ランジュヴァン方程式の記憶効果と連分数展開

お茶の水大理　柴田　文明
安福　満里
理　研　内山　智香子

1.序

一般化されたランジュヴァン方程式の緩和関数のラプラス変換は，連分数の形で表すことが出来る[1]。 これは注目している物理量を次々と射影していくことによって，そのモ-ドの詳細をみるという森の理論[1]から得られた結果である。ところでこの連分数表示というのは3項関係式と関係が深い[2]。 そこでここでは，この3項関係式と物理量を射影していくというformalismの間にある関係を探り，数学的な3項関係式に物理的な意味付けを行ないたいと思う。又，フォッカー・プランク方程式との関連で近似的な議論がなされているが[3]，我々はより明確な証明と結論を与えよう。

以下2節では出発点となる3項関係式を与え，物理量の射影による展開公式や，一般化されたランジュヴァン方程式と比較出来るような形に変形していく。3節では，対応関係を表で表し，4節で以上の結果のまとめと，今後の課題について述べる。

2．3項関係式

まず出発点として次のような一般化された3項関係式を考える

$$\frac{d}{dt}x_j(t) = p_j x_{j-1}(t) + q_j x_j(t) + r_j x_{j+1}(t) \quad (0 \le j \le l-1) \tag{1a}$$

$$\frac{d}{dt}x_l(t) = p_l x_{l-1}(t) + q_l x_l(t) - \int_0^t d\tau\, \gamma_l(t-\tau) x_l(\tau) + r_l x_{l+1}(t) \tag{1b}$$

$$x_{-1}(t) = 0 \tag{1c}$$

この$\gamma_l(t)$と，$x_{l+1}(t)$の値は(1)式を解くにあたって外から与えるものとする。（但し理由は後ほど説明するが，$\gamma_l(t)$と$x_{l+1}(t)$とは独立ではない。）文献2)を参照しつつ(1)式をを解くと次のようになる。

$$x_j[s] = u_{j-1}[s] x_{j-1}[s] + y_j[s] \quad (0 \le j \le l) \tag{2a}$$

ここで

$$u_{j-1}[s] = \frac{p_j}{s - q_j - r_j u_j[s]} \quad (0 \le j \le l) \tag{2b}$$

$$-r_l u_l[s] = \gamma_l[s] \tag{2b'}$$

$$y_j[s] = \frac{1}{s - q_j - r_j u_j[s]}\left(x_j + r_j y_{j+1}[s]\right) \quad (0 \le j \le l) \tag{2c}$$

$$y_{l+1}[s] = x_{l+1}[s] \tag{2c'}$$

ここで$x_j[s]$などは$x_j(t)$のラプラス変換である。

又(1c)式より $x_{-1}[s]=0$ なので(2a)式で $j=0$ の時を考えると

$$x_0[s]=y_0[s] \tag{3}$$

が得られる。今，$\xi_j[s]$ を次のように定義する。

$$\xi_j[s]\equiv\frac{1}{s-q_j-r_ju_j[s]} \tag{4}$$

すると(2b)式より

$$u_{j-1}[s]=p_j\xi_j[s] \tag{5}$$

この(5)式を(4)式に代入して $\xi_j[s]$ について次の漸化式を得る。

$$\xi_j[s]=\frac{1}{s-q_j-r_jp_{j+1}\xi_{j+1}[s]} \qquad (0\le j\le l) \tag{6}$$

ここで(2b')式と(5)式より

$$-r_lu_l[s]=-r_lp_{l+1}\xi_{l+1}[s]=\gamma_l[s] \tag{7}$$

次に(2a)式を逆ラプラス変換する

$$x_j(t)=\int_0 d\tau u_{j-1}(t-\tau)x_j(\tau)+y_j(t)$$

t＝0 とすると

$$x_j=y_j \tag{8}$$

（ここで $x_j(0)=x_j$，　$y_j(0)=y_j$ とした）

(4)式と(8)式を用いて，(2c)を書き直す

$$y_j[s]=\xi_j[s]\left(y_j+r_jy_{j+1}[s]\right) \qquad (0\le j\le l) \tag{9}$$

(6)式を(9)式へ代入し，逆ラプラス変換を行なう

$$\frac{d}{dt}y_j(t)-q_jy_j(t)+\int_0 d\tau\Phi_j(t-\tau)y_j(\tau)=r_jy_{j+1}(t) \qquad (0\le j\le l) \tag{10a}$$

