

確率過程を用いた物理現象モデリングの基礎

金澤輝代士

Contents

1	拡散現象概論	3
1.1	粒子の拡散現象：拡散方程式	3
1.2	拡散現象とブラウン運動	4
1.2.1	分子の揺らぎ	4
1.2.2	市場での拡散現象	6
1.3	このノートの目的：ブラウン運動の数理・そのミクロからのモデリング	7
1.4	数学の準備～このノートで使うテクニック～	7
1.4.1	Taylor 展開	7
1.4.2	部分積分	7
1.4.3	δ 関数	8
1.4.4	確率変数・期待値の記号	9
1.4.5	確率分布の変換則（ヤコビアン関係式）	9
1.4.6	積分恒等式	9
1.5	練習問題	10
1.5.1	拡散方程式の解	10
1.5.2	確率分布の変数変換	11
2	マルコフ過程の数理	12
2.1	マスター方程式	12
2.2	決定論的常微分方程式（ジャンプなし）	12
2.3	決定論的常微分方程式（ジャンプあり）	13
2.4	ポアソンノイズ	14
2.4.1	対称ポアソンノイズ	16
2.4.2	複合ポアソンノイズ	17
2.5	ガウスノイズ	18
2.6	ホワイトノイズ	19
2.7	一般のマスター方程式	20
2.8	クラマース・モヤル展開	20
2.9	練習問題	21
2.9.1	対称ポアソンノイズのマスター方程式	21
2.9.2	複合ポアソンノイズのマスター方程式	21
2.9.3	拡散過程の時間発展	21
2.9.4	オルンシュタイン・ウーレンベック過程の定常分布	21
3	確率積分の定義	23
3.1	乗法的ノイズへの入門	23
3.2	伊藤型確率微分方程式	24

3.3	ポアソンノイズに対する微分ルール	25
3.4	ガウスノイズに対する微分ルール	26
3.4.1	ガウスノイズの特別な性質 (伊藤ルール)	26
3.4.2	伊藤の公式	27
3.4.3	フォッカー・プランク方程式	28
3.5	練習問題	28
3.5.1	伊藤の公式の一般化	28
3.5.2	ブラック・ショールズ方程式	29
4	確率現象のモデリング：分子運動論の数理	30
4.1	動機	30
4.2	あらすじ	31
4.3	トイモデルの擬リウビル方程式	31
4.4	多体剛体球系の擬 Liouville 方程式	33
4.4.1	設定	33
4.4.2	剛体球ポテンシャルと衝突ルール	34
4.4.3	擬 Liouville 方程式	35
4.5	BBGKY 階層構造と Boltzmann 方程式	37
4.5.1	BBGKY 階層構造	37
4.5.2	Boltzmann 方程式	39
4.5.3	Boltzmann-Lorentz 方程式	40
4.6	具体例で遊ぶ	40
4.6.1	例 1：Rayleigh ピストン	40
4.6.2	例 2：Brownian ラチェット	41
4.6.3	例 3：粉体ローター	42
4.7	ランジュバン方程式はどう出てくるか？	43
4.8	進んだ注記	43
5	ランジュバン方程式とその導出	45
5.1	ランジュバン方程式	45
5.1.1	フォッカー・プランク方程式	46
5.1.2	ランジュバン方程式の良いところ	46
5.2	ランジュバンの漸近的導出	46
5.2.1	システムサイズ展開のアイデア	47
5.2.2	システムサイズ展開	48
5.2.3	具体例：レイリーピストンでのランジュバン	50
5.2.4	システムサイズ展開の摂動補正	51
5.2.5	揺動散逸関係との関わり	52
5.3	非線形ランジュバン方程式（乗法的ノイズ）の導出	53
5.3.1	乗法的ノイズ（摩擦がないとき）	53
5.3.2	より一般の場合	54
5.3.3	解析的性質	54
5.4	非ガウスランジュバン方程式の導出	54

Chapter 1

拡散現象概論

ここでは、拡散現象を理解するための概論を行い、簡単な導入を行う。拡散現象とは、文字通り、物質や物理量が散らばっていき、元に戻らない現象を指す。以下、粒子の拡散現象である**ブラウン運動**について説明していく。

1.1 粒子の拡散現象：拡散方程式

図のように、例えば多数の非常に軽い粒子を水に浮かべてみよう。粒子はだんだん拡散し、もとの場所には戻らないはずである (図 1.1(a))。このように、拡散は典型的な**不可逆現象**である。

この様な現象をモデル化する基礎方程式は拡散方程式と呼ぶ。ここでは拡散方程式を直観的な手法で導出しよう：今、簡単のために1次元系を考え、粒子の空間あたりの密度 (濃度) を $P(x, t)$ と書く。粒子数を N と書くと、今は

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx P(x, t) = N \quad (1.1)$$

で規格化されている。粒子数は保存するため、確率流についての**連続の式**を立てる。今、区間 $[x, x + \Delta x]$ を考え、この内部の粒子数の増減を考える。今、位置 x において粒子が流出する量を $J(x, t)$ と書く¹。この時の粒子数の保存則は

$$\frac{d}{dt} \int_x^{x+\Delta x} dy P(y, t) = -J(x + \Delta x, t) + J(x, t) \quad (1.2)$$

