数理解析研究所講究録
第434巻 1981年 154-182

T-正値性と揺動散逸定理

東大理　岡部靖憲

§1 序

一昨年(1979)の研究集会「確率過程論と開放系の統計力学 I」において報告したことのつづきとして、そこで未解決であったことを解決する。即ち、T-正値性をもつ正規定常過程の時間発展を記述する確率微分方程式のクラスを特徴付け、その方程式に対する一般化されたEinsteinの関係式と一般化された第一種揺動散逸定理を証明する。その結果をヒルベルト空間の上に定式化し、T-正値性をもつ定常過程の時間発展を記述するLangevin方程式——$[\alpha, \beta, \delta]$-Langevin方程式——を導き、それに対する揺動散逸定理を得ることができる。

森肇氏のブラウン運動の理論——森の方程式とそれに対する揺動散逸定理——と比較し、何故我々の結果が、久保亮五氏によって提出された、「非線形拡散過程の定常状態に対する揺動散逸定理を求める」問題に答えることができるかについ

て述べたいと思う。

§2 一次元拡散過程と揺動散逸定理

$\mathcal{X} = (X_t, P_x ; t \in [0,\infty), x \in \mathbb{R})$ を一次元拡散過程で、その生成作用素 $\mathcal{G}$ が

$$(2\text{-}1) \quad \boxed{\mathcal{G} = a(x)\frac{d^2}{dx^2} + b(x)\frac{d}{dx}}$$

で与えられるものを考える。

a と b とが適当な条件をみたせば、$\mathcal{X}$ の定常状態をあらわす定常マルコフ過程 $X = (X_t, P ; t \in \mathbb{R})$ の時間発展を記述する確率微分方程式は、

$$(2\text{-}2) \quad \boxed{dX_t = \left(-\beta X_t + \int_{-\infty}^{0} X_{t+s}\,\gamma(s)\,ds\right)dt + \alpha\, dW_t \quad (t \in \mathbb{R})}$$

となる。ここで、四つ組 $[\alpha, \beta, \gamma, W_t]$ は次の性質をみたす:

(2-3) $\alpha > 0, \quad \beta > 0$

(2-4) $\gamma(s) = \int_0^\infty e^{s\lambda}\mu(d\lambda)$, μ は $\mu(\{0\}) = 0$ をみたす測度

(2-5) $\beta \geq \int_{-\infty}^{0} \gamma(s)\,ds \quad \left(= \int_0^\infty \frac{1}{\lambda}\mu(d\lambda)\right)$

(2-6) $W = (W_t ; t \in \mathbb{R})$ で、各 W_t は $L^2(P)$ に属し、

(i) $\|W_t - W_s\|^2 = |t-s|$

(ii) 各 t に対して、$X_s\ (s \leq t)$ の $L^2(P)$ の中で生成する閉部分空間 $= W_{s_1} - W_{s_2}\ (s_1, s_2 \leq t)$ の $L^2(P)$ の中

で生成する閉部分空間

さらに、かかる性質をもつ四つ組 $[\alpha, \beta, \gamma; W_t]$ は唯ひとつに定まる。

方程式(2.2)において、揺動項 αdW_t は、(2.6)(i)によって white spectral をもち、直交性をもっており、(2.6)(ii)によって、いわゆる causality が成り立っている。この意味で $W = (W_t; t \in \mathbb{R})$ を <u>innovation process</u> とよぶことができる。方程式(2.2)を <u>$[\alpha, \beta, \gamma]$ – Langevin 方程式</u>ということにする。このとき、我々は次の

<u>一般化された Einsteinの関係式</u>

(2.7)
$$\frac{\alpha^2}{2} = R(0)\ C_{\beta,\gamma}$$

ここで

(2.8)
$$R(0) = (X_0, X_0)$$

(2.9)
$$C_{\beta,\gamma} = \pi\left(\int_{\mathbb{R}} |\beta - i\xi - \hat{\gamma}(\xi)|^{-2} d\xi\right)^{-1}$$

が成り立つ。定数 $C_{\beta,\gamma}$ は、$[\alpha, \beta, \gamma]$ – Langevin 方程式の drift term のみで定まり、$\gamma = 0$ のとき、$C_{\beta,0} = \beta$ となり、(2.2)は Ornstein–Uhlenbeck のブラウン運動に、(2.7)は Einstein の関係式に他ならないことに注意して、$C_{\beta,\gamma}$ を <u>一般化された抵抗</u> ということにする。

そして、関係式(2.7)を (2.1)の作用素の拡散係数 a

と 漂速係数 b のことばであらわすと、次の様になる。

$$
(2.10)\quad \boxed{
\begin{cases}
\dfrac{\alpha^2}{2} = - \dfrac{\displaystyle\int_{\mathbb{R}} \frac{x\,b(x)}{a(x)} e^{B(x)}\,dx}{\displaystyle\int_{\mathbb{R}} \frac{1}{a(x)} e^{B(x)}\,dx} \\[4ex]
R(0) = \dfrac{\displaystyle\int_{\mathbb{R}} \frac{x^2}{a(x)} e^{B(x)}\,dx}{\displaystyle\int_{\mathbb{R}} \frac{1}{a(x)} e^{B(x)}\,dx} \\[4ex]
C_{\beta,\gamma} = - \dfrac{\displaystyle\int_{\mathbb{R}} \frac{x\,b(x)}{a(x)} e^{B(x)}\,dx}{\displaystyle\int_{\mathbb{R}} \frac{x^2}{a(x)} e^{B(x)}\,dx}
\end{cases}
\quad \text{但し、}\ B(x) = \int_0^x \frac{b(y)}{a(y)}\,dy
}
$$

この関係式 (2.7) と (2.10) を (2.1) の生成作用素 $\mathcal{G}$ をもつ一次元拡散過程に対する一般化された Einstein の関係式ということにする。

例 1 (Ornstein-Uhlenbeck のブラウン運動)

$$a(x) = \frac{\alpha^2}{2}, \quad b(x) = -\beta x \quad (\alpha>0, \beta>0)$$

このとき、(2.2) は、

$$(2.11)\quad dX_t = -\beta X_t\,dt + \alpha\,dB_t$$

となり、(2.7) は、

$$(2.12)\quad \frac{\alpha^2}{2} = v\cdot\beta$$

とかくとき、v は $\mathcal{G}$ を生成作用素にもつ拡散過程 (Ornstein-

Uhlenbeckのブラウン運動)の不変測度、このときは正規分布、の分散に等しい。

例2. $(O.U.B.M)^3$

$\mathbb{X}=(X_t; t\in\mathbb{R})$ を例1のOrnstein-Uhlenbeckのブラウン運動とし、$Y_t = X_t^3$ なる定常マルコフ過程 $\mathbb{Y}=(Y_t; t\in\mathbb{R})$ を考える。$P(\cdot \mid Y_0=y)$ なる条件付確率の下で、$t>0$ においては、Y_t は、

$$(2.13)\qquad dY_t = (-3\beta Y_t + 3\alpha^2 Y_t^{\frac{1}{3}})\,dt + 3\alpha Y_t^{\frac{2}{3}}\,dB_t$$

(($B_t; t\geq 0$) は B.M.)

