

確率過程における変数の縮約

九大 理学部 森 肇

多くの体系の状態変数ベクトル $A(t) = \{A_i(t)\}$ の時間変化は確率運動方程式

$$dA_i(t)/dt = V_i(A(t), t) + S_i(A(t), t) \quad (1)$$

によって記述できる。ただしここで $V_i(a, t)$ は $A(t)$ の値 $a = \{a_i\}$ および t の一義的関数であり、 $S_i(a, t)$ は確率過程である。 $S_i(a, t)$ の型として通常

$$S_i(a, t) = g_{ij}(a) Y_j^B(t), \quad (2)$$

$$Y_j^B(t) : \text{Gaussian white noise}, \quad (3)$$

$$\langle Y_j^B(t) Y_m^B(t') \rangle = 2 L_{jm}^{BB} \delta(t-t') \quad (4)$$

が仮定される。ただしここで L_{jm}^{BB} は対称行列である。

問題は、現在トピックスになりつつある、熱平衡から遠く隔った非平衡開放系では、仮定 (2) が成立しない場合が

るのと同じである。つまり, (2)では

$$\langle S_i(a, t) S_l(a', t') \rangle = 2 \eta_{il}(a, a') \delta(t-t'), \quad (5)$$

$$\eta_{il}(a, a') \equiv g_{ij}(a) L_{jm}^{BB} g_{lm}(a'), \quad (6)$$

$$= \eta_{li}(a', a) \quad (7)$$

となるが, 非平衡開放系では

$$\langle S_i(a, t) S_l(a', t') \rangle \quad (8)$$

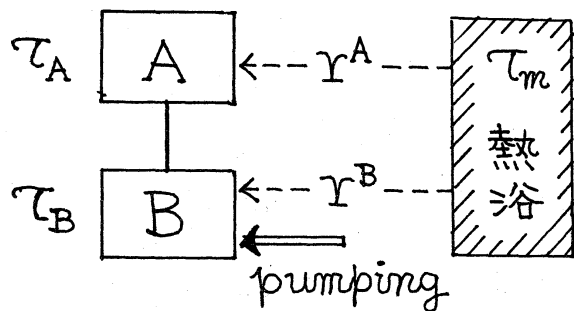
$$= 2 [\xi_{il}(a, a') \delta_+(t-t') + \xi_{li}(a', a) \delta_+(t'-t)],$$

$$\xi_{il}(a, a') \neq \xi_{li}(a', a), \quad (9)$$

$$\delta_+(t) \equiv \delta(t) \text{ の右半分} \quad (10)$$

となる場合がある。非対称 (9) が核心であり, このような非対称が何故現われるかについて述べたい。

互に相互作用する2つの
体系A, Bが, 熱浴から
ウズ型 white noise
 $\gamma^A(t), \gamma^B(t)$ をうけ,
右図のように, 体系Bは



$$\tau_A \gg \tau_B \gg \tau_m$$

外部からの pumping により熱平衡から逸かにずれた非平衡開放系であるとしよう。このような多くの系がモデル

$$dA_i(t)/dt = v_i(A) - \alpha_{ij}(A) B_j + \Upsilon_i^A(t), \quad (11)$$

$$dB_j(t)/dt = \beta_j(A) - \gamma_{jk}(A) B_k + \Upsilon_j^B(t) \quad (12)$$

で記述できることが知られている。ここで係数 $v_i, \alpha_{ij}, \beta_j, \gamma_{jk}$ は $A(t)$ の関数である。問題は (12) を積分して $B_j(t)$ を $A(t)$ および $\Upsilon^B(t)$ の関数として表わし, (11) に入れることによつて, (1) の型の式を作れるか, またそのとき確率過程 $S_i(a, t)$ としてどの様なものが得られるかというところである。このような変数の縮約は, 一般には複雑であるが, 変数 A, B の時間変化の時間スケール τ_A, τ_B が $\tau_A \gg \tau_B$ のときには, $\delta \equiv \tau_B / \tau_A$ の 2次までの近似では, 比較的簡単である。適当な時間のスケールをとって