でかける (図 1.1(b))。今、 $\Delta x \rightarrow 0$ を取ると

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x, t)}{\partial x} \quad (1.3)$$

が得られる。この式を連続の式という。

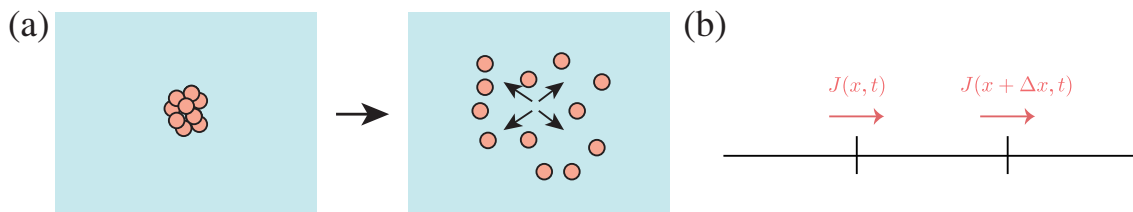


Figure 1.1: (a) 多数の粒子が拡散する。 (b) 連続の式のイメージ。

¹ $J > 0$ は、粒子が正の方向に移動することを表す。

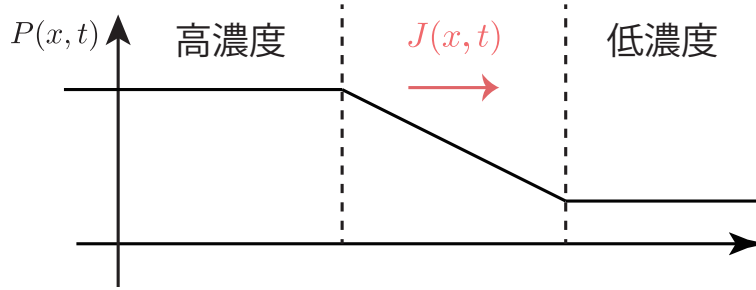


Figure 1.2: フィックの法則. 経験的に、拡散は高濃度から低濃度方向に粒子は流ることが知られている. これを踏まえると、 $J(x, t) \propto -\partial P(x, t)/\partial x$ となることが見込まれ、また実験的にもこの式が正しいことが知られている.

ここで更に、経験的に知られている**フィックの法則**を援用する. フィックの法則とは、拡散によって生じる粒子の流出量は、濃度の勾配に比例するという経験則である (図 1.2):

$$J(x, t) = -D \frac{\partial P(x, t)}{\partial x}, \quad (1.4)$$

但しその係数 D を**拡散係数**という. この式は、濃度が濃い方から薄い方に粒子が流出していることを意味している.

結果、次の拡散方程式を得る:

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}. \quad (1.5)$$

例えば、粒子の初期分布を位置 $x(0) = x_0$ に固定する場合を考えよう:

$$P(x, 0) = N\delta(x - x_0). \quad (1.6)$$

この方程式の解はガウス分布 (正規分布) であり、次の形になる:

$$P(x, t) = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{4Dt}\right). \quad (1.7)$$

1.2 拡散現象とブラウン運動

この拡散現象はモデリングにおいて非常に重要だと思われている. なぜなら、世の中の多数の確率的な現象を理解する上で典型的だからだ. ここでは例として、分子の揺らぎ²と市場での拡散現象を取り上げる.

1.2.1 分子の揺らぎ

今までは多粒子の拡散を説明してきたが、次に、「1 粒子だけの確率的な拡散」に注目する. 例えば、分子の揺らぎに起因する「ブラウン運動」を考える [1]. ブラウン運動は次のような設定で現れる: まず、水の上に μm 程度の大きさのビーズを浮かべ、その動きを観測してみよう (図 1.3(b)). この時、ビーズは不規則な動きを見せることが知られている. この不規則な動きの正体とは、水分子の熱運動

²ここでいう「揺らぎ」というのはラジオの雑音のような動的な乱数列を指す. この表現は英語の “fluctuation” の和訳だと筆者は理解しており、物理分野でよく使われる表現である. 例えば今回扱っている分子運動は熱運動とよばれ、熱運動に起因する動的なノイズを「熱揺らぎ」= “thermal fluctuation” と呼ぶことが多い.