なるマルコフ型の確率微分方程式をみたしており、(2.1)の生成作用素 $\mathcal{G}$ の係数 $a(y)$ と $b(y)$ は、

$$(2.14)\qquad \begin{cases} a(y) = \dfrac{9}{2}\alpha^2 y^{\frac{4}{3}} \\ b(y) = -3\beta y + 3\alpha^2 y^{\frac{1}{3}} \end{cases}$$

となる。このときの我々の(2.2)で与えられる $[\alpha_{\mathbb{Y}}, \beta_{\mathbb{Y}}, \gamma_{\mathbb{Y}}]$-Langevin方程式の三つ組 $[\alpha_{\mathbb{Y}}, \beta_{\mathbb{Y}}, \gamma_{\mathbb{Y}}]$ は、

$$(2.15)\qquad \begin{cases} \alpha_{\mathbb{Y}} = \sqrt{54\beta v^{-3}} \\ \beta_{\mathbb{Y}} = \left(4-\sqrt{\dfrac{11}{3}}\right)\beta \\ \gamma_{\mathbb{Y}}(s) = \chi_{(-\infty,0)}(s)\,\dfrac{4(\sqrt{33}-5)}{3}\,\beta^2 e^{\sqrt{\frac{11}{3}}\beta s} \end{cases}$$

となり、$\mathbb{Y}$ に対する一般化された Einstein の関係式 (2.7)(2.10)は、

$$(2.16)\quad \begin{cases} \dfrac{\alpha_y^2}{2} = 27\beta v^3 \\ R_y(0) = 15\cdot v^3 \\ C_{\beta_y,\alpha_y} = \dfrac{9}{5}\beta \end{cases}$$

となる。

§3 一次元拡散過程と T－正値性

$\mathfrak{X} = (X_t, P_x;\ t\in[0,\infty),\ x\in \mathbb{R}^1)$ は §2 と同じ一次元拡散過程とする。$a(x), b(x)$ ((2.1)にあらわれる) は連続函数とし、$a(x)$ は正値とする。このとき、m 測度 $m(dx)$ を

$$(3.1)\qquad m(dx) = \frac{1}{a(x)}\exp\left(\int_0^x \frac{b(y)}{a(y)}dy\right)dx$$

で定義し、$m(\mathbb{R})$ は有限であると仮定して、

$$(3.2)\qquad P_\infty(dx) = \frac{1}{m(\mathbb{R})}m(dx)$$

によって確率測度を定義する。境界点 $-\infty$ と $+\infty$ が Feller の意味で、流出境界あるいは自然境界のとき、即ち、

$$(3.3)\qquad \int_{(-\infty,0)}\left(\int_y^0 dm(x)\right)e^{-B(y)}dy = \int_{(0,\infty)}\left(\int_0^y dm(x)\right)e^{-B(y)}dy = \infty,$$

ここで

$$(3.4)\qquad B(y) = \int_0^y \frac{b(x)}{a(x)}dx,$$

が成り立っているときは、$m(dx)$ は $\mathfrak{X}$ の不変測度となる。従って、$P_\infty(dx)$ を $\mathfrak{X}$ の初期分布にとることによって、

$\mathfrak{X}$の定常状態を記述する定常マルコフ過程 $\mathbb{X}=(X_t, P; t\in\mathbb{R})$ がえられる： $-\infty<t_1<t_2<\cdots<t_n<\infty$ に対し、

(3.5) $$P((X_{t_1}, X_{t_2},\cdots, X_{t_n})\in dx_1\cdots dx_n)$$
$$= P_\infty(dx_1)\,p(t_2-t_1,x_1,dx_2)\cdots p(t_n-t_{n-1},x_{n-1},dx_n)$$

ここで、 $p(t,x,dy)$ $(t>0)$ は $\mathfrak{X}$ の遷移確率で、

(3.6) $$p(t,x,dy) = P_x(\mathfrak{X}_t\in dy).$$

さらに大事なことは、(2.1)の作用素$\mathcal{G}$が$L^2(\mathbb{R},P_\infty)$上の強連続な対称半群を生成することである。この結果、$-\mathcal{G}$の単位の分解を $(E_\lambda;\ \lambda\geq 0)$ とするとき、任意の実数値の$L^2(\mathbb{R},P_\infty)$の元fに対して、 $\mathbb{X}_f=(f(X_t);\ t\in\mathbb{R})$ は定常過程となるが、その共分散函数をR_fとすると、

(3.7) $$R_f(t-s) = (e^{|t-s|\mathcal{G}}f, f)_{P_\infty} = \int_{[0,\infty)} e^{-|t-s|\lambda}\, d(E_\lambda f, f)_{P_\infty}$$

従って、 測度 $\sigma_f(d\lambda)$を

(3.8) $$\sigma_f(d\lambda) = d(E_\lambda f, f)$$

とおくと、

(3.8) $$R_f(t) = \int_{[0,\infty)} e^{-|t|\lambda}\,\sigma_f(d\lambda).$$

特に、座標函数 $f_0(x)=x$ が $L^2(\mathbb{R},P_\infty)$ に属するときは、$\mathbb{X}$の共分散函数 R は、次の形をしている：

(3.9) $$R(t) = \int_{[0,\infty)} e^{-|t|\lambda}\,\sigma(d\lambda)$$ （$\sigma(d\lambda)$は有界な測度）

かかる性質をもつ定常過程は、線形の意味でT-正値性をもつといわれる。実は、一次元マルコフ定常過程$\mathbb{X}$は、

非線形の意味でもT-正値性をもつことがわかる。このことは次の§4でのべることにする。

§4 T-正値性とそれに付随するハミルトニアン

$(S, \mathcal{F})$ を任意の可測空間とし、W_S を

$$(4.1) \qquad W_S = \{ w : (-\infty, \infty) \longrightarrow S \}$$

で定義される path 空間とし、N_t を $N_t(w) = w(t)$ で定義する座標写像とする: $N_t : W_S \longrightarrow S \ (t \in \mathbb{R})$.

