数理解析研究所講究録
第 405 巻 1980 年 52-57

非定常系におけるランジュバン方程式の一般化と揺動散逸定理

山口大 教育　古川 浩

揺動散逸定理[1)]は熱平衡状態の近傍における巨視的な系のふるまいと微視的な自由度のゆらぎとの関係を与える。このことが揺動散逸定理の統計力学における重要さになっている。揺動散逸定理は第1種・第2種と分類されるが、ここでは第2種、すなわちランジュバン方程式に関連した揺動散逸定理の拡張を述べてみたい。ランジュバン方程式は1908年ランジュバンによって導入されたものでブラウン粒子の速度 u の従う方程式を簡単化したものである。

$$\frac{d}{dt}u(t) = -\gamma u(t) + f(t) \tag{1}$$

ブラウン粒子の不規則な変化はランダム力あるいは揺動力、f, で表現されている。のちに γ と f との間に

$$\langle f(t) f(t') \rangle_c = -2\gamma \delta(t-t') \tag{2}$$

なる関係が存在することが明らかとなったが、これが第2種揺動散逸定理と呼ばれているものである。1950年代に我が国で線型不可逆過程の理論がいちじるしい発展をみた。第

2種摂動散逸定理も一つの完成を見た[2)]。非平衡状態での摂動散逸定理がどれだけ重要又は有用かは明らかではないが、何らかの利用方があることを期待して拡張を試みた。Mori 型すなわち convolution 型，あるいは convolutionless 型のランジュバン方程式あるいはその他の型が可能であるが簡単のため convolution 型のランジュバン方程式について述よう。非平衡状態では物理量のゆらぎ A_t に対して

$$\frac{d}{dt}A_t = K(t,t)A_t - \int_s^t \varphi(t,\tau)A_\tau d\tau + f(t,s)\ , \qquad (3)$$

と拡張出来る[3)]。ここで $K(t,t)$ は Mori 方程式の frequency マトリックス $i\omega$ に対応する。非定常系であるから摂動力 f は積分の下限 s に直接依存する。Mori に従って

$$\langle f(t,s) A_s^* \rangle_0 = 0 \qquad (4)$$

とおく。ここで $\langle\ \rangle_0$ はアンサンブル平均である（$\langle A \rangle_0 = 0$）が、分布は $t=0$ における初期分布である。積分の下限である時刻 s は $s \geq 0$。$t=s$ とおいて (3) と (4) より

$$K(t,t) = \left\langle \frac{dA_t}{dt} A_t^* \right\rangle_0 \langle A_t A_t^* \rangle_0^{-1} \qquad (5)$$

がただちにわかる。(3) を s で微分して

$$\frac{d}{ds} f(t,s) = -\varphi(t,s) A_s \tag{6}$$

(4)をsで微分して(6)を用いて

$$\left\langle f(t,s) \frac{dA_s^*}{ds} \right\rangle_0 - \varphi(t,s) \langle A_s A_s^* \rangle_0 = 0 \tag{7}$$

$dA_s^*/ds = A_s^* K^*(s,s) + f^*(s,s)$ であるから，(7)は

$$\varphi(t,s) = \langle f(t,s) f^*(s,s) \rangle_0 \langle A_s A_s^* \rangle_0^{-1} \tag{8}$$

すなわちこの関係はMori[2)] によって導びかれた関係（揺動散逸定理）の拡張となっている。上の議論はProjection operator を用いることによってもう少し見通しよくすることが可能である[4)]。

$$P_s(t) G \equiv \langle G A_s^* \rangle \langle A_t A_s^* \rangle^{-1} A_t \tag{9}$$