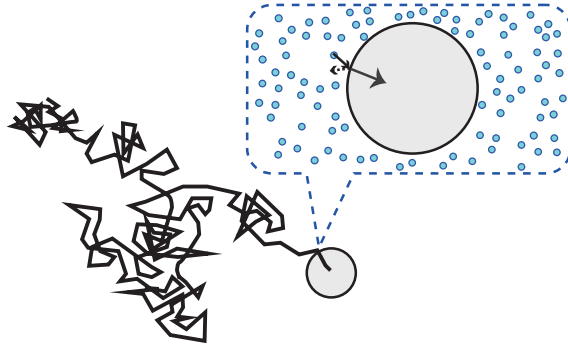


Figure 1.3: ブラウン粒子（1粒子）が拡散する。

にある³。有限温度の水分子が不規則に振る舞い、ビーズに衝突を繰り返した結果、ビーズに不規則な動きが生じているのである。

この「ブラウン運動」という現象は、歴史的に極めて重要な現象であった。何故なら、分子・原子の存在を実証する現象として着目されたからだ。20世紀の初めでは、分子・原子の存在というのは定説にはなっていなかった。原子・分子という概念自体は、歴史的には紀元前400年ごろから存在していたが、あまり評価されてはいなかった⁴。また、19世紀初頭にも化学者のドルトンが化学反応の観点から現代的な原子説を唱えたが、科学者コミュニティでは信じられていなかった。19世紀の後半に入って、ボルツマンが気体を原子・分子の運動論を提唱し、気体に関する性質が大幅に説明されたが、それでも原子・分子論に対する反論⁵は根強かった。この原子・分子論の議論に決着を付けたのが、20世紀初頭の「ブラウン運動の観察」である。分子運動論の立場に立てば、ブラウン粒子の動きとは水分子の衝突に起因しており、ブラウン運動を観察することで分子の衝突の影響を直接的に観察することが出来る。アインシュタインは1905年にこの立場から、アボガドロ定数 N_A （1molあたりの原子・分子の数）の見積もり方法を多数考案した [2]。1906年にペロンが実験を行っており、その結果どの推定方法でも同程度の大きさのアボガドロ定数が推定された。この時、原子論・分子論が単なる仮説から、確証たる定説に変わった⁶。

このブラウン運動を記述する式は次のランジュバン方程式 [3] である。粒子の位置を x と書いて、

$$\gamma \frac{dx}{dt} = \sqrt{\frac{2\gamma RT}{N_A}} \xi^G. \quad (1.8)$$

但し、 γ は摩擦係数、 R は気体定数、 T は水の温度、 ξ^G は白色ガウスノイズである。この白色ガウスノイズについては後の章で説明していく。また、このノートの最後にランジュバン方程式の導出を行う。

ここでアボガドロ定数 N_A がランジュバン方程式に顔を出していることに着目しよう。この理論式から、ブラウン運動を観察すれば次の様にアボガドロ定数を推定できることがわかる。まず、粒子が半径 a の球形だと仮定すると、流体力学から摩擦係数は次の式で与えられる：

$$\gamma \simeq 6\pi a \eta. \quad (1.9)$$

但し η は水の粘性係数であり、測定可能量である。更に、このモデルを数学的に計算すると拡散係数

³水分子の大きさは nm 程度の大きさであり、1000 倍程度の大きさの差がある。実験的には μm 程度の大きさが向いている様である。もしビーズの大きさが mm 程度になると、 10^6 倍の大きさの差があるので、ブラウン運動の観測に非常に時間がかかり、観測しにくくなる。

⁴この段階では根拠のない「小説」にすぎず、科学的な意味では評価しようがない。

⁵例えば実証主義者のマッハ・オストヴァルトは強く反論していた。

⁶ペロンはこの業績で1926年にノーベル賞をもらっている。

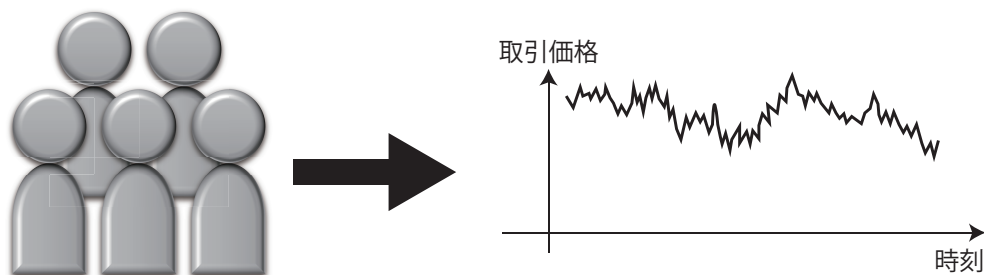


Figure 1.4: 株価市場・外国為替市場における価格の動き。

が次の式であることがわかる：

$$D = \frac{RT}{\gamma N_A}. \quad (1.10)$$

この拡散係数は実験的に測定が可能な量である。これらからアボガドロ数が

$$N_A = \frac{RT}{6\pi a\eta D} \quad (1.11)$$

で見積もられ、可観測量だけを使ってアボガドロ数を推定することができる。この様な推定法を人類は多数考案し、全て値が一致した。この様にして人類は、原子をブラウン運動の軌跡から「見た」のである⁷。

ブラウン運動についても拡散方程式が成り立つことが示せる。つまり、粒子数が1つ ($N = 1$) であることを考えて、粒子が x に存在する確率密度関数を $P(x, t)$ として、