W_S の中の σ-加法族 $\mathcal{B}, \mathcal{B}^+, \mathcal{B}^-, \mathcal{B}^0$ を

$$(4.2) \qquad \begin{cases} \mathcal{B} = \sigma(N_t ; t \in \mathbb{R}), \\ \mathcal{B}^+ = \sigma(N_t ; t \geq 0), \quad \mathcal{B}^- = \sigma(N_t ; t \leq 0), \quad \mathcal{B}^0 = \sigma(N_0) \end{cases}$$

で定義する。さらに、θ_t, τ を W_S の上の shift operator, time reflection operator とする:

$$(4.3) \qquad \begin{cases} (\theta_t(w))(s) = w(s+t) \\ (\tau w)(s) = w(-s). \end{cases}$$

さて、以下において、$(W_S, \mathcal{B})$ の上に対称で定常な測度 μ が与えられているとする:

$$(4.4) \qquad \theta_t(\mu) = \tau(\mu) = \mu \quad (t \in \mathbb{R}).$$

例4.1 §3で述べた一次元定常マルコフ過程 $X = (X_t, P ; t \in \mathbb{R})$ は、$(S, \mathcal{F}) = (\mathbb{R}, \mathcal{B}_{\mathbb{R}})$、$\mu = P$ として上の例

になっている。

<u>例4.2</u>　多次元($\mathbb{R}^d$)マルコフ過程で不変測度をもち、それに関して対称なときは、一次元のときと同じく、定常マルコフ過程を得ることができ、上の例になっている。

さて、一般の場合に戻って、対称な定常測度 μ に対して、ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$, $\mathcal{H}^+$, $\mathcal{H}^-$, $\mathcal{H}^0$, $\mathcal{H}^{ph}$ を

$$
(4.5)\quad
\begin{cases}
\mathcal{H} = L^2(W_S, \mathcal{B}, \mu), \\
\mathcal{H}^+ = L^2(W_S, \mathcal{B}^+, \mu), \quad \mathcal{H}^- = L^2(W_S, \mathcal{B}^-, \mu) \\
\mathcal{H}^0 = L^2(W_S, \mathcal{B}^0, \mu), \quad \mathcal{H}^{ph} = (P_{\mathcal{H}^+} A ; A \in \mathcal{H}^-) \text{ で生成される閉部分空間)}
\end{cases}
$$

ここで、$P_{\mathcal{H}^+}$ は $\mathcal{H}^+$ 上の射影作用 作用素である。

この $\mathcal{H}$ 上に、<u>unitary 群 $(U_t ; t \in \mathbb{R})$</u> と <u>time reflection operator T</u> を

$$
(4.6)\quad
\begin{cases}
U_t(A) = A(\theta_t) \\
T(A) = A(\tau)
\end{cases}
$$

によって定義する。このとき、

<u>定義4.1</u>　μ が <u>T-正値性</u> をもつとは、$P_{\mathcal{H}^+} T P_{\mathcal{H}^+} \geq 0$ が成り立つこととする。

<u>定義4.2</u>　μ が <u>マルコフ性</u> をもつとは、$\mathcal{B}^0$ で条件を付けたとき、$\mathcal{B}^+$ と $\mathcal{B}^-$ が独立のときをいう。

<u>命題4.1</u>　マルコフ性 $\Longrightarrow$ T－正値性

を示すことができる。

さて、T－正値性をもつ測度 μ に対し、

<u>定理4.1</u>　$\mathcal{H}^+$ の上に 非負の自己共役作用素 H が存在し、

(4.7)　$(U_t A, A) = (e^{-|t|H}A, A)$　$\forall t\in\mathbb{R}, \forall A\in\mathcal{H}^0$

が成り立つ。かかる H は唯ひとつである。

この H を <u>μ に付随するハミルトニアン</u> ということにする。

例4.1, 4.2 でのべた定常マルコフ過程のときは、生成作用素 $\mathcal{G}$ は、T－正値性をもつと考えたときに定まるハミルトニアン H と unitary 同値である：

$$
\begin{cases}
\mathcal{H}^0 \ni A \longleftrightarrow f\in L^2(P_\infty) \quad (P_\infty:\text{不変測度}) \\
\mathcal{D}(H)\ni A \xleftrightarrow{A=f(N_0)} f\in\mathcal{D}(\mathcal{G}) \\
HA = (\mathcal{G}f)(N_0).
\end{cases}
$$

ハミルトニアン H の単位の分解を $(E_\lambda;\lambda\geq 0)$ とすると、(4.7) は、

(4.8)　$$(U_t A, A) = \int_{[0,\infty)} e^{-|t|\lambda}\,\sigma_A(d\lambda) \qquad (A\in\mathcal{H}^0)$$

但し、

(4.9)　$$\sigma_A(d\lambda) = d(E_\lambda A, A)$$

とかき直すことができる。

§5. 森の方程式と揺動散逸定理

$\mathcal{H}$ をヒルベルト空間、L をその上の自己共役作用素とし、$(U_t \equiv e^{itL}; t \in \mathbb{R})$ を iL を生成作用素にもつ $\mathcal{H}$ 上の unitary 群とする。§4 の (4.6) で定義した shift operator の作る unitary 群はひとつの例である。$\mathcal{H}$ の元 A に対し

(5.1) $$A_t \equiv U_t A \quad (t \in \mathbb{R})$$

と、$\mathbb{A} = (A_t; t \in \mathbb{R})$ の共分散関数を R_A とする：

(5.2) $$R_A(t-s) = (A_t, A_s).$$

A が $\mathcal{D}(L)$ に属するときは、良く知られている様に、A_t は次の Schrödinger 型の偏微分方程式をみたす：

(5.3) $$A_t' = iLA_t \quad (t \in \mathbb{R}).$$

森肇氏は、射影演算子の方法を用いて、A_t の満たす常微分積分方程式を、揺動散逸定理が成り立つべく、random force を取り出し、次の様に導いた。

定理（森の方程式と揺動散逸定理）

もしも、A が $\mathcal{D}(L)$ に属するならば、次の性質をみたす三つ組 $[\beta, \varphi, \mathbb{F}]$ が存在する：

(5.4) $$\boxed{A_t' = i\beta A_t - \int_0^t \varphi(t-s) A_s \, ds + F_t \quad (t \in \mathbb{R})}$$

