<table>
<thead>
<tr>
<th>項目</th>
<th>内容</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>タイトル</td>
<td>ランジュヴァン方程式の記憶効果と連分数展開（筑波大学開学20周年記念第2回『非平衡系の統計物理 現状と展望』シンポジウム 研究会報告）</td>
</tr>
<tr>
<td>著者</td>
<td>柴田 文明、安福 満里、内山 智香子</td>
</tr>
<tr>
<td>発行機関</td>
<td>物性研究</td>
</tr>
<tr>
<td>タイトル</td>
<td>非平衡系の統計物理の記憶効果に関する研究</td>
</tr>
<tr>
<td>タイトル</td>
<td>物性研究</td>
</tr>
<tr>
<td>タイトル</td>
<td>物性研究</td>
</tr>
<tr>
<td>タイトル</td>
<td>物性研究</td>
</tr>
<tr>
<td>タイトル</td>
<td>物性研究</td>
</tr>
<tr>
<td>タイトル</td>
<td>物性研究</td>
</tr>
</tbody>
</table>

京都大学
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。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、そのモードの詳細をみるという森の理論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。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、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

\[
\begin{align*}
\frac{d}{dt} x_j(t) &= p_j x_{j-1}(t) + q_j x_j(t) + r_j x_{j+1}(t) \quad (0 \leq j \leq l-1) \\
\frac{d}{dt} x_j(t) &= p_j x_{j-1}(t) + q_j x_j(t) - \int_0^t \tau \gamma_j(t - \tau) x_i(\tau) + r_j x_{j+1}(t) \\
x_{-1}(t) &= 0
\end{align*}
\]

この\( \gamma_j(t) \) と、\( x_{j+1}(t) \) 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、\( \gamma_j(t) \) と\( x_{j+1}(t) \) とは独立ではない。）文献2)を参照しつつ(1式)を解くと次のようにになる。

\[
\begin{align*}
x_j[s] &= u_{j-1}[s] x_{j-1}[s] + y_j[s] \quad (0 \leq j \leq l) \\
\text{ここで} \quad u_{j-1}[s] &= \frac{p_j}{s - q_j - r_j \gamma_j[s]} \quad (0 \leq j \leq l) \\
\gamma_j[s] &= \frac{1}{s - q_j - r_j \gamma_j[s]} (x_j + r_j y_{j+1}[s]) \quad (0 \leq j \leq l) \\
y_{j+1}[s] &= x_{j+1}[s] \quad (0 \leq j \leq l)
\end{align*}
\]

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
$$x_0[s] = y_0[s]$$
(3)

が得られる。今、$\xi_j[s]$ を次のように定義する。
$$\xi_j[s] = \frac{1}{s - q_j - r_j u_j[s]}$$
(4)

すると(2b)式より
$$u_{j-1}[s] = p_j \xi_j[s]$$
(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。
$$\xi_j[s] = \frac{1}{s - q_j - r_j p_j \xi_{j+1}[s]}$$
(0 ≤ $j$ ≤ $l$)
(6)

ここで(2b)式と(5)式より
$$- \eta u_1[s] = -\eta_1 p_j \xi_{j+1}[s] = y_j[s]$$
(7)

次に(2a)式を逆ラプラス変換する
$$x_j(t) = \int_0^t d\tau u_{j-1}(t-\tau) x_j(\tau) + y_j(t)$$
$t = 0$ とすると
$$x_j = y_j$$
(ここで $x_j(0) = x_j, \hspace{0.5em} y_j(0) = y_j$ とした)
(8)

(4)式と(8)式を用いて、(2c)を書き直す
$$y_j[s] = \xi_j[s](y_j + r_j y_{j+1}[s])$$
(0 ≤ $j$ ≤ $l$)
(9)

(6)式を(9)式へ代入し、逆ラプラス変換を行なう
$$\frac{d}{dt} y_j(t) - q_j y_j(t) + \int_0^t d\tau \Phi_j(t-\tau) y_j(\tau) = r_j y_{j+1}(t)$$
(0 ≤ $j$ ≤ $l$)
(10a)

ここで
$$\Phi_j[s] = -r_j p_j \xi_{j+1}[s]$$
(10b)

(7)式と(10b)式より
$$\Phi_i[s] = y_i[s]$$
(10c)

(10b)式と(6)式より$\Phi_j[s]$に関する漸化式が得られる
$$\Phi_j[s] = \frac{-r_j p_{j+1}}{s - q_{j+1} + \Phi_{j+1}[s]}$$
(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。

\[
y_0[s] = \sum_{j=0}^{n} D_j[s] \cdot y_j + D_0[s] \cdot \sum_{n=0}^{j} r_n \cdot y_{n+1}[s] \quad (0 \leq n \leq l) \tag{12a}
\]

