

Title	非線型ランジュバン方程式の方法によるONSAGER-MACHLUP理論の拡張(非線型・非平衡状態の統計力学,研究会報告)
Author(s)	植山, 宏
Citation	物性研究 (1976), 26(1): A21-A25
Issue Date	1976-04-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/89136
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

の時間発展に関する後ろ向き運動方程式を求めると、

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \xi = r(\xi) \xi - \int dx X \frac{P_S(x)}{P_S(\xi)} (x | W | \xi) \quad (3-5)$$

となり、前向き運動方程式は遷移確率 $P(\xi, \tau | x, t)$ により決定され、

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \zeta = -r(\xi) \zeta + \int dx X (\xi | W | x) \quad (3-6)$$

となるのがわかる。(3-5), (3-6) の右辺第 2 項は時間反転について非対称になっているが、これは推古する場合には初期状態に関する確率分布 $P_S(\xi)$ の知識がどうしても必要になることに由来する。²⁾ 実際簡単な拡散過程の場合、この非対称性はドリフト速度の差 $-D \partial \ln P_S(\xi) / \partial \xi$ (D は拡散定数) となってあらわれる。

参 考 文 献

- 1) 大塚益比古 原子炉物理 共立
- 2) S. Watanabe, Knowing and Guessing (John Wiley & Sons)

「非線型ランジュバン方程式の方法による ONSAGER-MACHLUP 理論の拡張」

阪大・教養 植 山 宏

§ 1. 非線型ランジュバン方程式¹⁾

$$\frac{d}{dt} a_j = \alpha_j(a) + R_j(t) \quad (1)$$

を拡散近似

$$\frac{d}{dt} a_j = \alpha_j(a) + \sum_{j, \ell} g_{j, \ell}(a) \eta_{\ell}(t) \quad (2)$$

で考察する。但し、 $\eta_{\ell}(t)$ はホワイト・ノイズを表す。この方程式を $\hat{I}t\hat{o}$ 型確率微分

植山 宏

方程式とすれば, この確率過程は又, 拡散方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} f = - \sum_i \frac{\partial}{\partial a_i} \alpha_i(a) f + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2}{\partial a_i \partial a_j} D_{ij}(a) f \quad (3)$$

で記述される。(3) はマスター方程式の良い近似になっている。但し, $P_{ij}(a) = \sum_{\ell} g_{i\ell}(a) g_{j\ell}(a)$ 。

§ 2. 確率微分方程式 (2) は, 変数 $\eta_{\ell}(t)$ より, 変数 $a_j(t)$ への函数空間での変数変換を与えるので, ホワイト・ノイズの分布函数積分表示

$$f \propto \exp \left\{ - \int \sum_{\ell} \eta_{\ell}(t)^2 dt \right\} \prod_{\tau, \ell} d\eta_{\ell}(\tau) \quad (4)$$

にこの変数変換を実行すれば, 変数 $a_j(t)$ に対する分布函数が求まる。

このプログラムは, GRAHAM²⁾ が実行したが, 正しい結果が得られていない。

Itô 型確率微分は奇妙な構造を持って居り, 汎函数積分での変数変換といったものには適当でない。WONG と ZAKAI は通常の微分方程式を用いて (2) 式を

$$\frac{d}{dt} a_j = \tilde{\alpha}_j(a) + \sum_{j\ell} g_{j\ell}(a) \eta_{\ell}(t) \quad (4)$$

但し,

$$\tilde{\alpha}_j(a) = \alpha_j(a) - \frac{1}{2} \sum_{k\ell} (\partial g_{j\ell}(a) / \partial a_k) g_{k\ell}(a) \quad (5)$$

近似できる事を示した。(5) 式の右辺第二項が dynamical friction と呼ばれるが, 一次元の時は厳密だが, 多次元では一つの conjecture である。

汎函数積分の変数変換を (4) 式を用いて実行すれば, two gate 分布函数が

$$f \left(\begin{matrix} a^{(2)} \\ t_2 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} a^{(1)} \\ t_1 \end{matrix} \right) = \frac{1}{N} \cdot f \cdots f \exp \left[- \int_{t_1}^{t_2} L(\tau) \alpha \tau \right] \prod_{\tau=t_1}^{t_2} \left\{ \frac{\prod \alpha a_j(\tau)}{\sqrt{\det D_{ij}}} \right\} \quad (6)$$

を求まる。ここに, \mathcal{L} は

$$\mathcal{L}(\tau) \equiv \frac{1}{2} \sum_{ij} D_{ij}^{-1}(a) (\dot{a}_i - \tilde{\alpha}_i(a)) (\dot{a}_j - \tilde{\alpha}_j(a)) \quad (7)$$

で与えられる Lagrangian である。

汎関数積分 (6) は Feynman 積分を想起させる。この事より、半古典近似

$$f \left(\begin{matrix} a^{(2)} \\ t_2 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} a^{(1)} \\ t_1 \end{matrix} \right) \propto \exp \left[- \int_{t_1}^{t_2} L(\tau) d\tau_{\min} \right] \quad (8)$$