ここで　$$\Phi_j[s]\equiv-r_jp_{j+1}\xi_{j+1}[s] \tag{10b}$$

(7)式と(10b)式より

$$\Phi_l[s]=\gamma_l[s] \tag{10c}$$

(10b)式と(6)式より $\Phi_j[s]$ に関する漸化式が得られる

$$\Phi_j[s]=\frac{-r_jp_{j+1}}{s-q_{j+1}+\Phi_{j+1}[s]} \tag{11}$$

次に(9)式において $j=0$ の時を考え，右辺の $y_{j+1}[s]$ に繰り返し(9)式を用いると $y_0[s]$ の展開式が得られる。

$$y_0[s]=\sum_{j=0}^{n} D_j[s]\cdot y_j + D_n[s]\cdot r_n\cdot y_{n+1}[s] \qquad (0\le n\le l) \tag{12a}$$

ここで　$D_j[s]=r_{-1}\xi_0[s]\cdot r_0\xi_1[s]\cdots r_{j-1}\xi_j[s]$　(12b)

但し　$r_{-1}=1$ とする。

3. 対応関係

森理論	3 項関係式
----物理量 $f_0[s]$ の展開公式----	
$f_0[s]=\sum_{j=0}^{n} C_j[s]\cdot f_j + C_n[s]\cdot f_{n+1}[s]$	$y_0[s]=\sum_{j=0}^{n} D_j[s]\cdot y_j + D_n[s] r_n y_{n+1}[s]$ $(0\le n\le l)$
ここで　$c_j[s]=\Xi_0[s]\cdot\Xi_1[s]\cdots\Xi_j[s]$	ここで　$D_j[s]=r_{-1}\xi_0[s]\cdot r_0\xi_1[s]\cdots r_{j-1}\xi_j[s]$
$\Xi_j[s]=\dfrac{1}{s-i\omega_j+\Xi_{j+1}[s]\cdot\Delta_{j+1}^2}$	$\xi_j[s]=\dfrac{1}{s-q_j-r_j p_{j+1}\xi_{j+1}[s]}$
$\Delta_j^2\equiv(f_j,f_j^*)\cdot(f_{j-1},f_{j-1}^*)$	
$i\omega_j\equiv(\dot{f}_j,f_j^*)\cdot(f_j,f_j^*)^{-1}$	
$f_j(t)\ldots f_0(t)$ に働く j番目のオ-ダ-の ランダムな力	
---一般化されたランジュウアン方程式---	
$\dfrac{d}{dt}f_j(t)-i\omega_j\cdot f_j(t)+\int_0^t d\tau\,\phi_j(t-\tau)\cdot f_j(\tau)=f_{j+1}(t)$	$\dfrac{d}{dt}y_j(t)-q_j\cdot y_j(t)+\int_0^t d\tau\,\Phi_j(t-\tau)\cdot y_j(\tau)=r_j y_{j+1}(t)$
ここで　$\phi_j[s]=\dfrac{\Delta_{j+1}^2}{s-i\omega_{j+1}+\phi_{j+1}[s]}$	ここで　$\Phi_j[s]=\dfrac{-r_j p_{j+1}}{s-q_{j+1}+\Phi_{j+1}[s]}$