(5.5) $\beta \in \mathbb{R}$

(5.6) $\varphi(t)$ は非負定符号関数

(5.7) $\mathbb{F} = (F_t; t \in \mathbb{R})$ は、各元 F_t は $\mathcal{H}$ の元で、

(5-8) $\quad (F_t, A) = 0 \qquad (\forall t \in \mathbb{R})$

(5-9) $\quad \boxed{(F_t, F_s) = (A, A)\,\varphi(t-s) \qquad (t, s \in \mathbb{R})}$

方程式(5-4)が森の方程式であり、関係式(5-9)がそれに対する揺動散逸定理である。この森氏の定理は、§3,§4でのべた定常マルコフ過程のshift operatorの作るunitary群に対しては適用できない。それは、マルコフ過程のsample pathは、ほとんどすべての場合、可微分でないジグザグ曲線を描き、森氏の定理の大前提「初期状態Aが$\mathcal{D}(L)$に属する」が成り立っていないのである。しかし、§4で求めたハミルトニアンL(マルコフのときは生成作用素とunitary同値)の定義域に初期状態が入ることはあり得て、条件に課すことができるのである。このことを考慮して、マルコフ定常過程を含めて、T－正値性をもつ場合に対するLangevin方程式とそれに対する揺動散逸定理を次の§6で求めることにする。

§6 [α, β, γ]-Langevin方程式と揺動散逸定理

$(U_t\,;\, t \in \mathbb{R})$は、ヒルベルト空間$\mathcal{H}$上のunitary群とし、$\mathcal{H}$の元$A$に対して、(5-1)と同じく、$U_t$による$A$の時間発展を$A_t$とし、$\mathcal{A} = (A_t\,;\, t \in \mathbb{R})$の共分散関数を(5-2)と同じく、$R_A$とする。このとき、$R_A$は次の様に

表現できることを仮定する：

$$(6.1)\qquad R_A(t) = \int_{[0,\infty)} e^{-|t|\lambda}\,\sigma_A(d\lambda)$$

ここで、σ_A は $[0,\infty)$ 上の有界な測度で

$$(6.2)\qquad \sigma_A(\{0\})=0 \quad と \quad \int_0^\infty \lambda^2\,\sigma_A(d\lambda) < \infty$$

をみたす。

このとき、次の定理を示すことができる。

<u>定理6.1</u> （<u>$[\alpha,\beta,\gamma]$-Langevin 方程式</u>）

四つ組 $[\alpha,\beta,\gamma,W]$ で次の性質をもつものが唯ひとつ定まる：

$$(6.3)\qquad \boxed{A_t - A_s = \int_s^t \left(-\beta A_\tau + \int_{-\infty}^0 A_{\tau+u}\,\gamma(u)\,du\right)d\tau + \alpha(W_t - W_s) \quad (s<t)}$$

$$(6.4)\qquad \alpha>0,\quad \beta>0$$

$$(6.5)\qquad \gamma(s) = \int_0^\infty e^{s\lambda}\,\mu(d\lambda),\ \mu \text{ は } \mu(\{0\})=0 \text{ をみたす測度}$$

$$(6.6)\qquad \beta \geq \int_{-\infty}^0 \gamma(s)\,ds \quad \left(= \int_0^\infty \frac{1}{\lambda}\,\mu(d\lambda)\right)$$

(6.7) $W = (W_t;\ t\in\mathbb{R})$ で、各 W_t は $\mathcal{H}$ の元で、

(i) $\|W_t - W_s\|^2 = |t-s|$

(ii) 各 $t\in\mathbb{R}$ に対し、$A_s\ (s\leq t)$ の $\mathcal{H}$ の中で生成する閉部分空間 $=$ $W_{s_1}-W_{s_2}\ (s_1,s_2\leq t)$ の $\mathcal{H}$ の中で生成する閉部分空間.

<u>注意6.1</u> §4 でのべた如く、T-正値性をもつときは、
((4.5), (4.9))
shift operator のつくる unitary 群に対しては、$\mathcal{H}^0$ の元 A_t

初期状態にとれば、(6.1)は成り立つ。さらに、(6.2)が成り立つための条件は、

$$(6.8) \qquad A \in \mathcal{D}(H), \qquad e^{-tH}A \longrightarrow 0 \quad (t \to \infty)$$

である。

<u>注意6.2</u>　方程式(6.3)を <u>[α, β, γ]-Langevin 方程式</u>ということにする。

[α, β, γ]-Langevin 方程式に対する揺動散逸定理を次に求めよう。まず、

<u>定理6.2</u>　(<u>一般化されたEinsteinの関係式</u>)

$$(6.9) \qquad \boxed{\frac{\alpha^2}{2} = (A, A)\, C_{\beta,\gamma}}$$

ここで、$C_{\beta,\gamma}$ は次で定まる：

$$(6.10) \qquad \boxed{C_{\beta,\gamma} = \pi\left(\int_{\mathbb{R}} |\beta - i\xi - \hat{\gamma}(\xi)|^{-2} d\xi\right)^{-1}}$$

この $C_{\beta,\gamma}$ を<u>一般化された抵抗</u>ということにする。

$C_{\beta,\gamma}$, β, γ の間に、次の不等式が成り立つ。

<u>定理6.3</u>

(i) $\quad (0 \leq)\ \beta - \int_{-\infty}^{0} \gamma(s)\,ds \leq C_{\beta,\gamma} \leq \beta$

(ii) (i)でどちらかで等号が成り立つ $\Longleftrightarrow$ $\gamma = 0$

(このとき $C_{\beta,0} = \beta$)

久保型の第一種揺動散逸定理に関連して、

定理 6.4　ある定数 c が存在して、

$$(6.11)\qquad \frac{1}{\beta - i\zeta - \hat{\gamma}(\zeta)} = c\int_0^\infty e^{i\zeta t} R_A(t)\,dt \qquad (\zeta \in \mathbb{C}^+)$$

$$\Longleftrightarrow \quad \gamma = 0$$

この意味することは、$[\alpha, \beta, \gamma]$-Langevin 方程式に対して、久保型の第一種揺動散逸定理 (6.11) が成り立つのは、遅れがない時に限ることである。しかし、$[\alpha, \beta, \gamma]$-Langevin 方程式に対しては、次の型の第一種揺動散逸定理が成り立つ。

定理 6.5　（一般化された第一種揺動散逸定理）

$$(6.12)\qquad \frac{1}{\beta - i\zeta - \hat{\gamma}(\zeta)} = 2\pi \frac{h(\zeta)}{\lim_{\epsilon \downarrow 0}\int_{\mathbb{R}} e^{-i\epsilon\lambda} h(\lambda)\,d\lambda} \qquad (\zeta \in \mathbb{C}^+)$$

