_1	γ_2	γ_3	γ_4
0.17435	0.00237349	-0.0149076	-0.000158146	0.000842496
D_0	D_1	D_2	D_3	D_4
3.42773	0.164792	-0.274563	-0.014657	-0.014657

表 13 4 次の項まで考慮した $\gamma(V), D(V)$ の係数。 $M = 100, m = 1, dt = 0.01, k = 5, L = 1, \gamma' = 1, T = 10, k_B = 1, \tau = 1000, sample$ 数 10000000, $F = 0.0 \sim 0.18$ 測定された $\langle V \rangle, \langle V^2 \rangle, \langle V^3 \rangle, \langle V^4 \rangle, \langle V^5 \rangle$ の値と、 $F, \langle D(V) \rangle$ の値から、線形最小自乗法を用いて決定した。

これらの係数を用いて
揺動散逸温度

$$\begin{aligned} T_{FDT}(V) &\equiv \frac{1}{2} \frac{D(\tilde{V})}{\gamma(\tilde{V})} \\ &= \frac{1}{2} \frac{D_0 + D_1 \tilde{V} + D_2 \tilde{V}^2 + D_3 \tilde{V}^3 + D_4 \tilde{V}^4 + \dots}{\gamma_0 + \gamma_1 \tilde{V} + \gamma_2 \tilde{V}^2 + \gamma_3 \tilde{V}^3 + \gamma_4 \tilde{V}^4 + \dots} \end{aligned} \quad (8.129)$$

運動論的温度

$$T_k \equiv M \langle (\tilde{V} - \langle \tilde{V} \rangle)^2 \rangle \quad (8.130)$$

有効温度

$$\begin{aligned} T_{eff} &:= \frac{1}{2} \frac{d_0}{\Gamma_0} \\ &= \frac{1}{2} \frac{D_0 + D_1 \langle \tilde{V} \rangle + D_2 \langle \tilde{V} \rangle^2 + D_3 \langle \tilde{V} \rangle^3 + D_4 \langle \tilde{V} \rangle^4 + \dots}{\gamma_0 + 2\gamma_1 \langle \tilde{V} \rangle + 3\gamma_2 \langle \tilde{V} \rangle^2 + 4\gamma_3 \langle \tilde{V} \rangle^3 + 5\gamma_4 \langle \tilde{V} \rangle^4 + \dots} \end{aligned} \quad (8.131)$$

をそれぞれ plot すると、図 71 が得られる。

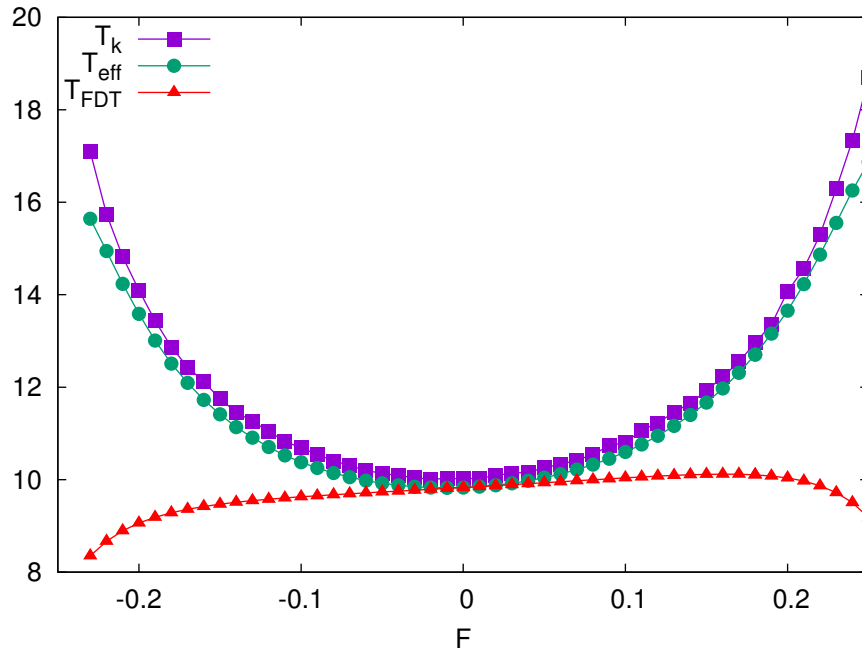


図 71

非対称ポテンシャルの場合でも、対称ポテンシャルと同じように、相対系での揺動 d_0 と散逸 Γ_0 の比から決めた有効温度 T_{eff} は運動論的温度 T_k と等しくなり、絶対系での揺動散逸温度 T_{FDT} と熱浴の温度 T は、外場 F の十分な範囲でほぼ等しくなった。

9 謝辞

本研究にあたって、担当教員である中川尚子准教授への感謝は、言葉で表現できるものではありません。研究でつまづいた時や理論がわからない時など、いつもの確にアドバイスを与えてくださいました。また、研究だけでなく社会へ出る準備として新規サーバーの購入の経験させて頂いたり、就職や進路の相談もさせて頂きました。中川先生の元で研究ができて、本当によかったと思います。ありがとうございました。

また、五十嵐潤一教授、福井隆裕教授には、学部生の時にゼミを担当して頂き、大変お世話になりました。不勉強な私の質問い丁寧に答えてくださっただけでなく、研究室のコンピューターの購入など、研究の環境大変良くして頂いたおかげで、この修士論文を書く事ができました。