が良い近似となり、この近似でのみ系の決定論的記述、即ち現象論的方程式が意味を持ち得る。事実、Euler-Lagrange 方程式はいつも、

$$\dot{a}_j = \tilde{\alpha}_j(a) \quad (9)$$

を解として持ち、(9) 式が現象論的方程式を与える。

§ 3. ONSAGER-MACHLUP 理論では、Euler-Lagrange の式は現象論 $\dot{a}_j = -r_{jk} a_k$ のみならず、鏡像解

$\dot{a}_j = +r_{jk} a_k$ も又解である。この事が、系の微視的可逆性の反映であり、同時に Entropy の存在とか Boltzmann 原理とかを保証している。

非線型の場合も事情は同じなので鏡像解を導入せねばならないが、ここでは簡単に

$$\dot{a}_j = -\tilde{\alpha}_j(a) \quad (10)$$

を採用する。(10) が (7) の解である条件は、

$$\sum \tilde{\alpha}_k \left(\frac{\partial}{\partial a_k} \sum D_{ij}^{-1} \tilde{\alpha}_j - \frac{\partial}{\partial a_i} \sum D_{kj}^{-1} \tilde{\alpha}_j \right) = 0 \quad (11)$$

である。

さて、平衡分布 $f_{\text{eq}}(a)$ を用いれば、

$$\tilde{\alpha}_i(a) = \xi_i(a) + \frac{1}{2} \sum D_{ij} \frac{\partial}{\partial a_j} \log f_{\text{eq}}(a) \quad (12)$$

但し、

$$\xi_i(a) = \frac{1}{2} \sum g_{i\ell}(a) (\partial g_{j\ell}(a) / \partial a_i) \quad (13)$$

植山 宏

と表されるので、(11)式は、 $\xi_i(a)$ と $D_{ij}(a)$ の関係を与える。

§ 4. さて、(7)式を展開して、 $S = k_B \log f_{eq}$ の全微分になる項を取り出し、残りの項を散逸函数³⁾

$$\Phi = \sum L_{ij}^{-1}(a) \dot{a}_i \dot{a}_j \quad (14)$$

$$\Psi = \sum L_{ij}(a) X_i(a) X_j(a) \quad (15)$$

但し、

$$L_{ij}(a) = D_{ij}(a)/2k_B, \quad X_i(a) = \partial S / \partial a_i \quad \text{とする,}$$

にまとめれば、

$$f_{pn} \left(\begin{matrix} a^{(1)} & \dots & a^{(p)} \\ t_1 & & t_p \end{matrix} \right) \propto \exp \left[\frac{1}{k_B} \left\{ \frac{1}{2} S(a^{(1)}) + \frac{1}{2} S(a^{(p)}) \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{4} \left(\int_{t_1}^{t_p} [2\Phi + 2\Psi] dt_{\min} \right) \right\} \right] \quad (16)$$

等、ONSAGER-MACHLUP の結果を再現できる。この結果は、Glansdorff-Prigogine の原理等と密接な関係がある。

鏡像解に関する仮定(10)を取除く事は容易である。

参 考 文 献

- 1) H. Ueyama, Prog. Theor. Phys. **48** (1972) 1090.
- 2) R. Graham, in "Springer Tracts in Modern Physics" vol. **66**, springer, 1973.
- 3) この形は、 $P_{ij}(a)$ が常数の場合である。

別記) 本論文 (Nonlinear Fluctuations and Nonlinear Irreversible Processes I &

II, (to appear in PHYSICA)) 完成後、Graham は理論を一部手直ししているのが分った。 See, R. Graham, "Fluctuations, Instabilities and Phase Transitions," ed. T. Riste, Plenum Press. 1975).

別記 2) $D_{ij}(a)$ が常数でない場合には, Wong-Zakai の conjecture (5) 又は同様な式 (13) の制約を受けて不十分である。(13) 式は多次元の場合には

$$\xi_i(a) = \frac{1}{2} \sum D_{ij}(a) \frac{\partial}{\partial a_j} \log \sqrt{\det D_{ij}(a)}$$

と変更しなければいけない様である。

非平衡統計力学における変分原理

— 中野氏の提案を具体化する方法について —

京大・理 長谷川 洋

§ 序 中野氏の提案というのは, 2年ほど前に Progress letter に発展された
Generalization of Onsagers Thermostatical Theory of
Irreversible Processes and the Transition between
Dissipative Structures

という小論文¹⁾で述べておられることで, Onsager の 1931年の論文に示唆されている変分原理を非線型非可逆過程に拡張しようというものである。これは容易なことであるが, 筆者も, この問題には永い間興味があったので, その後この2年間力を注ぐこととなった。近頃ようやく一つの案が出来たので, この機会に発表させていただく。(ここでは概略にとどめ, より詳しいことをなるべく早い機会に本誌に投稿する積りである。)

§ 1. Onsager-Machlup 公式

Chapman-Kolmogoroff 関係式

$$\int P(x^{(2)}t_2 | xt) P(xt | x^{(1)}t_1) dx = P(x^{(2)}t_2 | x^{(1)}t_1)$$