ここで、$h = h_A$ は R_A のスペクトル密度 Δ_A の outer 関数で、$\zeta \in \mathbb{C}^+$ に対して、

$$(6.13)\qquad h(\zeta) = \exp\left(\frac{1}{2\pi i}\int_{\mathbb{R}} \frac{1+\lambda\zeta}{\lambda - \zeta}\,\frac{\log \Delta_A(\lambda)}{1+\lambda^2}\,d\lambda\right)$$

と定義される。

注意 6.3　(6.13) で定まる outer 関数は、$\mathbb{C}^+$ 上で零点のない正則関数で、

$$(6.14)\qquad \sup_{y>0}\int_{\mathbb{R}} |h(x+iy)|^2\,dx < \infty$$

をみたすので、極限値 $\lim_{y\downarrow 0} h(x+iy) \equiv h(x)$ が定まり、

$$(6.15)\qquad \Delta(\lambda) = |h(\lambda)|^2, \qquad \overline{h(\lambda)} = h(-\lambda)$$

が成り立つ。共分散函数 R_A, スペクトル密度 Δ_A, outer函数 h_A はかくの如く関係し対応している。

最後に、三つ組 $[\alpha, \beta, \gamma]$ を具体的に (6.1) の σ_A から求める公式を得ることができる。

<u>定理 6.6.</u> (<u>三つ組 $[\alpha, \beta, \gamma]$ の公式</u>)

(i) $$\alpha = \left(2\int_0^\infty \lambda^2 \sigma_A(d\lambda)\right)^{\frac{1}{2}}$$

(ii) $$\beta = \frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{R}} \left\{ \frac{\displaystyle\int_0^\infty \frac{\eta^3}{(\eta^2+\xi^2)^3}\sigma_A(d\eta)}{\displaystyle\int_0^\infty \frac{\eta}{\eta^2+\xi^2}\sigma_A(d\eta)} \right\} d\xi$$

(iii) $$\int_{-\infty}^0 e^{\lambda s}\gamma(s)\,ds = \beta + \lambda - \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{ -\frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}} \frac{\lambda}{\lambda^2+\xi^2} \log\left(\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{\eta}{\eta^2+\xi^2}\sigma_A(d\eta) \right) d\xi \right\}$$
$$(\lambda > 0)$$

§7 <u>久保の問題</u>

§3, §4 と §6 の結果を用いて、§2 に述べた久保の問題「定常マルコフ過程に対する揺動散逸定理を求めること」に答えることにする。$\mathcal{X} = (X_t, P_x;\ t \in [0,\infty),\ x \in \mathbb{R}^1)$ を一次元拡散過程で生成作用素 $\mathcal{G}$ が (2.1) で与えられるものとする。$a(x)$, $b(x)$ は連続函数とし、$a(x)$ は正値とする。m 測度 $m(dx)$ を (3.1) で定義し、$m(\mathbb{R})$ の有限性を仮定し、(3.3) をも仮定する。このとき、(3.2) の P_∞ をマルコフ過程の初期分布にとることによって、path space $W_{\mathbb{R}}$

$=\{w: \mathbb{R}\to\mathbb{R}\}$ 上に、(3.5) をみたす確率測度 P が唯ひとつ定まり、$\mathfrak{X}=(X_t, P: t\in\mathbb{R})$ （$X_t(w)=w(t)$ 座標写像）は定常マルコフ過程となる。このとき、§3の後半(7頁)、§4の後半(10頁)と §6の注意6.1 によって、初期状態 A は $f_0(X_0)=X_0$ （$f_0(x)=x$）であるから、次の条件

$$(7.1)\qquad f_0\in\mathcal{D}(\mathcal{G})$$

$$(7.2)\qquad P_t f_0 \longrightarrow 0 \quad (t\to\infty)$$

ここで P_t は マルコフ過程 $\mathfrak{X}$ の半群

が成り立てば、§6の結果がすべて成り立つ。これを $A_t = U_t(X_0)= X_t$ のことばでいいかえることによって、$[\alpha,\beta,\gamma]$-Langevin 方程式 (2.2) とそれに対する一般化された Einstein の関係式 (2.7) が、それぞれ、定理6.1と定理6.2より得られる。

今迄に課した条件をみたす a, b として、

$$(7.3)\begin{cases}
\text{(i)} & m(\mathbb{R})<\infty \quad (m \text{ は } (3.1) \text{ で定義された測度}) \\
\text{(ii)} & \displaystyle\int_{(-\infty,0)}\Big(\int_y^0 dm(x)\Big)e^{-B(y)}dy = \int_{(0,\infty)}\Big(\int_0^y dm(x)\Big)e^{-B(y)}dy = \infty \\
 & \Big(B(y) \text{ は } (3.4) \text{ で定義されている}: B(y)=\displaystyle\int_0^y \frac{b(x)}{a(x)}dx\Big) \\
\text{(iii)} & \displaystyle\int_{\mathbb{R}}(x^2+b(x)^2)\,m(dx)<\infty \\
\text{(iv)} & \displaystyle\int_{\mathbb{R}} x\, m(dx) = 0
\end{cases}$$

特に、

$$(7.4)\qquad b(x) = a'(x) - v^{-1} x\, a(x) \qquad (v>0)$$

のときは、(3.1)で定義される m 測度は、

$$(7.5)\qquad m(dx) = \frac{1}{a(0)} e^{-\frac{x^2}{2v}} dx$$

と Gauss 測度となり、(7.3)をみたすためには、

$$(7.6)\begin{cases} \text{(ii)} & \displaystyle\int_{(-\infty,0)} \frac{-x}{a(x)} dx = \int_{(0,\infty)} \frac{x}{a(x)} dx = \infty \\ \text{(iii)} & \displaystyle\int_{\mathbb{R}} (a(x)^2 + a'(x)^2) e^{-\frac{x^2}{2v}} dx < \infty \end{cases}$$

があれば充分である。

§8 T-正値性と $[\alpha,\beta,\gamma]$-Langevin 方程式

今迄、述べたことにより、§6の結果が基本であったが、これは、(6.1)の R_A を共分散函数にもつ実数値の正規定常過程 $\mathbb{X}_A$ を考え、$\mathbb{X}_A$ のみたす確率微分方程式、それに対する揺動散逸定理を示すことに帰着される。

$\mathbb{X} = (X_t;\ t\in\mathbb{R})$ を実数値の正規定常過程で、その共分散函数 R が、(6.1)と(6.2)の如く、次の様に表現されているとする.

