統計数理

石川顕一

http://ishiken.free.fr/lecture.html

10/18　組み合わせと確率
10/25　確率変数と確率分布
11/1　代表的な確率分布
11/8（前半）　ランダムウォークと破産問題
11/8（後半）　ブラウン運動と拡散
11/22　ノイズの理論

確率過程
Stochastic process

11/15は演習のみ

参考書

[1] 理工系の数学入門コース7・薩摩順吉著
「確率・統計」岩波書店　2001年

[2] コルモゴロフ、ジュルベンコ、プロホロフ　共著
丸山　哲郎、馬場　良和　共訳
「コルモゴロフの確率論入門」森北出版 2003年

[3] 岩波基礎物理シリーズ8・北原和夫著
「非平衡系の統計力学」岩波書店　1997年

統計数理

石川顕一

11/8（後半）　　ブラウン運動と拡散

- 自己相関関数
- ランジュバン方程式

5−1　ブラウン運動

- イギリスの植物学者ブラウン（1827年）
  - 水中の花粉の中の微粒子の運動を顕微鏡で観察し、不規則な運動をしていることを発見。

ブラウン運動(Brownian motion)

周囲の環境の分子の熱運動の影響によって生じる不規則な運動

熱運動している溶媒分子からの衝突を受けて運動。

微粒子１個のレベルのブラウン運動の力学的記述 ⟺ マクロな熱力学的記述（拡散）

ランジュバン方程式

自己相関関数

- 確率変数$x(t)$は、一般に時刻tと$t+\tau$とでは一般に異なる値$x(t)$および$x(t+\tau)$を取る。
  - $\tau \to 0$: $x(t)$と$x(t+\tau)$は近い値
  - $\tau \to$ 無限大 : $x(t)$と$x(t+\tau)$は完全に独立
- 連続する事象間の相関　→　時間間隔 τ に依存

⇨ 自己相関関数 $G(\tau) = \langle x(t)x(t+\tau) \rangle = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_0^T x(t)x(t+\tau)dt$

時間平均

4−3 ランダムウォークと拡散

- ランダムウォークと拡散現象

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

揺動散逸定理

(平衡状態での)ゆらぎ　　散逸・輸送

$$D=\frac{l^2}{2\tau} \Rightarrow \langle x^2\rangle = 2Dt$$

位置の分散 σ_x^2

- 初期条件
  - $t=0$での濃度分布は?

$$\left.\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{\infty}P(t,x)dx=1\\&x\neq 0\Rightarrow P(t\to +0,x)=0\\&x=0\Rightarrow P(t\to +0,x=0)=\infty\end{aligned}\right\}$$

ディラック(Dirac)のデルタ関数

$$\delta(x)=\lim_{t\to +0}\sqrt{\frac{1}{4\pi Dt}}\exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right]$$

⇒ $x=0$に集中した分布

ランダムウォークは、1次元の拡散方程式

$$\frac{\partial P}{\partial t}=D\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \qquad P(t=0,x)=\delta(x)$$

のモデルの1つ

5−2 ランジュバン方程式

→ 参考書[3] p.90

- 溶媒中の微粒子の運動方程式
  - 確率的な力を導入 → ランジュバン方程式

$$m\frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} = \mathbf{F} \qquad \mathbf{F} = -m\gamma\frac{d\mathbf{x}}{dt} + \mathbf{R}(t)$$

粘性抵抗力

揺動力(random force)

$$\langle \mathbf{R}(t) \rangle = 0$$

$$\langle R_\alpha(t) R_\beta(t') \rangle \propto \delta_{\alpha\beta}\delta(t-t')$$

- 異なる方向成分は無相関
- 時間が異なれば無相関
- 微粒子によっても異なる

$$m\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{F} \qquad \mathbf{F} = -m\gamma\mathbf{u} + \mathbf{R}(t)$$

⇩ 微粒子について平均

$$m\frac{d}{dt}\langle \mathbf{u} \rangle = -m\gamma\langle \mathbf{u} \rangle$$

5−2 ランジュバン方程式

- 拡散係数との関係

$$m\frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} = -m\gamma\frac{d\mathbf{x}}{dt} + \mathbf{R}(t)$$

x 成分のみを考える。

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -m\gamma\frac{dx}{dt} + R(t)$$

両辺にxをかける。

$$mx\frac{d^2x}{dt^2} = -m\gamma x\frac{dx}{dt} + xR(t)$$

時間平均または微粒子について平均

$$m\left\langle x\frac{d^2x}{dt^2}\right\rangle = -m\gamma\left\langle x\frac{dx}{dt}\right\rangle$$

温度 T で、$\frac{1}{2}m\left\langle\left(\frac{dx}{dt}\right)^2\right\rangle = \frac{kT}{2}$

$$\frac{1}{2}m\frac{d^2\langle x^2\rangle}{dt^2} - kT = -\frac{1}{2}m\gamma\frac{d\langle x^2\rangle}{dt}$$

$$x\frac{dx}{dt} = \frac{1}{2}\frac{d\left(x^2\right)}{dt} \Rightarrow x\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{1}{2}\frac{d^2\left(x^2\right)}{dt^2} - \left(\frac{dx}{dt}\right)^2$$

