

ブラウン運動 (Brownian motion)

1 微分方程式

ランダム・ウォークにおける一回の変化の幅を Δx 、それに要する時間を Δt とする。1 回の歩みで、正の方向に進む確率を p 、負の方向に進む確率を q とする。時刻 t に位置 x にいる確率を、 $P(x, t)$ と書くと、漸化式は、

$$P(x, t + \Delta t) = qP(x + \Delta x, t) + pP(x - \Delta x, t) \quad (1)$$

ここで、

$$\begin{aligned} P(x, t + \Delta t) &\approx P(x, t) + \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} \Delta t \\ P(x + \Delta x, t) &\approx P(x, t) + \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \Delta x^2 \\ P(x - \Delta x, t) &\approx P(x, t) - \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \Delta x^2 \end{aligned}$$

を代入すると、

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{(p - q)\Delta x}{\Delta t} \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2\Delta t} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \quad (2)$$

ここで、

$$2C = \frac{(p - q)\Delta x}{\Delta t}, \quad D = \frac{\Delta x^2}{2\Delta t} \quad (3)$$

とおくと、

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -2C \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \quad (4)$$

ここで、 $X = x - 2Ct$ とおき、

$$B(X, t) = P(x, t)$$

とおくと、

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} &= \frac{\partial B(X, t)}{\partial t} - 2C \frac{\partial B(X, t)}{\partial X} \\ \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} &= \frac{\partial B(X, t)}{\partial X} \end{aligned}$$

ゆえに、

$$\frac{\partial B(X, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 B(X, t)}{\partial X^2} \quad (5)$$

を得る。

拡散方程式の解法

(17) 式を解こう。

$$P(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(k, t) e^{ikx} dk$$
$$F(k, t) = \int_{-\infty}^{\infty} P(x, t) e^{-ikt} dx$$

とにおいて、(17) 式に代入すると、

$$\frac{\partial F(k, t)}{\partial t} = -2iCk F(k, t) - Dk^2 F(k, t)$$

ゆえに、

$$F(k, t) = \phi(k) e^{-(2iCk + Dk^2)t}$$

初期条件を

$$P(x, 0) = \delta(x)$$

とおくと、

$$F(k, 0) = \phi(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) e^{-ikx} dx = 1$$

だから、

$$F(k, t) = e^{-(2iCk + Dk^2)t}$$

ゆえに、

$$P(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(2iCk + Dk^2)t} e^{ikx} dk$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-Dtk^2 + i(x - 2Ct)k \right] dk$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-Dt \left(k^2 - i \frac{(x - 2Ct)k}{Dt} \right) \right] dk$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-Dt \left(k - i \frac{(x - 2Ct)}{2Dt} \right)^2 - \frac{(x - 2Ct)^2}{4Dt} \right] dk$$

ここで、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-Dt \left(k - i \frac{(x - 2Ct)}{2Dt} \right)^2 \right] dk = \sqrt{\frac{\pi}{Dt}}$$

なので、結局、

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp \left[-\frac{(x - 2Ct)^2}{4Dt} \right] \tag{6}$$

を得る。

2 漸化式再び

最初、粒子は原点にいたとしよう。 n ステップ後に $+$ の方向に x 回、 $-$ 方向に $n - x$ 回進む確率は、

$$P_n(x) = {}_n C_x p^x q^{n-x}$$

で与えられ、その位置は、 $X = (x - (n - x)) \Delta x = (2x - n) \Delta x$ である。これを、二項係数の関係式を用いて書き直すと、

$$\begin{aligned} P_n(x) &= \{ {}_{n-1} C_{x-1} + {}_{n-1} C_x \} p^x q^{n-x} \\ &= p \cdot {}_{n-1} C_{x-1} p^{x-1} q^{(n-1)-(x-1)} + q \cdot {}_{n-1} C_x p^x q^{(n-1)-x} \\ &= p P_{n-1}(x-1) + q P_{n-1}(x) \end{aligned}$$