$$(8.1)\qquad R(t) = \int_0^\infty e^{-|t|\lambda} \sigma(d\lambda)$$

$$(8.2)\qquad \sigma(\{0\}) = 0 \quad と \quad \int_0^\infty \lambda^2 \sigma(d\lambda) < \infty$$

このとき、X（あるいは R）のスペクトル密度 $\Delta(\xi)$ は

$$(8.3)\qquad \Delta(\xi)=\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{\lambda}{\lambda^2+\xi^2}\,\sigma(d\lambda)$$

で与えられる。Δ は Hardy weight i.e

$$(8.4)\qquad \frac{\log\Delta(\lambda)}{1+\lambda^2}\in L^1$$

をみたすので、(6.13) によって、Δ の outer 函数 $h(\xi)$ が定義できる。(6.14) をみたす h は H^{2+} の元であり、L^2 の意味で実軸への極限値が定まり、(6.15) が成り立つ。h の Fourier 変換を E とする：

$$(8.5)\qquad E(t)=\chi_{(0,\infty)}(t)\int_{\mathbb{R}} e^{-it\xi}h(\xi)d\xi \qquad (\in L^2)$$

さらに、Karhunen の標準表現定理によって、一次元のブラウン運動 $B=(B_t\,;\,t\in\mathbb{R})$ が唯ひとつ定まり、

$$(8.6)\qquad X_t=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^t E(t-s)\,dB_s$$

(8.7) 各 $t\in\mathbb{R}$ に対し、$X_s(s\le t)$ の $L^2(P)$ の中で生成する閉部分空間 $=$ $B_{s_1}-B_{s_2}\,(s_1,s_2\le t)$ の $L^2(P)$ の中で生成する閉部分空間

が成り立つ。

outer 函数 h の表現定理として、次の定理を示すことができ、これが基本的である。

<u>定理8-1</u>　三つ組 $[\alpha, \beta, \gamma]$ が存在して、

$$(8\text{-}8) \qquad h(z) = \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\beta - iz - \hat{\gamma}(z)} \qquad (z \in \mathbb{C}^+)$$

ここで、

$$\begin{cases} (8\text{-}9) & \alpha > 0, \ \beta > 0 \\ (8\text{-}10) & \gamma(t) = \chi_{(-\infty,0)}(t) \int_0^\infty e^{t\lambda} \mu(d\lambda), \quad \mu \text{ は } \mu(\{0\}) = 0 \text{ なる測度} \\ (8\text{-}11) & \beta \geq \int_{-\infty}^0 \gamma(t)\,dt \ \left(= \int_0^\infty \frac{1}{\lambda} \mu(d\lambda) \right) \end{cases}$$

さらに、かかる三つ組 $[\alpha, \beta, \gamma]$ は唯ひとつである。

定理8-1の逆 —— 構成定理 —— として、

<u>定理8-2</u>　三つ組 $[\alpha, \beta, \gamma]$ で $(8\text{-}9)$, $(8\text{-}10)$ と

$$(8\text{-}11)' \qquad \beta > \int_{-\infty}^0 \gamma(t)\,dt$$

をみたすものが与えられたとき、$(8\text{-}8)$ で定義される h はある有界な測度 σ（唯ひとつ）によって $(8\text{-}3)$ と表現されるスペクトル密度Δの outer 函数となり、Δ の Fourier 変換 R は $(8\text{-}1)$ と表現され、$(8\text{-}2)$ も成り立つ。

——————— ◇ ———————

$(8\text{-}8)$ を用いて、Xの標準表現 $(8\text{-}6)$ と $(8\text{-}7)$ にあらわれるブラウン運動 B を random force として、Xの時間発展を記述する確率微分方程式を次の形に導くことができる。

定理 8.3　　$s<t$ に対して、

$$(8.12)\quad \boxed{X_t - X_s = \int_s^t \left(-\beta X_\tau + \int_{-\infty}^{0} X_{\tau+u}\,\gamma(u)\,du\right) d\tau + \alpha\,(B_t - B_s)}$$

この方程式を [α, β, γ]－Langevin 方程式と名付ける。

これは、標語的には、

$$(8.13)\quad \boxed{X_t' = -\beta X_t + \int_{-\infty}^{0} X_{t+u}\,\gamma(u)\,du + \alpha\,B_t'}$$

とかけるが、森の方程式 (5.4) と比較すると、[α, β, γ]－Langevin 方程式の揺動項は $\alpha B_t'$ で、そのスペクトルはいわゆる white であり、森の方程式 (5.4) に対する揺動散逸定理 (5.9) は成り立たない。

〈0〉

[α, β, γ]－Langevin 方程式に対する一般化された Einstein の関係式 (6.9)（定理 6.1）は、(8.8) と (6.15) より、

$$\frac{\alpha^2}{2} \cdot \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}} |\beta - i\xi - \mathcal{J}(\xi)|^{-2} d\xi = \int_{\mathbb{R}} \Delta(\xi)\,d\xi = R(0)$$

これは (6.9) をいみする。

さらに、一般化された第一種揺動散逸定理 (6.12)（定理 6.5）は、やはり、(8.8) より、

$$\frac{1}{\beta - i\xi - \mathcal{J}(\xi)} = 2\pi \frac{h(\xi)}{\sqrt{2\pi}\,\alpha}$$

であるから、次のことを示すのがかぎとなる：

(8.14) $$\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\int_{\mathbb{R}} e^{-i\varepsilon\lambda} h(\lambda)\,d\lambda = \sqrt{2\pi}\cdot\alpha$$

これは、(8.5) によって、

(8.15) $$\lim_{\varepsilon\downarrow 0} E(\varepsilon) = \sqrt{2\pi}\,\alpha$$

を示すことに他ならない。(8.12)の両辺に $B_t - B_s$ をかけて平均すると、標準表現(8.6)に注意して、($0<s<t$)

$$\int_s^t E(u)\,du = \int_s^t \Big(-\beta\int_s^u E(v)\,dv + \int_{(-\infty,0)}\Big(\int_s^u E(z+v)\,dv\Big)\gamma(z)\,dz\Big)\cdot du + \sqrt{2\pi}\,\alpha(t-s)$$

tについて微分して($s=0$として)

$$E(t) = -\beta\int_0^t E(v)\,dv + \int_{(-\infty,0)}\Big(\int_0^t E(z+v)\,dv\Big)\gamma(z)\,dz + \sqrt{2\pi}\,\alpha$$