5−2 ランジュバン方程式

- 拡散係数との関係

$$\frac{1}{2}m\frac{d^2\langle x^2\rangle}{dt^2}-kT=-\frac{1}{2}m\gamma\frac{d\langle x^2\rangle}{dt}$$

$$f=\frac{d\langle x^2\rangle}{dt}$$

$$\frac{1}{2}m\frac{df}{dt}-kT=-\frac{1}{2}m\gamma f \quad \Rightarrow \quad \frac{df}{dt}+\gamma f-\frac{2kT}{m}=0$$

$$\Rightarrow \quad f=\frac{2kT}{m\gamma}\left(1-e^{-\gamma t}\right) \quad \Rightarrow \quad \langle x^2\rangle=\frac{2kT}{m\gamma^2}\left(\gamma t+e^{-\gamma t}-1\right)$$

10^{-13}秒のオーダーで減衰

t が十分大きければ $\langle x^2\rangle=\dfrac{2kT}{m\gamma}t$

拡散方程式より $\langle x^2\rangle=2Dt$

アインシュタインの関係式
(Einstein’s relation, 1905年)

$$D=\frac{kT}{m\gamma}$$

マクロな量の測定からボルツマン定数kを決定できる。

東京大学工学部 システム創成学科 Cコース Program for Biological & Information Systems

5−2 ランジュバン方程式

- まとめ：溶媒中の微粒子の運動方程式
  - 確率的な力を導入 → ランジュバン方程式

$$m\frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2}=\mathbf{F} \qquad \mathbf{F}=-m\gamma\frac{d\mathbf{x}}{dt}+\mathbf{R}(t)$$

粘性抵抗力

揺動力(random force)

$$\langle \mathbf{R}(t)\rangle = 0$$

$$\langle R_\alpha(t)R_\beta(t')\rangle \propto \delta_{\alpha\beta}\delta(t-t')$$

- 異なる方向成分は無相関
- 時間が異なれば無相関
- 微粒子によっても異なる

$$\langle x^2\rangle = \frac{2kT}{m\gamma}t+\frac{2kT}{m\gamma^2}\left(e^{-\gamma t}-1\right)$$

10^{-13}秒のオーダーで減衰

t が十分大きければ $\langle x^2\rangle = \dfrac{2kT}{m\gamma}t$

拡散方程式より $\langle x^2\rangle = 2Dt$

アインシュタインの関係式
(Einstein’s relation, 1905年)

$$D=\frac{kT}{m\gamma}$$

特殊相対性理論、光量子仮説も！

5−3　速度相関関数による表現

→ 参考書[3] p.95

速度相関関数　$\phi(\tau) = \langle u(t_1)u(t_2)\rangle == \langle u(t_1)u(t_1+\tau)\rangle$

たくさんの微粒子に関する平均

粒子の変位の2乗の平均

t が十分大きいところで　$\langle x^2 \rangle = 2Dt$

$\Rightarrow$　$D = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{2t}\langle x^2 \rangle$ を拡散定数の定義と考える。

$x = \int_0^t u(t')dt'$　$\Rightarrow$　$D = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{2t}\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle u(t_1)u(t_2)\rangle$

拡散係数は速度相関関数の時間積分によって表される。

平衡状態では $\langle u(t_1)u(t_2)\rangle$ は時間差のみの関数 $\Rightarrow$ $\phi(t_1 - t_2) = \langle u(t_1)u(t_2)\rangle$

$$D = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{2t}\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \phi(t_1 - t_2)$$

5−3　速度相関関数による表現

$$D = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{2t} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \phi(t_1 - t_2) \quad \Longrightarrow \quad D = \lim_{t\to\infty} \int_0^t \left(1 - \frac{\tau}{t}\right) \phi(\tau) d\tau$$

［証明］

$$\begin{aligned}
\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_1 \phi(t_1 - t_2) &= \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \phi(t_1 - t_2) + \int_0^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 \phi(t_1 - t_2) \\
&= \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \phi(t_1 - t_2) + \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \phi(t_1 - t_2) \\
&= \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \phi(t_1 - t_2) + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \phi(t_2 - t_1) \\
&= \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} d\tau [\phi(\tau) + \phi(-\tau)] = 2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} d\tau \phi(\tau) \\
&= 2 \int_0^t d\tau \int_\tau^t dt_1 \phi(\tau) = 2 \int_0^t (t - \tau) \phi(\tau) d\tau
\end{aligned}$$

$$\tau = t_1 - t_2$$
$$\phi(-\tau) = \phi(\tau)$$

$$\therefore \ D = \lim_{t\to\infty} \int_0^t \left(1 - \frac{\tau}{t}\right) \phi(\tau) d\tau$$

$\phi(\tau)$　が減衰関数なら　$\boxed{D = \int_0^\infty \phi(\tau) d\tau}$

5−3 速度相関関数による表現

$$\phi(\tau) = \langle u(t_1) u(t_2) \rangle == \langle u(t_1) u(t_1 + \tau) \rangle$$ 速度相関関数

$\phi(\tau)$ が減衰関数なら $\boxed{D = \int_0^\infty \phi(\tau) d\tau}$

拡散係数は、速度相関関数を積分したもの

$$\phi(\tau) = \frac{k_B T}{m} e^{-\tau/\tau_c}$$ τ_c ：相関時間

$$\Rightarrow \quad D = \frac{k_B T}{m} \tau_c$$

アインシュタインの関係式
(Einstein's relation, 1905年)

$$D = \frac{k_B T}{m\gamma}$$

$\Rightarrow$ 相関時間 抵抗係数

$$\tau_c = \gamma^{-1}$$