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x, t) = 1 \quad (1.12)$$

が成り立つ。

1.2.2 市場での拡散現象

ブラウン運動は物理学における概念だが、類似する概念が社会現象でも存在している。その有名な例が株式市場や外国為替市場などにおける、価格の動きである (図 1.4)。今、価格を $p(t)$ と書く。更に、価格の \log を取った対数価格 $x(t) \equiv \log p(t)$ を定義する。 \log を取ったのは、価格 $p(t)$ が $[0, \infty)$ の値を取るのに対して、対数価格 $x(t)$ は $(-\infty, \infty)$ の値を取れるので、数学的に性質が良いからだ。この時、対数価格がある程度はブラウン運動で近似できることが知られている：

$$\frac{dx}{dt} = a(t) + \sigma \xi^G. \quad (1.13)$$

これが**ブラック・ショールズモデル** [4] であり、 $a(t)$ はトレンドを表すためのドリフト項である⁸。金融工学では、このブラック・ショールズモデルをもとに金融派生商品の価格決定を行っている。

⁷ちなみに数学の立場の「ブラウン運動」と、物理の立場の「ブラウン運動」とは大分立ち位置が違う。数学的には完全にランダムなもの (≡何も情報を取り出せないもの) の代表としてブラウン運動が取り上げられるが、物理の立場からは「ミクロな構造を逆推定するための材料」としてブラウン運動が取り上げられている。

⁸正確にはこの方程式を $x(t)$ に直した式であり、更にドリフト項の定義を普通と多少異なるように取っている。筆者は金融工学の専門家ではないので、これ以上の詳細については説明を簡約化するために省略する。

1.3 このノートの目的：ブラウン運動の数理・そのミクロからのモデリング

ここまでの話は拡散現象・ブラウン運動を理解するいい加減だが直観的な理解である。今後、上記の現象を理解する上でより体系的で数理的な枠組み（表現する言語）として、確率過程の数理を説明していく。目標としては、次の3つがある：

- 確率解析：ブラウン運動周りの数理（計算の枠組み）を理解する
- 分子運動論：力学を出発点に色々な設定の確率モデルを出して遊んでみる
- システムサイズ展開：ランジュバン方程式はどういう意味で妥当なのかを、数理的に検討してみる

特にこれらを使って、自由に確率モデルをデザインして、確率過程で遊べるようになることを目標とする。

1.4 数学の準備～このノートで使うテクニック～

1.4.1 Taylor 展開

ここで Taylor 展開の復習を行う。このノートでは数学的な厳密性は度外視して、任意の関数は十分滑らかな都合のいい関数だと仮定する。数学的には好きな時に C^∞ 級よりもきつい意味での滑らかさを仮定する⁹。この時、滑らかな関数 $f(x)$ は x_0 の周りで次の様に展開できる。

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x-x_0)^n}{n!} f^{(n)}(x_0). \quad (1.14)$$

例えば、

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}, \quad \sin x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n+1} \quad (1.15)$$

などがある。この手の展開を多用するので、この展開は必ず自由に使えるようになっていること。

1.4.2 部分積分

任意の性質のよい関数 $f(x)$, $g(x)$ に対して、

$$\int_a^b dx f'(x)g(x) = [f(x)g(x)]_a^b - \int_a^b dx f(x)g'(x) \quad (1.16)$$

が成り立つ。特に確率論では $f(x)$ か $g(x)$ に確率分布 $P(x)$ を良くとるので、

$$\lim_{x \rightarrow \infty} P(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\partial P(x)}{\partial x} = 0 \quad (1.17)$$

が多くの場合成り立つ。これは次の様に証明できる： $P(x)$ は確率分布なので、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx P(x) = 1, \quad P(x) \geq 0. \quad (1.18)$$

⁹実用的な問題の多くではこの仮定を置いて計算しても、結果的に問題が生じることはあまりない。但し、この仮定を置いて計算して間違ってしまう実用的な例に筆者は出会ったことがあるので、信頼しすぎるのは良くない。

もし $\lim_{x \rightarrow \infty} P(x) = c > 0$ ならば,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx P(x) = \infty. \quad (1.19)$$

更に, もし $\lim_{x \rightarrow \infty} \partial P(x)/\partial x = c \neq 0$ ならば, $\lim_{x \rightarrow \infty} P(x) = 0$ が充たされない。即ち, 関係式 (1.17) が証明された。

この性質を使うと, $f(x), g(x)$ に $P(x)$ が関わる量が入っていると

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f'(x)g(x) = - \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)g'(x) \quad (1.20)$$

という式変形が出来る。この式変形は多用されるため, 断りなくこの式変形を使用することがある。

1.4.3 δ 関数

ここで δ 関数の簡単な復習を行う。 δ 関数は次のような特徴を持つ“関数”である¹⁰。 δ 関数の特徴とは

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & (x \neq 0) \\ \infty & (x = 0) \end{cases}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-x_0)dx = f(x_0). \quad (1.21)$$

δ 関数を微分するときは部分積分から定義する:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \frac{\partial}{\partial x} \delta(x-x_0) = - \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x-x_0) \frac{\partial}{\partial x} f(x) = -f'(x_0) \quad (1.22)$$

この辺系を形式的に

$$\frac{\partial}{\partial x} \delta(x) = -\delta(x) \frac{\partial}{\partial x} \quad (1.23)$$