従って、$t\downarrow 0$ として(8.15)が得られる。

最後に、久保の問題へ答える際の重要な公式：定理6.6の(i)を示しておく。ここにおいて、標準表現の大事な(8.7)が使われる。(8.12)($0=s<t$ として)の両辺へ X_0 をかけて平均すれば、(8.6)と(8.7)より、$\forall t>0$

$$R(t) = R(0) + \int_0^t \Big(-\beta R(s) + \int_{(-\infty,0)} R(s+u)\gamma(u)\,du\Big)ds$$

tについて微分して、

$$R'(t) = -\beta R(t) + \int_{(-\infty,0)} R(t+u)\gamma(u)\,du$$

となる。$t\downarrow 0$ として、

(8.16) $$R'(0+) = -\beta R(0) + \int_{(-\infty,0)} R(u)\gamma(u)\,du.$$

一方、伊藤の公式を $[\alpha,\beta,\gamma]$-Langevin equation (8.12) に適用して((8.8)より適用可能)、$\forall t>0$

$$X_t^2 - X_0^2 = \int_0^t \Big(-2\beta X_s^2 + 2X_s \int_{(-\infty,0)} X_{s+u}\,\gamma(u)\,du + \alpha^2\Big)\,ds + 2\alpha \int_0^t X_s\,dB_s$$

Xの定常性に注意して、上式を平均すると、

$$\int_0^t \Big(-2\beta R(0) + 2\int_{(-\infty,0)} R(u)\,\gamma(u)\,du + \alpha^2\Big)\,ds = 0$$

従って、tに関して微分して(のもで於って)

$$\alpha^2 = -2\beta R(0) + 2\int_{(-\infty,0)} R(u)\,\gamma(u)\,du$$

これと(8.16)を合わせて、定理6.6 (1)を得ることができる。

§9 Fokker-Planck 方程式と一般化されたEinsteinの関係式

$[\alpha,\beta,\gamma]$-Langevin 方程式(8.12)の定常解X(唯一つ)のFokker-Planck equationを求めておく。次のことは容易に計算できる。

$$(9.1)\qquad P(X_t \in dy \mid X_s = x) = p(t-s, x, y)\,dy \qquad (s<t)$$

$$(9.2)\qquad \underset{t>0}{p(t,x,y)} = g\Big(R(0) - \frac{R(t)^2}{R(0)},\; y - \frac{R(t)}{R(0)}x\Big)$$

ここで、$g(t,y)$は標準正規分布である

$$(9.3)\qquad g(t,y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}}\, e^{-\frac{y^2}{2t}}$$

従って、backward equationは

$$(9.4)\qquad \boxed{\frac{\partial p(t,x,y)}{\partial t} = a(t)\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - b(t)\,x\,\frac{\partial p}{\partial x}}$$

ここで、

$$(9.5)\qquad a(t) = -\frac{R(0)R'(t)}{R(t)}$$

$$(9.6)\qquad b(t) = -\frac{R'(t)}{R(t)}$$

従って、(9.5)と(9.6)より、

$$(9.7)\qquad \boxed{a(t) = R(0)\, b(t) \quad (\forall t>0)}$$

一方、(9.2)より、 $R(t)\to 0 \quad (t\uparrow\infty)$ に注意して(∵ (8.1)と(8.2))

$$(9.8)\qquad \boxed{p(t,x,y) \xrightarrow[t\uparrow\infty]{} g(R(0),y)}$$

この(9.7)と(9.8)は、Fokker-Planck eq (9.4)に対する一般化された Einstein の関係式ということができる。さらに面白いことに、(9.7)の $t\downarrow 0$ の極限が、$[\alpha,\beta,\delta]$-Langevin 方程式(8.12)に対する一般化された Einstein の関係式(6.9)になっていること、即ち

$$(9.9)\quad \begin{cases} \lim\limits_{t\downarrow 0} a(t) = \dfrac{\alpha^2}{2} \\ \lim\limits_{t\downarrow 0} b(t) = C_{\beta,\delta} \end{cases}$$

が成り立つことがわかる。 これは、物理的には何を意味するのであろうか。

§10 T-正値性とRL回路網

(6.10)で定義された一般化された抵抗 $C_{\beta,\delta}$ の意味

を調べるために、(6.2)(or (8.21)) の σ の台が有限の N 個のときを考える。このとき、定理 8.1 で定まる三つ組 $[\alpha, \beta, \gamma]$ のクラスは、

$$
(10.1)\quad \begin{cases} \alpha > 0, \quad \gamma(t) = \chi_{(-\infty,0)}(t) \displaystyle\sum_{n=1}^{N-1} \mu_n e^{q_n t} \\ \qquad\qquad (\mu_n > 0, \quad 0 < q_1 < q_2 < \cdots < q_{N-1}) \\ \beta > \displaystyle\sum_{n=1}^{N-1} \frac{\mu_n}{q_n} \end{cases}
$$

で与えられる。

$\mathbb{C}$ 内の右半平面において正則な関数 $Z(\zeta)$ を

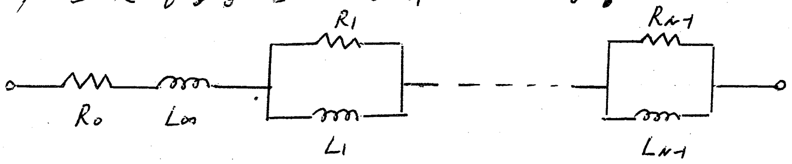
$$
(10.2)\qquad Z(\zeta) = \left\{ \frac{\sqrt{2\pi}}{\alpha} h(i\zeta) \right\}^{-1} \qquad (\mathrm{Re}\,\zeta > 0)
$$

で定義するとき、(8.8) と (10.1) より、

$$
(10.3)\qquad Z(\zeta) = R_0 + \zeta + \sum_{n=1}^{N-1} \frac{\mu_n \zeta}{q_n(q_n + \zeta)}
$$

$$
(10.4)\qquad R_0 = \beta - \sum_{n=1}^{N-1} \frac{\mu_n}{q_n}
$$

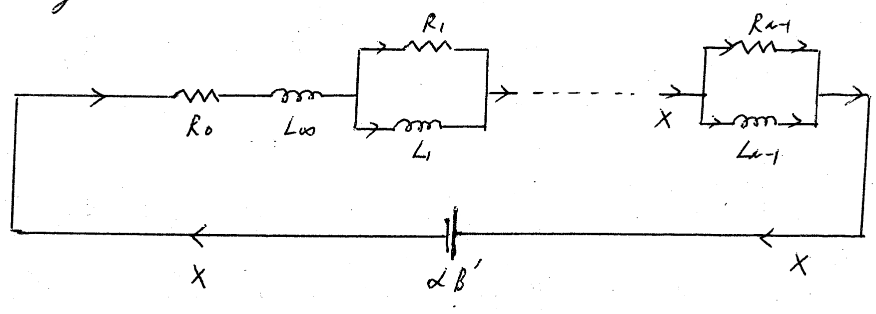
が成り立つ。このことは、$Z(\zeta)$ が次の RL 回路網のインピーダンスであることを示している：



$$
L_\infty = 1, \quad L_n = \frac{\mu_n}{q_n^2}, \quad R_n = \frac{\mu_n}{q_n} \quad (1 \le n \le N-1)
$$