となる。これを、 $n - 1$ ステップ後の時刻を t 、 n ステップ後の時刻を $t + \Delta t$ 、とし、 n の代わりに位置 $X = (2x - n) \Delta x$ にいる確率 $P(X, t)$ を用いて書き改めると、時刻 $t + \Delta t$ に X にいる確率は、

$$P_X(X, t + \Delta t) = q P_X(X + \Delta x, t) + p P_X(X - \Delta x, t) \quad (7)$$

を得る。したがって、 n ステップ後の位置の期待値は、

$$\begin{aligned} E(X) &= \Delta x \sum_{x=0}^n (2x - n) {}_n C_x p^x q^{n-x} \\ &= \Delta x (2np - n) \end{aligned}$$

ゆえに、

$$E(X) = n \Delta x (p - q)$$

分散は、

$$\begin{aligned} V(X) &= \Delta x^2 \sum_{x=0}^n (2x - n)^2 {}_n C_x p^x q^{n-x} - n^2 \Delta x^2 (p - q)^2 \\ &= \Delta x^2 \left(\sum_{x=0}^n (4x^2 - 4nx + n^2) {}_n C_x p^x q^{n-x} - n^2 (p - q)^2 \right) \\ &= \Delta x^2 (4n^2 p^2 + 4npq - 4n^2 p + n^2 - n^2 (p - q)^2) \\ &= \Delta x^2 (n^2 (4p^2 - 4p + 1 - (p - q)^2) + 4npq) \\ &= \Delta x^2 (n^2 (-4pq + (p + q)^2 - (p - q)^2) + 4npq) \end{aligned}$$

ここで、

$$\sum_{x=0}^n x^2 {}_n C_x p^x q^{n-x} = n^2 p^2 + npq$$

を用いた。ゆえに、

$$V(X) = 4n \Delta x^2 pq$$

ここで、 n ステップまでの時間経過を t と置くと、あるステップでの変化の幅が Δx で、それから次のステップまでに要する時間は Δt だから、

$$n = \frac{t}{\Delta t}$$

すると、

$$E(X) = (p - q)t \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (8)$$

$$V(X) = 4pqt \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} \quad (9)$$

ここで、 $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$ の極限で $E(X), V(X)$ が一定値に収束するためには、 $\lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}$ が一定値に収束する必要がある。この値を、(3) 式のようにおく。すなわち、

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \frac{(p - q)\Delta x}{\Delta t} = 2C, \quad (10)$$

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} = 2D \quad (11)$$

すると、

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{(p - q)}{\Delta x} = \frac{C}{D}$$

だから、

$$p - q = \frac{C}{D} \Delta x$$

すると、

$$\begin{aligned} 4pq &= (p + q)^2 - (p - q)^2 \\ &= 1 - \frac{C^2}{D^2} (\Delta x)^2 \\ &= \left(1 + \frac{C}{D} \Delta x\right) \left(1 - \frac{C}{D} \Delta x\right) \end{aligned}$$

より、

$$p = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{C}{D} \Delta x\right)$$

$$q = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{C}{D} \Delta x\right)$$

を得る。そして、

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} E(X) = 2Ct \quad (12)$$

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} V(X) = 2Dt \quad (13)$$

となる。

確率変数

$$X = \lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} (2x - n)\Delta x$$

は、平均 $2Ct$ 、分散 $2Dt$ の正規分布に従うことは、次のようにして分かる。

n が十分大きいとき、二項分布は正規分布で近似できるので、

$$P(x) = {}_n C_x p^x q^{n-x} \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi npq}} \exp\left(-\frac{(x - np)^2}{2npq}\right)$$

ゆえに、確率変数 $X = (2x - n)\Delta x$ の分布は、 $n = t/\Delta t$ とおくと、

$$\begin{aligned} P_X(X) &= \int \delta(X - (2x - n)\Delta x) P(x) dx \\ &= \frac{1}{2\Delta x} P\left(\frac{X + n\Delta x}{2\Delta x}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi \cdot 4pqt \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}}} \exp\left(-\frac{(X + (1 - 2p)t \frac{\Delta x}{\Delta t})^2}{2 \cdot 4pqt \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}}\right) \end{aligned}$$