と書くことがある。しかし, 意味が分からないときは常に積分系に戻って考えることを薦める。

また, δ 関数についての変数変換の公式も説明する。任意の実数 $a \neq 0$ について次の公式が成立する:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)\delta(ax) = \frac{1}{|a|} f(0). \quad (1.24)$$

これは次の様に導出される: $a > 0$ のとき, まず変数変換 $y = ax$ を導入して

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(ax)dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(y/a)\delta(y) \frac{dy}{a} = \frac{f(0)}{a} \quad (1.25)$$

である。同様に $a < 0$ の場合も示せる。このことを形式的に

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x) \quad (1.26)$$

と書く。更に一般化すると, 滑らかな関数 $g(x)$ に対して

$$\delta(g(x)) = \sum_n \frac{\delta(x-x_n)}{|g'(x_n)|}. \quad (1.27)$$

である。但し, x_n は $g(x) = 0$ の n 番目の解であり, 全ての n に対して $g'(x_n) \neq 0$ を仮定した。

¹⁰数学的には通常関数としての定義は出来ず, 超関数と呼ばれるクラスに属する。

1.4.4 確率変数・期待値の記号

このノート中において、確率変数には強調の意味でハット記号（例えば \hat{A} ）をつける。また、確率変数 \hat{x} が $\hat{x} \in [x, x + dx]$ に存在する確率を $P(x)dx$ と書く。更に、期待値の記号を $\langle \dots \rangle$ と書く。例えば

$$\langle f(\hat{x}) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)P(x)dx. \quad (1.28)$$

が成り立つ。

1.4.5 確率分布の変換則（ヤコビアン関係式）

確率変数 \hat{x} の分布を $P(x)$ が分かっているとす。この時、変数変換 $\hat{y} = f(\hat{x})$ を行うとする¹¹。新たな変数 \hat{y} の確率分布を $q(y)$ と書くと、

$$P(x)dx = q(y)dy \quad (1.29)$$

が成り立つ。よって

$$q(y) = \left| \frac{dx}{dy} \right| P(x) \quad (1.30)$$

の関係が成り立つ。この関係式をヤコビアン関係とこのノートでは呼ぶ。

1.4.6 積分恒等式

滑らかな関数 $g(x)$, $h(x)$ に対して、任意の関数 $f(x)$ を用いて次の恒等式が成立するとする：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)h(x) \quad (1.31)$$

この時、 $g(x) = h(x)$ であることを次の様に示せる。このテクニックは非常によく使われるので、必ず覚えておくこと。

(1) 二乗偏差 (L^2 ノルム) を用いる

$$f(x) = g(x) - h(x) \quad (1.32)$$

を代入すると、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \{g(x) - h(x)\}^2 = 0 \quad (1.33)$$

が示せる。これは $g(x) = h(x)$ を意味する¹²

(3) δ 関数を用いる

$$f(x) = \delta(x - y) \quad (1.34)$$

を代入すると、

$$g(y) = h(y) \quad (1.35)$$

が示せる。

¹¹この写像 $f(x)$ は一対一写像であり、十分滑らかだと仮定する。

¹²これは数学としては L^2 -空間上での一致を意味する。つまり、一致しない点が高々可算個しかない関数に関して同一だと見做す同値類を取っていることになる。

1.5 練習問題

1.5.1 拡散方程式の解

粒子数 $N = 1$ の拡散方程式（つまりブラウン運動）を考える：

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}. \quad (1.36)$$

ブラウン粒子の初期分布を位置 $x(0) = x_0$ に固定する場合を考えよう：

$$P(x, 0) = \delta(x - x_0). \quad (1.37)$$

この方程式の解を次の手順で求める。

(1) δ 関数のフーリエ変換

初期条件 (1.37) をフーリエ変換する¹³：

$$\tilde{P}_0(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x, 0) e^{-ikx} \quad (1.38)$$

結果が δ 関数の定義から

$$\tilde{P}_0(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0} \quad (1.39)$$

であることを確かめよ。

(2) 拡散方程式のフーリエ変換

いま、任意の時刻の分布のフーリエ変換

$$\tilde{P}(k, t) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x, t) e^{-ikx} \quad (1.40)$$

を導入する。拡散方程式 (1.36) は次の方程式と等価であることを示せ：

$$\frac{\partial \tilde{P}(k, t)}{\partial t} = -Dk^2 \tilde{P}(k, t). \quad (1.41)$$

(3) 拡散方程式の解（フーリエ空間）

式 (1.41) の解が次の式で表されることを示せ：

$$\tilde{P}(k, t) = \tilde{P}_0(k) e^{-Dk^2 t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0 - Dk^2 t}. \quad (1.42)$$

¹³ このノートでは \tilde{f} は関数 f のフーリエ変換を表す。

(4) 拡散方程式の解 (実空間)

解 (1.42) に逆フーリエ変換を施す.

