# 一変数非平衡定常状態の揺動散逸定理

# Fluctuation-response relation in nonequilibrium Langevin one-variable system

吉田　清範

桐蔭横浜大学工学部

(2012年3月31日　受理)

## 1．序

非平衡定常状態の熱平衡分布はボルツマン分布からずれて揺動散逸定理が成り立たないが[1]，一変数の場合は分布関数が解析的に求まり，どの程度ずれるのかを評価できる（式の導出は容易なので省略）．

## 2．一変数非平衡定常状態の分布関数

位置 $q$, 速度 $v=dq/dt$，質量 $M=0$ の粒子が力 $F(q)$, エネルギー換算温度 $T$ の熱浴からの減衰力 $-\gamma v$, ランダム力 $dB/dt$ の下で運動する時，熱浴への散逸 $W$ は，Stratonovich 型確率微分 $X\cdot dY$, 伊藤型確率微分 $XdY$, 定常状態平均 $<\cdots>_0$ に対し，

$$\gamma\ dq=F(q)dt+dB(t),\ <\{dB(t)\}^2>=2\gamma Tdt.$$

$$dW=F\cdot dq=\gamma^{-1}[\{F(q)^2+TdF/dq\}dt+dB],$$

$$<dW/dt>_0=\gamma\ [v_0^2+<\{\gamma^{-1}F(q)-v_0\}^2>_0 + \gamma^{-2}T<dF/dq>_0],\ v_0\equiv\gamma^{-1}<F(q)>_0.$$

$F(q)=-dV/dq=f_0+F_0(q)$, $F_0(q)=-dV_0/dq$, $V_0(q)\geqq 0$ の時，$v_0\neq 0$ なら分解 $f_0+F_0(q)$ は一意で，

$$<dW/dt>_0=f_0v_0=\gamma\{v_0^2+(\gamma^{-1}f_0-v_0)v_0\}.$$

$f_0=0$ の時，ボルツマン分布 $p(q)\propto e^{-V(q)/T}$，

$$v_0=0,\ <dW>_0=0.$$

$f_0\neq 0$ の時，非平衡定常分布 $p(q)$ 等は

$$p(q)=\int_0^\infty e^{\{V(q\pm x)-V(q)\}/T}dx,$$ $\pm$は $f_0$ の符号，

$$<dW/dt>_0=f_0v_0>0.$$

$$\gamma v_0=<F(q)>_0=\pm T/[p]\neq 0,$$

$$<A(q)>_0\equiv\int A(q)p(q)dq/\int p(q)dq,$$

$$[A(q)]\equiv\int A(q)dq/\int dq.$$

周期 $L$ の力 $F(q+L)=F(q)$ の場合，長さ $L$ の円周上の定常分布が存在し，

$|f_0|L\ll T$ の時，

$$p(q)\fallingdotseq\{1+aLb_1(q)\}p_0(q),$$

$$p_0(q)\equiv e^{-V0(q)/T}/\int_0^L e^{-V0(q)/T}dq,\ a\equiv|f_0|/T,$$

$$b_1(q)\equiv\int_0^L(1/2-x/L)e^{V0(q\pm x)/T}dx/\int_0^L e^{V0(x)}dx,$$

$$c_1\equiv[Lp_0(q)b_1(q)],\quad c_0\equiv[p_0][1/p_0]-1\geqq 0,$$

$$v_0\fallingdotseq\gamma^{-1}f_0(1-aLc_1)/(1+c_0),$$

$$(\gamma^{-1}f_0-v_0)v_0\fallingdotseq c_0v_0^2\geqq 0,$$

$$<\{F(q)-\gamma v_0\}^2>_0\fallingdotseq\int_0^L F_0^2\{1+aL(b_1-c_1)\}p_0dq.$$

$|f_0|L\gg T$, $|f_0|\gg|F_0|$ の時，

$$p(q)\fallingdotseq 1-F_0(q)/f_0+(F_0^2-TdF_0/dq)/f_0^2,$$

$$v_0\fallingdotseq\gamma^{-1}f_0\{1-[F_0^2]/f_0^2\},$$

$$(\gamma^{-1}f_0-v_0)v_0\fallingdotseq\gamma^{-2}[F_0^2]\geqq 0,$$

$$<\{F(q)-\gamma v_0\}^2>_0 \fallingdotseq[F_0^2]+[(TdF_0/dq)^2-[F_0^2]^2]/f_0^2.$$

Kiyonori Yoshida：Department of Electronics and Information Engineering, Toin University of Yokohama, 1614 Kurogane-cho, Aoba-ku, Yokohama, Japan 225-8503