となるので、

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} P_X(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \cdot 2Dt}} \exp\left(-\frac{(X - 2Ct)^2}{2 \cdot 2Dt}\right)$$

を得る。これは、以前に得られた (6) 式である。

3 ブラウン運動再び

3.1 master 方程式

$$\rho(x, t_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(x - x_0, t_1 - t) \rho(x_0, t) dx_0$$

変数変換

$$\Delta x = x - x_0$$

$$\Delta t = t_1 - t$$

を行うと、

$$\rho(x, t + \Delta t) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(\Delta x, \Delta t) \rho(x - \Delta x, t) d(\Delta x)$$

ところが、

$$\rho(x, t + \Delta t) = \rho(x, t) + \Delta t \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t}$$

$$\rho(x - \Delta x, t) = \rho(x, t) - \Delta x \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2}$$

だから、

$$\begin{aligned} &\rho(x, t) + \Delta t \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} \\ &= \rho(x, t) - \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \Delta x P(\Delta x, \Delta t) d(\Delta x) \right) \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} (\Delta x)^2 P(\Delta x, \Delta t) d(\Delta x) \right) \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} \end{aligned}$$

ゆえに、

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = - \left(\frac{1}{\Delta t} \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta x P(\Delta x, \Delta t) d(\Delta x) \right) \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\Delta t} \int_{-\infty}^{+\infty} (\Delta x)^2 P(\Delta x, \Delta t) d(\Delta x) \right) \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} \quad (14)$$

3.2 粒子の運動方程式 (Langevin 方程式)

$$m\ddot{x} = -\lambda\dot{x} + R(t)$$

ここで、 $R(t)$ は、揺動力 (random force) で、 $0 \leq t', t'' \leq \Delta t$ として、

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} R(t') P(\Delta x, \Delta t) d(\Delta x) &= 2C \\ \frac{1}{\lambda^2} \int_{-\infty}^{+\infty} R(t') R(t'') P(\Delta x, \Delta t) d(\Delta x) &= 2D\delta(t' - t'') \end{aligned}$$

とする。

もしも、

$$|m\ddot{x}| \ll |\lambda\dot{x}|$$

ならば、

$$\dot{x} = \frac{1}{\lambda} R(t)$$

これを積分して、

$$\Delta x = x(t + \Delta t) - x(t) = \frac{1}{\lambda} \int_t^{t+\Delta t} R(t') dt'$$

となるので、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta x P(\Delta x, \Delta t) d(\Delta x) &= \frac{1}{\lambda} \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_{-\infty}^{+\infty} R(t') P(\Delta x, \Delta t) d(\Delta x) \\ &= 2C \int_t^{t+\Delta t} dt' \\ &= 2C\Delta t \end{aligned} \tag{15}$$

また、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} (\Delta x)^2 P(\Delta x, \Delta t) d(\Delta x) &= \frac{1}{\lambda^2} \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t+\Delta t} dt'' \int_{-\infty}^{+\infty} R(t') R(t'') P(\Delta x, \Delta t) d(\Delta x) \\ &= 2D \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t+\Delta t} dt'' \delta(t' - t'') \\ &= 2D \int_t^{t+\Delta t} dt' \\ &= 2D\Delta t \end{aligned} \tag{16}$$

(14) 式に、(15) 式と (16) 式を代入すると、

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = -2C \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x} + D \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} \tag{17}$$

を得る。

4 フォッカー・プランク方程式 (Fokker-Planck equation)

プロパゲーター P が、時間経過や速度変化のみの関数ではなく、初期速度 v_0 にも依存する場合、すなわち、 $P(v_0, v - v_0, t_1 - t)$ の場合を考える。

$$f(v, t_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(v_0, v - v_0, t_1 - t) f(v_0, t) dv_0 \quad (18)$$

変数変換

$$\Delta v = v - v_0$$

$$\Delta t = t_1 - t$$

$$f(v, t + \Delta t) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(v - \Delta v, \Delta v, \Delta t) f(v - \Delta v, t) d(\Delta v)$$