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{P}(k, t) e^{ikx} \quad (1.43)$$

この手法を通じて, 拡散方程式の実空間での解が次になることを示せ¹⁴:

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(\frac{-(x-x_0)^2}{4Dt}\right). \quad (1.45)$$

(5) 分散の性質

分散 $\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle$ は次の式で与えられることを示せ¹⁵:

$$\langle (\hat{x}(t) - x_0)^2 \rangle = 2Dt. \quad (1.47)$$

この関係式から拡散方程式を実験的に測定することが出来る.

1.5.2 確率分布の変数変換

(1) 線形変換

確率変数 $\hat{x} \in (-\infty, \infty)$ についての正規確率分布 $P(x)$ が次の式で与えられているとする:

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}. \quad (1.48)$$

線形な変数変換

$$\hat{y} = \sigma \hat{x} + \mu \quad (1.49)$$

を行った時, \hat{y} の確率分布が

$$Q(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(y-\mu)^2/2\sigma^2} \quad (1.50)$$

になることを示せ.

(2) 非線形変換

確率変数 $\hat{x} \in [0, \infty)$ が指数確率分布に従っているとする

$$P(x) = e^{-x}. \quad (1.51)$$

この時, 非線形な変数変換 $\hat{y} = \hat{x}^2$ を考えると, 確率変数 \hat{y} の確率密度分布 $Q(y)$ は

$$Q(y) = \frac{e^{-\sqrt{y}}}{2\sqrt{y}} \quad (1.52)$$

となることを確かめよ.

¹⁴ ヒント: $a > 0$ のとき, 次の恒等式が b が複素数でも性質することに着目する (第2回~第4回の演習問題 9):

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{a}{2}x^2 + bx} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{2a}}. \quad (1.44)$$

¹⁵ ヒント: 次の恒等式が成り立つ (第2回~第4回の演習問題 10):

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 e^{-z^2/2} = 1. \quad (1.46)$$

Chapter 2

マルコフ過程の数理

この章では、マルコフ過程についての初等的なレビューを行う。特に、マスター方程式 (または Chapman-Kolmogorov 方程式) の観点から議論を行い、確率的な経路に対する解析方法 (確率解析) は第 3 章で詳細に説明することにする。ここでの議論は簡単の為に、連続状態連続時間の 1 変数マルコフ過程に制限するが、多変数系への拡張は容易である。また、無限境界条件を考えることで、境界条件については深く考えないこととする。この文献を執筆するに当たって参考にしたのは C. Gardiner, N. G. van Kampen, H. Risken, H. Haken の教科書 [5, 7, 8, 30] である¹。

2.1 マスター方程式

過去の履歴に依存しない確率過程のことをマルコフ過程と呼ぶ。換言すると、もし確率変数 $\hat{v}(t)$ が 1 変数マルコフ過程に従うならば、その時間発展方程式は次の形に記述出来る：

$$\frac{\partial}{\partial t} P(v, t) = LP(v, t). \quad (2.1)$$

但し、 $P(\hat{v}(t) = v) \equiv P(v, t)$ は確率分布関数であり、 L は線形演算子である。式 (2.1) はマスター方程式、または Chapman-Kolmogorov 方程式と呼ぶ。それではこれから、マスター方程式の様々な具体例を通じて確率過程の直観を養うことを試みよう。

例：拡散方程式 例えば、拡散方程式 (1.7) もある種のマスター方程式であり、次の形の演算子 L になっている：

$$L = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (2.2)$$

2.2 決定論的常微分方程式 (ジャンプなし)

最初に、決定論的な 1 階の常微分方程式を考えよう：

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}). \quad (2.3)$$

ここで、ハット記号が付いた変数 (e.g. \hat{A}) は確率変数で有り、 $a(\hat{v})$ は任意の滑らかな関数である。式 (2.3) の時間発展は決定論的だが、初期条件が確率的に与えられているとし、その初期分布を $P(\hat{v}(0) =$

¹また、本ノートは文献 [9] を下地に日本語化し、説明を適時追加することで作成した。

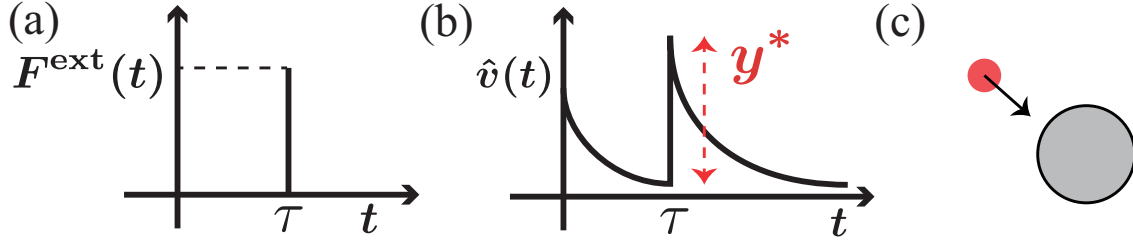


Figure 2.1: (a) 決定的な撃力 $F^{\text{ext}}(t) = y^* \delta(t - \tau)$. (b) その撃力に駆動される系の動力学 ($d\hat{v}/dt = -\hat{v} + F^{\text{ext}}$.) (c) 具体的な例：時刻 τ に粒子が衝突する現象．この図は文献 [9] から引用している．