表から変数やパラメーターの対応をみてみると次のようになっていることが分かる

$$f_j[s] \leftrightarrow y_j[s] \tag{13a}$$

$$\Xi_j[s] \leftrightarrow \xi_j[s] \qquad \phi_j[s] \leftrightarrow \Phi_j[s] \tag{13b}$$

$$i\omega_j \leftrightarrow q_j \qquad \Delta_j^2 \leftrightarrow p_j \tag{13c}$$

但し，$r_j = 1$ $(0 \le j \le l)$とした。ここで，$f_j(t)$に対応する量は$x_j(t)$ではなくて，$y_j(t)$であることが重要である。

4. まとめと今後の課題

以上の結果をまとめると次のようになる。すなわち今注目している物理量を$y_0(t)$とすると，$y_0(t)$についてのランジュヴァン方程式は

$$\frac{d}{dt}y_0(t) - q_0 \cdot y_0(t) + \int_0^t d\tau \Phi_j(t-\tau) \cdot y_0(\tau) = y_1(t) \tag{14a}$$

ここで
$$\Phi_0[s] = \cfrac{-p_1}{s - q_1 + \cfrac{-p_2}{s - q_2 + \cfrac{\ddots}{\cfrac{-p_l}{s - q_l + \Phi_l[s]}}}} \tag{14b}$$

のように書けるがこの(14a)式(14b)式は以下の3項関係式と同等である。

$$\frac{d}{dt}y_0(t) = q_0 y_0(t) + x_1(t) \tag{15a}$$

$$\frac{d}{dt}x_j(t) = p_j x_{j-1}(t) + q_j x_j(t) + x_{j+1}(t) \quad (0 \le j \le l-1) \tag{15b}$$

$$\frac{d}{dt}x_l(t) = p_l x_{l-1}(t) + q_l x_l(t) - \int_0^t d\tau \Phi_l(t-\tau) x_l(\tau) + x_{l+1}(t) \tag{15c}$$

ここで$y_j(t)$と$x_j(t)$は(2a)式で結びついている。また3節の対応関係より$\Phi_l(t)$は$y_{l+1}(t)$の相関関数（減衰関数，記憶核）といえるので，(2c')式より$\Phi_l(t)$は$x_{l+1}(t)$の相関関数である。これが2節で$x_{l+1}(t)$と$\Phi_l(t)(=\gamma_l(t))$が互いに独立でないとした理由である。

以上の結果は$\{x_j(t)\}$が古典量であると量子力学的演算子であると関わらず成立する。又，$\{x_j(t)\}$が古典量であれば，この特別な場合，すなわち$y_{l+1}(t)(=x_{l+1}(t))$の相関がホワイトである時，上の結果は一般化されたランジュヴァン方程式とフォッカー・プランク方程式とを結び付ける。

------ フォッカー・プランク方程式 -----

$$\frac{\partial}{\partial t}p(\{x_j\},t\,|\,\{x'_j\},t=0)=\left\{-\frac{\partial}{\partial x_0}(q_0x_0+x_1)-\sum_{j=1}^{l-1}\frac{\partial}{\partial x_j}(p_jx_{j-1}+q_jx_j+x_{j+1})\right.$$
$$\left.-\frac{\partial}{\partial x_l}(p_lx_{l-1}+q_lx_l)+\alpha^2\frac{\partial^2}{\partial x_l^2}\right\}p(\{x_j\},t\,|\,\{x'_j\},t=0)\quad\textbf{(16a)}$$

ここで　$\alpha^2=(x_{l+1},x_{l+1})$　**(16b)**

(16)式の結果を量子力学に拡張するには，多少の考察が必要であろう。

参考文献

1) H.Mori, Prog.Theor.Phys.33(1965), 423.
H.Mori, Prog.Theor.Phys.34(1965), 399
2) H.Risken:The Fokker-Planck Equation(Springer-Verlag, Berin, Heidelberg, New York, 1984, 1989)
3) M.Ferrario and P.Gyigolini, J.Math.Phys.20(1979), 2567