Taylor 展開

$$f(v, t + \Delta t) = f(v, t) + \Delta t \frac{\partial f(v, t)}{\partial t} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} P(v - \Delta v, \Delta v, \Delta t) f(v - \Delta v, t) &= P(v, \Delta v, \Delta t) f(v, t) - \Delta v \frac{\partial}{\partial v} \{ P(v, \Delta v, \Delta t) f(v, t) \} \\ &\quad + \frac{1}{2!} (\Delta v)^2 \frac{\partial^2}{\partial v^2} \{ P(v, \Delta v, \Delta t) f(v, t) \} + \dots \end{aligned} \quad (20)$$

(19) 式と (20) 式を (18) 式の右辺に代入して、微分と積分の順序を入れ替える。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} P(v, \Delta v, \Delta t) f(v, t) d(\Delta v) &= \left(\int_{-\infty}^{+\infty} P(v, \Delta v, \Delta t) d(\Delta v) \right) f(v, t) = f(v, t) \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta v \frac{\partial}{\partial v} \{ P(v, \Delta v, \Delta t) f(v, t) \} d(\Delta v) &= \frac{\partial}{\partial v} \left\{ \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \Delta v P(v, \Delta v, \Delta t) d(\Delta v) \right) f(v, t) \right\} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} (\Delta v)^2 \frac{\partial^2}{\partial v^2} \{ P(v, \Delta v, \Delta t) f(v, t) \} d(\Delta v) &= \frac{\partial^2}{\partial v^2} \left\{ \left(\int_{-\infty}^{+\infty} (\Delta v)^2 P(v, \Delta v, \Delta t) d(\Delta v) \right) f(v, t) \right\} \end{aligned}$$

となるので、

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(v, t)}{\partial t} &= -\frac{1}{\Delta t} \frac{\partial}{\partial v} \left\{ \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \Delta v P(v, \Delta v, \Delta t) d(\Delta v) \right) f(v, t) \right\} \\ &\quad + \frac{1}{2\Delta t} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \left\{ \left(\int_{-\infty}^{+\infty} (\Delta v)^2 P(v, \Delta v, \Delta t) d(\Delta v) \right) f(v, t) \right\} \end{aligned} \quad (21)$$

運動方程式

$$m\ddot{x} = -\lambda\dot{x} + R(t)$$

揺動力 $R(t)$ は、 $t \leq t_1, t_2 \leq t + \Delta t$ において、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} R(t_1) P(v, \Delta v, \Delta t) d(\Delta v) &= 0 \\ \int_{-\infty}^{+\infty} R(t_1) R(t_2) P(v, \Delta v, \Delta t) d(\Delta v) &= 2D\delta(t_1 - t_2) \end{aligned}$$

を満たすものとする。

運動方程式を、 $v = \dot{x}$ を用いて書き直すと、

$$m\dot{v} = -\lambda v + R(t)$$

となる。これを積分して、

$$\Delta v = -\frac{\lambda}{m} v \Delta t + \frac{1}{m} \int_t^{t+\Delta t} R(t') dt' \quad (22)$$

と書き直すと、

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Delta v P(v, \Delta v, \Delta t) d(\Delta v) = -\frac{\lambda}{m} v \Delta t \quad (23)$$

次に、

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (\Delta v)^2 P(v, \Delta v, \Delta t) d(\Delta v)$$

に (22) を代入して、 Δt について 2 次以上の項を省略すると、

$$\left(\frac{\lambda}{m} v \Delta t + \frac{1}{m} \int_t^{t+\Delta t} R(t') dt' \right)^2 = \frac{2\lambda}{m^2} v \Delta t \int_t^{t+\Delta t} R(t') dt' + \frac{1}{m^2} \int_t^{t+\Delta t} dt_1 \int_t^{t+\Delta t} dt_2 R(t_1) R(t_2)$$

となるので、

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (\Delta v)^2 P(v, \Delta v, \Delta t) d(\Delta v) = \frac{2D}{m^2} \int_t^{t+\Delta t} dt_1 \int_t^{t+\Delta t} dt_2 \delta(t_1 - t_2) = \frac{2D}{m^2} \Delta t \quad (24)$$