$v_0) = P_0(v_0)$ とする．この系は明らかに過去に履歴に寄らず，マルコフ過程である．確率分布の時間発展は局所的な Liouville 方程式によって与えられる：

$$\frac{\partial}{\partial t} P(v, t) = \frac{\partial}{\partial v} a(v) P(v, t). \quad (2.4)$$

これは決定論的常微分方程式のマスター方程式である．

局所的な Liouville 方程式は次の様にして導出出来る．まず，任意の関数 $f(v)$ に対して次の恒等式を考える．

$$\frac{df(\hat{v})}{dt} = -a(\hat{v}) \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}}. \quad (2.5)$$

両辺の初期条件に関する期待値を取ると，

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{df(\hat{v})}{dt} \right\rangle &= \left\langle -a(\hat{v}) \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} \right\rangle \\ \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \frac{\partial}{\partial t} P(v, t) &= - \int_{-\infty}^{\infty} dv a(v) \frac{df(v)}{dv} P(v, t) \\ \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \frac{\partial}{\partial t} P(v, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \frac{\partial}{\partial v} a(v) P(v, t). \end{aligned} \quad (2.6)$$

但し， $\langle \dots \rangle$ はアンサンブル平均を表し，2行目から3行目にかけて部分積分の公式を用いた．また，次の関係式を使った：

$$\left\langle \frac{df(\hat{v})}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt} \langle f(\hat{v}) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \frac{\partial P(v, t)}{\partial t} \quad (2.7)$$

この等式は任意の $f(v)$ に対して成立するので，Liouville 方程式を得る．

2.3 決定論的常微分方程式（ジャンプあり）

次に，撃力による不連続な遷移（ジャンプ）を伴う，決定論的な1階の常微分方程式を考えよう：

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + F^{\text{ext}}, \quad F^{\text{ext}} = y^* \delta(t - \tau). \quad (2.8)$$

ここで， $a(\hat{v})$ は任意の滑らかな関数， y^* と τ は定数である．また，初期条件が確率的に与えられているとし，その初期分布を $P(\hat{v}(0) = v_0) = P_0(v_0)$ とする．このような動力学は，例えば時刻 τ に系に他の粒子が衝突するようなプロセスで現れる．この時， y^* とは衝突の結果生じた速度 \hat{v} のジャンプ幅を指している（図 2.1）．

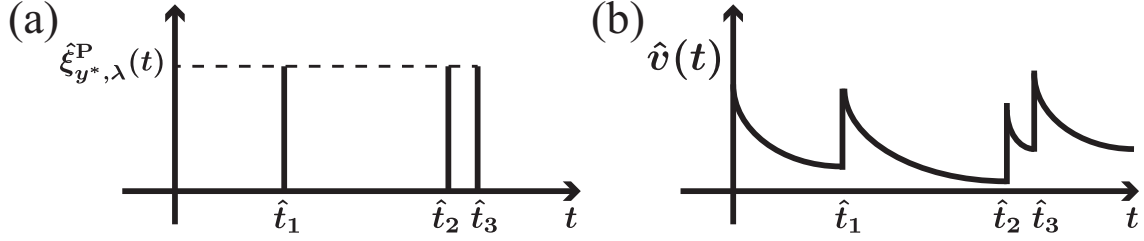


Figure 2.2: (a) ポアソンノイズの典型的な経路. (b) ポアソンノイズに駆動される系の典型的な経路 (但し, $a(\hat{v}) = \hat{v}$ の場合). この図は文献 [9] の図を改変して作成した.

この系は明らかに過去に履歴に寄らず, マルコフ過程である. 確率分布の時間発展はジャンプを伴う Liouville 方程式によって与えられる:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(v, t) = \frac{\partial}{\partial v} a(v) P(v, t) + [P(v - y^*, t) - P(v, t)] \delta(t - \tau). \quad (2.9)$$

これが式 (2.8) に対応するマスター方程式である. 即ち, 滑らかな関数から撃力に向かって極限を取ると, マスター方程式の形が大きく変わる点に注意.

ジャンプを伴う Liouville 方程式は次の様にして導出される. まず, 任意の関数 $f(v)$ と微小時間 dt に対して次の恒等式を考える:

$$df(\hat{v}(t)) \equiv f(\hat{v}(t + dt)) - f(\hat{v}(t)) = \begin{cases} -a(\hat{v}(t)) \frac{df(\hat{v}(t))}{d\hat{v}} dt & (\tau \notin [t, t + dt]) \\ f(\hat{v}(t) + y^*) - f(\hat{v}(t)) & (\tau \in [t, t + dt]) \end{cases}. \quad (2.10)$$

この式は δ 関数を使って次のように書ける:

$$\frac{df(\hat{v})}{dt} = -a(\hat{v}) \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} + [f(\hat{v} + y^*) - f(\hat{v})] \delta(t - \tau). \quad (2.11)$$