## 3．一変数非平衡定常状態の揺動散逸定理

文献[1]の手法から，微小外力 $f_1(t)$ に対する $\gamma^{-1}F(q(t))$ の応答関数 $R(t)$ と $\gamma^{-1}F(q(t))$ の相関関数 $C(t)$ の表式が導けて，

$$<\gamma^{-1}F(q(t))>_1 \doteqdot v_0+\int_0^t R(t-u)f_1(u)du,$$
$$R(t)=\gamma^{-2}<d\{e^{tL}F(q)\}/dq>_0,$$
$$C(t)\equiv<\{\gamma^{-1}F(q(t))-v_0\}\{\gamma^{-1}F(q(0))-v_0\}>_0$$
$$=<\{\gamma^{-1}F(q)-v_0\}e^{tL}\{\gamma^{-1}F(q)-v_0\}>_0,$$
$$C(t)+TR(t)=[e^{tL}\{\gamma^{-1}F(q)-v_0\}]v_0,$$
$$[A(q)]\equiv\int A(q)dq/\int dq,$$
$$L\equiv\gamma^{-1}\{F(q)\partial/\partial q+T\partial^2/\partial q^2\}.$$
$$<dW/dt>_0=f_0v_0=\gamma\{v_0^2+<\{\gamma^{-1}F(q)-v_0\}^2>_0$$
$$+\gamma^{-2}T<dF/dq>_0\}=\gamma\{v_0^2+C(0)+TR(0)\},$$
$$C(0)+TR(0)=(\gamma^{-1}f_0-v_0)v_0.$$

高温極限での揺動散逸定理は熱平衡状態での $C(t)+TR(t)=0$ に相当し，非平衡定常状態では零でなくなる[1]．本論文では，そのずれの表式 $[e^{tL}\{\gamma^{-1}F(q)-v_0\}]v_0$ と，$|f_0|\doteqdot 0$ or $\infty$ の時の $t=0$ でのずれの近似式を導出し，ずれ $C(0)+TR(0)\geqq 0$ を示した．なお，質量 $M\neq 0$ の時は速度 $v=dq/dt$ が定義出来て，文献[1]で，

$$<dW/dt>_0=\gamma\{v_0^2+C_v(0)-TR_v(0)\},$$
$$R_v(t)=M^{-1}<\partial(e^{tL}v)/\partial v>_0,$$
$$C_v(t)=<(v-v_0)e^{tL}(v-v_0)>_0,$$
$$C_v(0)-TR_v(0)=2M^{-1}\{<M(v-v_0)^2/2>_0-T/2\},$$
$$L\equiv v\partial/\partial q+M^{-1}\{F(q)-\gamma v\}\partial/\partial v$$
$$+M^{-2}\gamma T\partial^2/\partial v^2.$$

熱平衡状態では $v_0=0$, $C_v(t)-TR_v(t)=0$ で，非平衡定常状態でのずれ $C_v(0)-TR_v(0)$ は速度揺らぎと温度の関係のずれに対応している（非平衡定常分布の解析的な表式が得られず，ずれの程度は不明）．質量 $M=0$ の時は速度 $v$ が定義できないが，

$$v(t,\tau)\equiv\{q(t+\tau)-q(t)\}/\tau,$$
$\tau\doteqdot 0$ の時，$C_v(t)-TR_v(t)\doteqdot C(t)+TR(t)$.

## 4．時変なマルコフ過程に対する定式化

文献[1]では $d\theta/dt=1$ の確率過程 $\theta(t)$ を追加して時変な系を時不変系として扱っているが，素直に時変な系として定式化した方が見通しがよく簡単でもある．実際，拡散過程とポアッソン過程が混在するマルコフ過程 $\mathbf{x}(t)$，時刻 s の $\mathbf{y}$ から時刻 t の $\mathbf{x}$ への遷移確率密度 $p(\mathbf{x},t|\mathbf{y},s)$（離散 $\mathbf{x}$ なら $\int d\mathbf{x}\equiv\Sigma_{\mathbf{x}}$ と解釈），時刻 t の $\mathbf{x}$ の相対確率密度 $p(\mathbf{x},t)$，実関数空間の内積 $<f,g>\equiv\int f(\mathbf{x})g(\mathbf{x})d\mathbf{x}$, 演算子 K,L,G,B,N に対し，

