物理統計学

5

質量 m の粒子が $-m\gamma V(t)$ の抵抗力を受けて 1 次元の自由なブラウン運動をしているとする．ここで，γ は正の定数，$V(t)$ は時刻 t における粒子の速度とする．$V(t)$ はオルンシュタイン・ウーレンベック過程で表される．$V(t_0) = v_0$ という条件付きの $V(t)$ の確率密度関数（遷移確率）は

$$p(v, t|v_0, t_0) := \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho(t-t_0)}} \exp\left(-\frac{(v - v_0\exp(-\gamma(t-t_0)))^2}{2\rho(t-t_0)}\right)$$

となる．ここで，$t > t_0$，$\rho(t) := \dfrac{D}{\gamma}(1-\exp(-2\gamma t))$，$D$ は正の定数である．$V(t)$ の関数 $f(V(t))$ に対して，$\langle f(V(t))\rangle_{v_0,t_0}$ は $f(V(t))$ の $V(t_0) = v_0$ という条件付きの平均とする．オルンシュタイン・ウーレンベック過程は定常マルコフ過程である．$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \exp(-x^2) = \sqrt{\pi}$ を用いてよい．以下の問いに答えよ．

(i) $t \to \infty$ のとき $p(v, t|v_0, t_0)$ が，温度 T の平衡状態での速度の分布であるマックスウェル分布と一致するときの D を定めよ．ここで，ボルツマン定数を k_B とする．

(ii) $V(t_0) = v_0$ の条件のもとでの粒子のエントロピー生成は

$$\sigma_{v_0,t_0}(t) := -\langle \ln p(V(t), t|v_0, t_0)\rangle_{v_0,t_0} - \frac{\gamma}{2D}\left\langle (V(t))^2 \right\rangle_{v_0,t_0}$$

と定義する．ここで，$t > t_0$，$\ln A$ は A の自然対数である．エントロピー生成率 $\dfrac{\mathrm{d}\sigma_{v_0,t_0}(t)}{\mathrm{d}t}$ が正であることを示せ．

(iii) n を正の整数，τ を正として，$a_n(v_0, \tau)$ を

$$a_n(v_0, \tau) := \langle (V(t_0+\tau) - v_0)^n \rangle_{v_0,t_0}$$

とし，$A_n(v) := \displaystyle\lim_{\tau\to+0} \frac{a_n(v,\tau)}{\tau}$ とすると，$t > t_0$ のとき

$$\frac{\partial p(v, t|v_0, t_0)}{\partial t} = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j!}\frac{\partial^j}{\partial v^j}(A_j(v)p(v, t|v_0, t_0))$$

となる．$A_n(v)$ $(n = 1, 2, \cdots)$ を求めよ．

An English Translation:

Physical Statistics

5

Consider a particle with mass m executing free Brownian motion under the influence of a friction force $-m\gamma V(t)$, where γ is a positive constant and $V(t)$ the velocity of the particle at time t. $V(t)$ is described by an Ornstein-Uhlenbeck process with the conditional probability density function, or the transition probability, of $V(t)$ given that $V(t_0) = v_0$,

$$p(v, t|v_0, t_0) := \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho(t-t_0)}} \exp\left(-\frac{(v - v_0 \exp(-\gamma(t-t_0)))^2}{2\rho(t-t_0)}\right),$$

where $t > t_0$, $\rho(t) := \dfrac{D}{\gamma}(1 - \exp(-2\gamma t))$, and D is a positive constant. $\langle f(V(t))\rangle_{v_0,t_0}$ denotes the conditional average of $f(V(t))$ given that $V(t_0) = v_0$, where $f(V(t))$ is a function of $V(t)$. The Ornstein-Uhlenbeck process is a stationary Markov process. Let k_B be Boltzmann's constant. You may use the equality $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-x^2) = \sqrt{\pi}$ without proof. Answer the following questions.

(i) Determine D when, as $t \to \infty$, $p(v, t|v_0, t_0)$ tends to the Maxwell distribution, that is, the equilibrium distribution of the velocity at temperature T.

(ii) The entropy production of the particle under the initial condition that $V(t_0) = v_0$ is defined as

$$\sigma_{v_0,t_0}(t) := -\langle \ln p(V(t), t|v_0, t_0)\rangle_{v_0,t_0} - \frac{\gamma}{2D}\left\langle (V(t))^2 \right\rangle_{v_0,t_0},$$

where $t > t_0$, and $\ln A$ denotes the natural logarithm of A. Show that the entropy production rate $\dfrac{d\sigma_{v_0,t_0}(t)}{dt}$ is positive.

(iii) Let

$$a_n(v_0, \tau) := \langle (V(t_0 + \tau) - v_0)^n\rangle_{v_0,t_0},$$

where n is a positive integer and τ is positive, and let $A_n(v) := \displaystyle\lim_{\tau\to+0} \frac{a_n(v,\tau)}{\tau}$. For $t > t_0$, the following equation is satisfied:

$$\frac{\partial p(v, t|v_0, t_0)}{\partial t} = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j!} \frac{\partial^j}{\partial v^j}(A_j(v) p(v, t|v_0, t_0)).$$

Find A_n for $n = 1, 2, \cdots$.