ここで

\[
D_j[s] = r_0 \xi_0[s] \cdot r_0 \xi_1[s] \cdots r_{j-1} \xi_j[s]
\]

但し \( r_j = 1 \) とする。

3. 対応関係

<table>
<thead>
<tr>
<th>森理論</th>
<th>3 項関係式</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>1. 物理量 ( f_0[s] ) の展開公式</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>( f_0[s] = \sum_{j=0}^{n} C_j[s] \cdot f_j + C_0[s] \cdot f_{n+1}[s] )</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>ここで  ( C_j[s] = \Xi_0[s] \cdot \Xi_1[s] \cdots \Xi_j[s] )</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>( \Xi_j[s] = \frac{1}{s - i \omega_j + \Xi_{j+1}[s] \cdot \Delta_j} )</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>( \Delta_j = (f_{j+1}, f_j) \cdot (f_{j+1}, f_j)^{-1} )</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>( f_j(t) \cdots f_0(t) ) に働く ( j ) 番目のオーダーのランダムな力</td>
<td></td>
</tr>
</tbody>
</table>

| 一般化されたランジュアン方程式 |
| \( \frac{d}{dt} f_j(t) - i \omega_j \cdot f_j(t) + \int_0^t d\tau \phi_j(t-\tau) \cdot f_j(\tau) = f_{j+1}(t) \) |
| ここで  \( \phi_j[s] = \frac{\Delta_{j+1}}{s - i \omega_{j+1} + \phi_{j+1}[s]} \) |

| 3. 項関係式 |
| \( y_0[s] = \sum_{j=0}^{n} D_j[s] \cdot y_j + D_0[s] \cdot \sum_{n=0}^{j} r_n \cdot y_{n+1}[s] \) |
| ここで  \( D_j[s] = r_0 \xi_0[s] \cdot r_0 \xi_1[s] \cdots r_{j-1} \xi_j[s] \) |
| \( \xi_j[s] = \frac{1}{s - q_j - r_j \sum_{n=0}^{j} \xi_{n+1}[s]} \) |

- 157 -
研究会報告

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

\[ f_j[s] \leftrightarrow y_j[s] \] (13a)

\[ \Xi_j[s] \leftrightarrow \xi_j[s] \quad \Phi_j[s] \leftrightarrow \Phi_j[s] \] (13b)

\[ i\omega_j \leftrightarrow q_j \quad \Delta_j^2 \leftrightarrow p_j \] (13c)

但し，\( r_j = 1 \quad (0 \leq j \leq l) \)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\( y_0(t) \)とするとき，\( y_0(t) \)についてのランジュヴァン方程式は

\[ \frac{d}{dt}y_0(t) - q_0 \cdot y_0(t) + \int_0^t d\tau \Phi_j(t-\tau) \cdot y_0(\tau) = \chi(t) \] (14a)

ここで

\[ \Phi_0[s] = \frac{-p_1}{s - q_1} + \frac{-p_2}{s - q_2} + \cdots + \frac{-p_l}{s - q_l + \Phi_1[s]} \] (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。

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

\[ \frac{d}{dt}x_j(t) = p_j x_{j-1}(t) + q_j x_j(t) + x_{j+1}(t) \quad (0 \leq j \leq l - 1) \] (15b)

\[ \frac{d}{dt}x_i(t) = p_i x_{i-1}(t) + q_i x_i(t) - \int_0^t d\tau \Phi_i(t-\tau) x_i(\tau) + x_{i+1}(t) \] (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\( \Phi_i(t) \)は\( x_{i+1}(t) \)の相関関数（減衰関数, 記憶核）といえるので，(2c)式より\( \Phi_i(t) \)は\( x_{i+1}(t) \)の相関関数である。これが2節で\( x_{i+1}(t) \)と\( \Phi_i(t) (= \gamma_i(t)) \)が互いに独立でないとした理由である。
以上の結果は\(\{x_i(t)\}\)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，\(\{x_i(t)\}\)が古典量であれば，この特別な場合，すなわち\(y_{i+1}(t) (= x_{i+1}(t))\)の相関がホワイトである時，上の方程式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 ------

\[
\frac{\partial}{\partial t} p(x_0, x_1, \ldots, x_N, t) = \left\{ -\frac{\partial}{\partial x_0} (q_0 x_0 + x_i) - \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\partial}{\partial x_j} (p_j x_{j-1} + q_j x_j + x_{j+1}) \right. \\
- \left. \frac{\partial}{\partial x_i} (p_i x_{i-1} + q_i x_i) + \alpha^2 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \right\} p(x_0, x_1, \ldots, x_N, t = 0)
\]

ここで \(\alpha^2 = (x_{i+1}, x_{i+1})\)

(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
H.Mori, Prog.Theor.Phys.34(1965), 399