によって Projection operator $P_s(t)$ を導入しよう。すると(3)は次の2つの方程式に分解される

$$\frac{d}{ds} f(t,s) + P_s(t) \Lambda_s' f(t,s) = 0 \tag{10}$$

$$f(t,t) = (1 - P_t) \frac{d}{dt} A_t, \quad (P_t \equiv P_t(t)) \tag{11}$$

ただし

$$\Lambda_s' G \equiv \frac{d}{ds} P_s(t) G \Big|_{t=s}$$

（10）式を s で積分して（3）が得られる。このとき（8）式が満足される。又（10）は f に対する線型方程式であるから形式的に解くことが出来て f の $P_s(t)$ による表現を与える。
B_t を A_t の汎関数として

$$\tilde{P}_s(t)G \equiv \langle G B_s^* \rangle_0 \langle B_t B_s^* \rangle^{-1} B_t \qquad (9')$$

を導入する。（10）及び（11）で $P_s(t)$ のかわりに $\tilde{P}_s(t)$ を用い，f を $\tilde{f}$ とおき換えればそれによって得られるランジュバン方程式は非線型で

$$\frac{d}{dt}A_t = \tilde{P}_t \frac{d}{dt}A_t - \int_s^t \langle \tilde{f}(t,\tau) f^*(\tau,\tau) \rangle_0 \langle B_\tau B_\tau^* \rangle_0^{-1} B_\tau d\tau$$

$$+ \tilde{f}(t,\tau)。 \qquad (12)$$

これは Mori − Fujisaka[5] の導いた方程式の拡張となっている。（12）の f は（3）の f である。（8）が物理的にも揺動散逸定理と同じ意味をもつことは次のようにしてわかる。いま

$$\langle f(t,\tau) f^*(\tau,\tau) \rangle_0 = 2\mathcal{D}(t)\,\delta(t-\tau) \qquad (13)$$

とおいてみよう。そのとき

$$2D(t) \equiv \mathcal{D}(t) + \mathcal{D}^*(t) = \lim_{\tau\to t} \frac{1}{t-\tau} \int_\tau^t \int_\tau^t \left\langle \frac{dA_{t'}}{dt'} \frac{dA^*_{t''}}{dt''} \right\rangle_0 dt\, dt' \qquad (14)$$

となる。[6] (14)のような行列 D に対して，任意のベクトル ξ で作った2次形式 $\xi^* D \xi$ は非負である

$$\xi^* D \xi \geq 0 . \tag{15}$$

(13)を使えば(3)は

$$\frac{d}{dt}A_t = [K(t,t) - \mathcal{D}(t)\sigma(t)^{-1}]A_t + f(t) \tag{16}$$

と書き換えることが出来る。ここに $\sigma(t) \equiv \langle A_t A_t^* \rangle_0$ は Variance Matrix。さて Variance $\sigma(t)$ は系の性格を決める大切な量であるが、これは次の式に従うことがわかる。[6]

$$\frac{d}{dt}\sigma(t) = K(t)\sigma(t) + \sigma(t)K^*(t) + 2D(t) , \tag{17}$$

ここに

$$K(t) \equiv K(t,t) - \mathcal{D}(t)\sigma(t)^{-1} .$$

(16)及び(17)を用いることによって

$$\phi(t) \equiv \langle A_t^* \rangle \sigma(t)^{-1} \langle A_t \rangle \tag{18}$$

$$\langle A_t \rangle \equiv \langle A_t A_0^* \rangle_0 X , \tag{19}$$

ここに X は任意のベクトル，で定義された量 $\phi(t)$ は

$$\frac{d}{dt}\phi(t) = -2\langle A_t^* \rangle \sigma(t)^{-1} D(t)\, \sigma(t)^{-1} \langle A_t \rangle \leq 0, \quad (20)$$

となる。すなわち撹動力fが存在することによってある種の散逸が起っていることになる。

参考文献

1). R. Kubo, Reports on Prog. Phys. 29 (1966) Part I, 255.
2) H. Mori, Prog. Theor. Phys. 33 (1965), 423.
3) H. Furukawa, Prog. Theor. Phys. 58 (1977), 1127.
4) H. Furukawa, Prog. Theor. Phys. 62 (1979), 70
5) H. Mori and H. Fujisaka, Prog. Theor. Phys. 49 (1973), 764.
6) H. Furukawa, Prog. Theor. Phys. 56 (1976), 464