$$v_i, \alpha_{ij}, \Upsilon_i^A \sim O(\delta), \quad (13)$$

$\beta_j, \gamma_{jk}, \Upsilon_j^B \sim O(1)$ としよう。そのとき

$$\begin{aligned} V_i(a, t) = & v_i(a) - \alpha_{ij}(a) [\gamma^{-1}(a)]_{jk} \\ & \times [\beta_k(a) - \{v_l(a) - \alpha_{lm}(a) [\gamma^{-1}(a)]_{mn} \beta_n(a)\} \left\{ \frac{\partial}{\partial a_l} [\gamma^{-1}(a)]_{kp} \beta_p(a) \right\}] \\ & - \alpha_{ij}(a) [\gamma^{-1}(a)]_{jk} \alpha_{lm}(a) \left[\frac{\partial}{\partial a_l} \tilde{\chi}_{km}(a, a') \right]_{a'=a}, \quad (14) \end{aligned}$$

$$S_i(a, t) = \Gamma_i^A(t) - \alpha_{ij}(a) \int_0^\infty d\tau [e^{-\tau\gamma(a)}]_{jk} \Gamma_k^B(t-\tau) \quad (15)$$

となる。ただしここで、 γ^{-1} は γ の逆行列であり、また

$$\tilde{\chi}_{km}(a, a') \equiv 2 \int_0^\infty ds [e^{-s\gamma(a)}]_{ki} L_{ij}^{BB} [e^{-s\gamma(a')}]_{mj}$$

とした。このように、(11), (12) は変数 $B(t)$ を消去することにより、(1) 式に縮約できる。しかし確率力 $S_i(a, t)$ は、(2) の型とはならず、(15) の才 2 項のように、記憶型となる。つまり、時刻 t の確率力 $S_i(a, t)$ には、 t と $t - \tau_B$ との間、過去の時刻の Γ_k^B の値が効いてくる。この記憶効果のために、 $\delta \rightarrow 0$ の極限でも (8) の 非対称性 が現われることとなる。事実、(15) の時間相関をとり、 $t > t'$ のとき

$$\exp[-(t-t')\gamma(a)] = 2\gamma^{-1}(a) \delta_+(t-t')$$

とおけば、(8) が得られ、その係数は

$$\begin{aligned} \xi_{il}(a, a') &= L_{il}^{AA} - 2\alpha_{ij}(a) [\gamma^{-1}(a)]_{jk} L_{kl}^{BA} \\ &\quad + \alpha_{ij}(a) [\gamma^{-1}(a)]_{jk} \tilde{\chi}_{km}(a, a') \alpha_{lm}(a') \end{aligned}$$

と求まる。ただしここには、(4) を一般化して

$$\langle \Gamma_i^\alpha(t) \Gamma_j^\beta(t') \rangle = 2 L_{ij}^{\alpha\beta} \delta(t-t')$$

とした。Onsager の相反定理により $L_{il}^{\alpha\beta} = L_{li}^{\beta\alpha}$ であるが、しかし、 $\xi_{il}(a, a')$ は (9) のように一般に非対称である。

このような非対称性は今まで知られていなかったが、V-ザーなど非平衡開放系で重要となることがわかってきた。確率微分方程式の数学的理論は (2) の型の確率力に対しては完成してあるように思われる。それはそのまま (15) のしは (8) の型の確率力に対しても拡張できるのであろうか？

(8) から Fokker-Planck の式を導くのは容易である。

(15) もガウス過程であるからである。結果は

$$H_i(a, t) = V_i(a, t) + [\partial \xi_{ij}(b, a) / \partial b_j]_{b=a},$$

$$E_{ij}(a) = \xi_{ij}(a, a)$$

をそれぞれ drift 係数, 拡散係数とする Fokker-Planck 方程式である。対応する Langevin 方程式は

$$dA_i(t)/dt = H_i(A(t), t) + R_i(t)$$

$\langle R_i(t) R_j(0); a_0 \rangle = 2 E_{ij}(a_0) \delta_+(t)$, $t \geq 0$ で与えられる。詳細は T. Morita, H. Mori & K.T. Masuyama Prog. Theor. Phys. (to be published) を参照されたい。