$$d\mathbf{x}(t)=\mathbf{b}(\mathbf{x}(t),t)dt+A(\mathbf{x}(t),t)d\mathbf{B}(t),$$
$d\mathbf{B}d\mathbf{B}^T=dt$,　もしくは，
$$p(\mathbf{x},t+dt|\mathbf{y},t)\doteqdot p(\mathbf{x}|\mathbf{y},t)dt:\mathbf{x}\neq\mathbf{y},$$
$$1-\Sigma_{\mathbf{z}\neq\mathbf{y}}p(\mathbf{z}|\mathbf{y},t)dt:\mathbf{x}=\mathbf{y}.$$
$$\{L(t)dt+dN(t)\}f(\mathbf{x})$$
$$\equiv\{f(\mathbf{x}(t+dt))-f(\mathbf{x}(t))\}_{\mathbf{x}(t)=\mathbf{x}},$$
$$L(t)=\{\mathbf{b}(\mathbf{x},t)+2^{-1}A(\mathbf{x},t)A^T(\mathbf{x},t)\,\partial/\partial\mathbf{x}\}\partial/\partial\mathbf{x},$$
$dN(t)=\{A(\mathbf{x},t)d\mathbf{B}(t)\}\partial/\partial\mathbf{x}$, もしくは，
$$L(t)f(\mathbf{x})=\Sigma_{\mathbf{y}}\{f(\mathbf{y})-f(\mathbf{x})\}p(\mathbf{y}|\mathbf{x},t),$$
$$dN(t)f(\mathbf{x})=\Sigma_{\mathbf{y}}\{f(\mathbf{y})-f(\mathbf{x})\}$$
$$*\{\delta_{\mathbf{y},\mathbf{x}(t+dt)|\mathbf{x}(t)=\mathbf{x}}-p(\mathbf{y}|\mathbf{x},t)dt\}.$$
$$G(t,s)f(\mathbf{x})\equiv f(\mathbf{x}(t))_{\mathbf{x}(s)=\mathbf{x}},$$
$$G(t,s)=K(t,s)^++\int_s^t G(u,s)dN(u)K(t,u)^+.$$
$$K(t,s)f(\mathbf{x})\equiv\int p(\mathbf{x},t|\mathbf{y},s)f(\mathbf{y})d\mathbf{y},$$
$$K(t,s)^+f(\mathbf{y})=\int f(\mathbf{x})p(\mathbf{x},t|\mathbf{y},s)d\mathbf{x},$$
$\{\partial K(t,s)/\partial t\}_{s=t}=L^+(t)$, L の共役演算子 $L^+$,
$$\partial K(t,s)/\partial t=L^+(t)K(t,s),$$
$$\partial K(t,s)/\partial s=-K(t,s)L(s)^+.$$
$$p(\mathbf{x},t)=K(t,s)p(\mathbf{x},s),$$
$$\partial p(\mathbf{x},t)/\partial t=L^+(t)p(\mathbf{x},t),$$
$$<f(\mathbf{x}(t))>=\int f(\mathbf{x})p(\mathbf{x},t)d\mathbf{x}/\int p(\mathbf{x},t)d\mathbf{x},$$
$$<f(\mathbf{x}(t))g(\mathbf{x}(s))>=\{\int p(\mathbf{y},s)d\mathbf{y}\}^{-1}$$
$$*\int f(\mathbf{x})g(\mathbf{y})p(\mathbf{x},t|\mathbf{y},s)p(\mathbf{y},s)d\mathbf{x}d\mathbf{y}$$
$$=<\{K(t,s)^+f(\mathbf{x}(s))\}g(\mathbf{x}(s))>,\quad t\geqq s.$$

マルコフ過程 $\mathbf{x}(t)$ の中の拡散過程 $\mathbf{y}(t)$ に対してのみ線形応答用の微小外乱 $b_1(t)$ を加える時，その下での平均 $<\cdots>_1$，行列 A の転置行列 $A^T$, 任意の実関数 $f(\mathbf{x})$ に対し，

$$d\mathbf{y}(t)=\mathbf{b}(\mathbf{x}(t),t)dt$$
$$+A(\mathbf{x}(t),t)\{d\mathbf{B}(t)+\mathbf{b}_1(t)dt\},$$
$$<f(\mathbf{x}(t))>_1\doteqdot<f(\mathbf{x}(t))>$$
$$+\int_s^t\mathbf{R}(t,u)\mathbf{b}_1(u)du,$$
$$\mathbf{R}(t,s)\equiv$$
$$<A(\mathbf{x}(s),s)^T\{\partial/\partial\mathbf{y}(s)\}K(t,s)^+f(\mathbf{x}(s))>$$
$$=<f(\mathbf{x}(t))d\mathbf{B}/ds>,\quad t\geqq s.$$

$$C(t,s) \equiv \langle \Delta f(\mathbf{x}(t)) \Delta f(\mathbf{x}(s)) \rangle$$
$$= \langle \{K(t,s)^{+} \Delta f(\mathbf{x}(s))\} \Delta f(\mathbf{x}(s)) \rangle,$$
$$\Delta f \equiv f - \langle f \rangle.$$

証明は文献[1]と同様に行える．

参考文献

[1] T. Harada and S.-I. Sasa: "Energy dissipation and violation of the fluctuation-response relation in nonequilibrium Langevin systems", Phys. Rev. E 73, 026131 (2006).