モデルの提案や、問題提起など研究の基礎となる部分は、京都大学大学院の芳賀大樹さんの論文 [1] を参考にさせていただいています。また、芳賀さんからは、研究に関してのアドバイスも頂きました。

有効温度、非線形ランジュバン方程式に関しては、東京大学大学院の中山洋平さんから助言を頂きました。

サーバーの設定、管理に関しては、数学科の渡邊辰矢先生に大変お世話になりました。

普段の研究生活は、物性理論研究室の方々にとてもお世話になりました。同期の砂田優介君、関川雅大君、千葉義之君、M1 の城石俊朗君、学部生の竹井大樹君、島垣凱君、ブルガレビッチ・キリル君など、院生、学部生問わず、わからないことがあれば分野に関わらず議論を交わし、物理学について語り合った日々を一生忘れることはありません。

最後に、学部生、大学院生と、6 年間の大学生活を支えて下さった両親に感謝申し上げます。

参考文献

- [1] Taiki Haga Nonequilibrium Langevin equation and effective temperature for particle interacting with spatially extended environment arXiv:1311.7464
- [2] A. Einstein 『熱の分子論から要求される静止液体中の懸濁粒子の運動について』 Annalen der Physik (Germany)17, 549-560 (1905)
- [3] H. Nyquist, Thermal Agitation of Electric Charge in Conductors, Phys. Rev. 32, 110 (1928).
- [4] Lars Onsager, "Reciprocal Relations in Irreversible Processes.I.", Physical Review 37 (1931) pp. 405 - 426. Received December 8, 1930.
- [5] 吉森 明 2011 年度非平衡物理学 授業ノート
- [6] 田崎 晴明 ブラウン運動と非平衡統計力学
- [7] 中村 真 Ads/CFT 対応による非平衡定常系の有効温度の解析
- [8] 吉森 明、木村 明洋、鳥飼 正志、後藤 振一郎 液体のダイナミクスと非平衡物理学 (講義ノート) <http://hdl.handle.net/2433/97827>
- [9] 米沢進吾 ホームページ <http://www.ss.scphys.kyoto-u.ac.jp/person/yonezawa/index.html>
- [10] 独立行政法人製品評価技術基盤機構認定センター 不確かさの入門ガイド
- [11] gnuplot コマンド集 <http://www.gnuplot-cmd.com/axis/tics.html>
- [12] 園田 英徳 誤差論 (統計学ミニマム)
- [13] EMAN の物理学 <http://homepage2.nifty.com/eman/>
- [14] 水野伝一 自然科学入-新入教室員のために-
- [15] 大橋 健太 茨城大学大学院 タンパク質相互作用ネットワークの統計的性質を再現するモデルの研究 (2014)
- [16] 篠崎 貴史 茨城大学大学院 相反関係による流れとフィードバック制御による流れの比較 (2013)
- [17] Kim taeyeob 茨城大学 キュービットを利用した通信と計算 March 8th 2013
- [18] MAkasaka's HomePage <http://www.makasaka.net/physics/ohm/ohm.html>
- [19] 二宮正夫 並木雅俊 杉山忠男 物理のための数学入門 講談社
- [20] 杉山忠男 北原和男 統計力学 講談社
- [21] William H. press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery 著; 丹慶勝市 奥村晴彦 佐藤俊郎 小林誠 訳; Numerical Recipes in C 技術評論社
- [22] Alan Fersht 著; 桑島邦博 有坂文雄 熊谷泉 倉光成紀 訳; タンパク質の構造と機構 医学出版
- [23] ベアレント・エクセンドール 著 谷口説男 訳 確率微分方程式 シュプリンガー・フェアラーク東京株式会社
- [24] 今出 早海 茨城大学大学院 一般化された Langevin 方程式のエネルギー論的考察 2007.2.9
- [25] R. Zwanzig, Nonequilibrium Statistical Mechanics, Oxford University Press, New York, 2001.
- [26] Lisa Borland Microscopic dynamics of the nonlinear Fokker-Planck equation: A phenomenological model PHYSICAL REVIEW E VOLUME 57 NUMBER 6 JUNE 1998
- [27] Bouchaud, J.-P., Georges, A.: Anomalous diffusion in disordered media: Statistical mechanisms, models and physical applications, Phys. Rep. 195, 127 (1990)
- [28] Berthier, L., Barrat, J.-L., Kurchan, J.: A two-time-scale, two-temperature scenario for nonlinear

- rheology, Phys. Rev. E 61, 5464 (2000)
- [29] Joly, L., Merabia, S., Barrat, J.-L.: Effective temperatures of a heated Brownian particle, Europhys. Lett. 94, 50007 (2011)
 - [30] G. Falasco M. V. Gnann D. Rings and K. Kroy Effective temperatures of hot Brownian motion PHYSICAL REVIEW E 90, 032131 (2014)
 - [31] O. V. Yushchenko and A. Yu. Badalyan Statistical description of the collective motion of nanoparticles PHYSICAL REVIEW E 85, 051127 (2012)
 - [32] D. Chakraborty, M. V. Gnann, D. Rings, J. Glaser, F. Otto, F. Cichos and K. Kroy Generalised Einstein relation for hot Brownian motion EPL, 96 (2011) 60009
 - [33] A. Fulinski How to generate and measure anomalous weakly non-ergodic Brownian motion in simple systems arXiv:1206.4594