となる。

(23) 式と (24) 式を (21) 式に代入して、

$$\frac{\partial f(v, t)}{\partial t} = \frac{1}{m} \left\{ \lambda \frac{\partial}{\partial v} v + \frac{D}{m} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right\} f(v, t)$$

を得る。

5 連続の方程式からの導出

連続の方程式

$$\frac{\partial \rho(v, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial v} (\dot{v} \rho(v, t)) \quad (25)$$

Langevin 方程式

$$m \dot{v} = -\lambda v + R(t) \quad (26)$$

(26) 式を (25) 式に代入する。

$$\frac{\partial \rho(v, t)}{\partial t} = -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial v} \left\{ (-\lambda v + R(t)) \rho(v, t) \right\}$$

ゆえに、

$$\frac{\partial \rho(v, t)}{\partial t} = \frac{1}{m} \left(\lambda + v \lambda \frac{\partial}{\partial v} - R(t) \frac{\partial}{\partial v} \right) \rho(v, t) \quad (27)$$

これを積分すると、

$$\begin{aligned}\rho(v, t + \Delta t) &= e^{\frac{1}{m} \int_t^{t+\Delta t} dt' (\lambda + \lambda v \frac{\partial}{\partial v} - R(t') \frac{\partial}{\partial v})} \rho(v, t) \\ &= e^{\frac{1}{m} [\lambda(1+v \frac{\partial}{\partial v}) \Delta t - \int_t^{t+\Delta t} R(t') dt' \frac{\partial}{\partial v}]} \rho(v, t)\end{aligned}\quad (28)$$

ここで、

$$A = \frac{1}{m} \left[\lambda \left(1 + v \frac{\partial}{\partial v} \right) \Delta t - \int_t^{t+\Delta t} R(t') dt' \frac{\partial}{\partial v} \right]$$

とおくと、(28) 式は、

$$\rho(v, t + \Delta t) = e^A \rho(v, t) \quad (29)$$

$$= \left[1 + A + \frac{1}{2!} A^2 + \dots \right] \rho(v, t) \quad (30)$$

となるので、

$$\rho(v, t + \Delta t) - \rho(v, t) = \frac{\partial \rho(v, t)}{\partial t} \Delta t = A \rho(v, t) + \frac{1}{2} A^2 \rho(v, t) + \dots \quad (31)$$

ここで、ランダム力について平均 $\langle \cdot \rangle$ をとると、

$$\frac{\partial \rho(v, t)}{\partial t} \Delta t = \langle A \rangle \rho(v, t) + \frac{1}{2} \langle A^2 \rangle \rho(v, t) + \dots \quad (32)$$

$$\langle A \rangle = \frac{1}{m} \left[\lambda \left(1 + v \frac{\partial}{\partial v} \right) \Delta t - \int_t^{t+\Delta t} \langle R(t') \rangle dt' \frac{\partial}{\partial v} \right]$$

ここで、

$$\langle R(t') \rangle = 0$$

を用いると、

$$\langle A \rangle = \frac{\lambda}{m} \left(1 + v \frac{\partial}{\partial v} \right) \Delta t \quad (33)$$

を得る。

$\langle A^2 \rangle$ については、 Δt についての 1 次の項までを残すことにすると、

$$\begin{aligned}\langle A^2 \rangle &= \frac{1}{m^2} \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t+\Delta t} dt'' \langle R(t') R(t'') \rangle \frac{\partial^2}{\partial v^2} \\ &= \frac{1}{m^2} \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t+\Delta t} dt'' 2D \delta(t' - t'') \frac{\partial^2}{\partial v^2}\end{aligned}$$

となるので、

$$\langle A^2 \rangle = \frac{2D}{m^2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \Delta t \quad (34)$$

を得る。

(33), (34) 式を (32) 式に代入して、

$$\frac{\partial \rho(v, t)}{\partial t} = \left\{ \frac{\lambda}{m} \left(1 + v \frac{\partial}{\partial v} \right) + \frac{2D}{m^2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right\} \rho(v, t) \quad (35)$$

を得る。