さらに、上の回路網の抵抗の両端へ熱雑音が発生し、回路網全体にゆらぎ電圧の起電力として、$\alpha \dot{B}$ なる white noise が発生したと考えるとき、この回路に

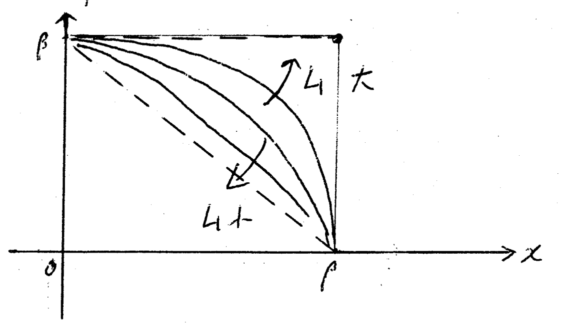
流れる電流Xは、Kirchhoffの電圧則を適用して求めることができるが、実は、このとき成り立つ方程式は、[α, β, γ]-Langevin方程式(8.12)に他ならないことがわかる。



このとき、$C_{\beta,\gamma}$の挙動を上の熱雑音の発生した回路網を通して調べてみる。一般性を失うことなく、$N=2$とする。$R_0+R_1=\beta$は一定とし、R_1を0とβの間を動く変数xとみ、L_1は正数全体を動くパラメータとみるとき、$C_{\beta,\gamma}$をxの関数としてあらわすと、(6.10)と(10.1)より、

$$(10.5)\qquad C_{\beta,\gamma} = \beta - \frac{x^2}{x^2+L_1(\beta-x)} \qquad (0<x<\beta)$$

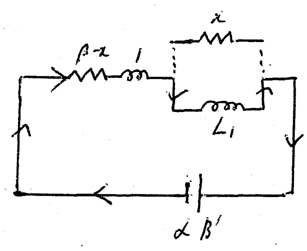
となる。従って、$C_{\beta,\gamma}$のグラフは、



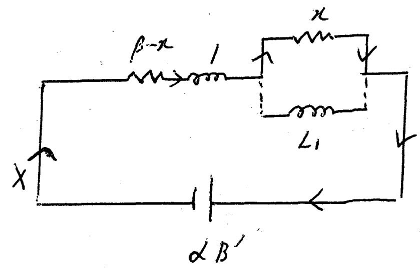
となり、固定したL_1に対しては、曲線となり、極端な場合として、

$$
(10.6)\quad
\begin{cases}
\lim\limits_{L_1\to 0} C_{\beta,\gamma} = \beta - x & (0<x<\beta) \\
\lim\limits_{L_1\to \infty} C_{\beta,\gamma} = \beta & (0<x<\beta)
\end{cases}
$$

が成り立つ。$C_{\beta,\gamma}$ のグラフは、前図の上三角に閉じ込められていることは、一般的な定理6.3の(i)による。この(10-6)は、次の図の様に考えれば、$L_1\to 0$ や $L_1\to\infty$ なる場合は、一般化された抵抗 $C_{\beta,\gamma}$ は、通常の抵抗に近づき、一般化されたEinsteinの関係式(6.9)は、Nyquistの関係式に近づくことが納得される。



$L_1\to 0$



$L_1\to \infty$

§11 おわりに

ここでのべた揺動散逸定理は、T-正値性に関したものであったが、$[\alpha,\beta,\gamma]$-Langevin方程式は、(8-9),(8-10),(8-11)をみたす三つ組 $[\alpha,\beta,\gamma]$ に限ってT-正値性をもつが、この条件がくずれる場合もありえて、とくに、多重マルコフ性をもつもので可微分でない確率過程に対して、その定常状態を記述する方程式として、$[\alpha,\beta,\gamma]$-Langevin方程式がえる

れる。このことは、森氏の連分数展開の理論と関係があり、有限回で森氏の手続きが先へ進めなくなるとき、その最後の揺動力のみたす方程式が、我々の[α,β,γ]-Langevin方程式である。

予測の問題においても、[α,β,γ]-Langevin方程式は重要な働きをし、予測の誤差を表現する核関数が、三つ組[α,β,γ]に関連して定まる非線形(2.12)の(Riccati typeの)微分積分方程式をみたすことがわかる。この方程式の解の一意性を調べる必要があるが、予測の誤差を評価するアルゴリズムが得られることになる。

有限次元への拡張は、多端子対回路網、多次元拡散過程に対するOnsagerの相反定理と関連して大事と思われ、現在研究中である。

無限次元への拡張は 有限次元のときと同じく、その枠組は、§4で与えられているが、三つ組[α,β,γ]が、ある関数空間上の非線型汎関数となり、その公式は定理6.6で与えられるが、[α,β,γ]-Langevin方程式を導入して、如何なる構造を調べることができるかは、今後の課題である。

参考文献

[1] R. Kubo, Statistical mechanical theory of irreversible processes I, general theory and simple applications to magnetic and conduction problems.
J. Phys. Soc. Japan 12 (1957), 507–586

[2] H. Mori, Transport, collective motion and Brownian motion, Progr. Theor. Phys. 33 (1965), 423–455

[3] R. Kubo, The fluctuation-dissipation theorem.
Reports on Progress in Physics. 29 (1966), 255–284

[4] 戸田盛和・久保亮五 編, 統計物理学
（岩波 現代物理学の基礎）5 (1972)

[5] Y. Okabe, On a stochastic differential equation for a stationary Gaussian process with T-positivity and the fluctuation-dissipation theorem,
to appear in J. Fac. Sci. Univ. of Tokyo, Sec IA 28 (1981)

[6] Y. Okabe, On a T-positivity, [α, β, γ]-Langevin equation and Fluctuation-Dissipation Theorem,
to appear in The Third Vilnius Conference on Probability Theory and Mathematical Statistics, 1981.