ここで, δ 関数と関数 $f(\hat{v})$ との積は次の意味である:

$$[f(\hat{v} + y^*) - f(\hat{v})] \delta(t - \tau) = [f(\hat{v}(\tau - 0) + y^*) - f(\hat{v}(\tau - 0))] \delta(t - \tau). \quad (2.12)$$

これは次章で説明する伊藤積分であり, 以降この積の取り方を取る. 両辺の期待値を取ると,

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{df(\hat{v})}{dt} \right\rangle &= \left\langle -a(\hat{v}) \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} + [f(\hat{v} + y^*) - f(\hat{v})] \delta(t - \tau) \right\rangle \\ \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \frac{\partial P(v, t)}{\partial t} &= \int_{-\infty}^{\infty} dv \left\{ -a(v) \frac{df(v)}{dv} + [f(v + y^*) - f(v)] \delta(t - \tau) \right\} P(v, t) \\ \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \frac{\partial}{\partial t} P(v, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dv \left\{ \frac{\partial}{\partial v} a(v) P(v, t) + [P(v - y^*) - P(v)] \delta(t - \tau) \right\} f(v). \end{aligned} \quad (2.13)$$

但し, 2 行目から 3 行目にかけて部分積分の公式を用いた. この等式は任意の $f(v)$ に対して成立するので, ジャンプを伴う Liouville 方程式 (2.9) を得る.

2.4 ポアソンノイズ

先ほどの例では, 決まった時間に撃力が発生する系の動力学をモデル化した. 次は, 撃力がランダムなタイミングで発生する系をモデル化しよう. ランダムに撃力が発生するとき, その力はポアソンノ

イズとしてモデル化されることが多い。このポアソンノイズは単位時間遷移率 λ と飛躍の距離 y^* によって特徴付けられる。遷移率とはポアソンノイズの発生確率を特徴付け、時間 $[t, t + dt]$ の間にポアソンフライトが発生する確率は次の式で与えられる：

$$\lambda dt + O(dt^2). \quad (2.14)$$

ポアソンノイズの発生時刻の時系列 $\{\hat{t}_i\}_{i \geq 1}$ は上記の確率的規則で生成され、ポアソンノイズの軌道の特徴付ける。この時系列 $\{\hat{t}_i\}_{i \geq 1}$ を用いるとポアソンノイズの具体的な表示を書き下すことが出来る：

$$\hat{\xi}_{y^*, \lambda}^P(t) = \sum_{i=1}^{\infty} y^* \delta(t - \hat{t}_i). \quad (2.15)$$

図 2.2(a) はポアソンノイズのトラジェクトリーを記述したものであり、デルタ関数の特異性が際立ったトラジェクトリーをしている。後述のように、このデルタ関数の特異性が計算規則に対する数学的定式化に大きく関わってくる。次に、ポアソンノイズに駆動される確率過程を考える：

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + \hat{\xi}_{y^*, \lambda}^P(t), \quad (2.16)$$

但し、 $a(\hat{v})$ は任意の滑らかな関数である。ポアソンノイズに駆動される系の典型的な軌道を図 2.2(b) に示す (特に $a(\hat{v}) = \hat{v}$ の場合)。図 2.2(b) での経路には有限のジャンプを観測することが出来る。これはポアソンノイズのデルタ関数の特異性に起因することに注意。この系のマスター方程式は次の形で与えられる：

$$\frac{\partial P(v, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} a(v) P(v, t) + \lambda [P(v - y^*, t) - P(v, t)]. \quad (2.17)$$

但し、右辺第 1 項 $(\partial/\partial v)a(v)P(v, t)$ は決定論的時間発展を表し、第 2 項 $\lambda P(v - y^*, t)$ は確率の流入を表し、第 3 項 $-\lambda P(v, t)$ は確率の流出を表す。以下、表記を簡約化するために $\hat{\xi}^P(t; \lambda) \equiv \hat{\xi}_{y^*=1, \lambda}^P(t)$ という記号を導入する。

式 (2.17) は次の様に導出される。まず、任意の関数 $f(v)$ と微小時間 dt に対して次の恒等式を考える：

$$df(\hat{v}(t)) = \begin{cases} -a(\hat{v}) \frac{df(\hat{v}(t))}{d\hat{v}} dt & (\hat{t}_i \notin [t, t + dt]: \text{確率} = 1 - \lambda dt) \\ f(\hat{v}(t) + b) - f(\hat{v}(t)) & (\hat{t}_i \in [t, t + dt]: \text{確率} = \lambda dt) \end{cases}. \quad (2.18)$$

両辺の期待値を取ると、

$$\begin{aligned} \langle f(\hat{v}(t + dt)) - f(\hat{v}(t)) \rangle &= \left\langle -a(\hat{v}(t)) \frac{df(\hat{v}(t))}{d\hat{v}} dt \right\rangle (1 - \lambda dt) + \langle [f(\hat{v}(t) + y^*) - f(\hat{v}(t))] \rangle \lambda dt \\ \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) [P(v, t + dt) - P(v, t)] &= \int_{-\infty}^{\infty} dv \left\{ -a(v) \frac{df(v)}{dv} dt + \lambda [f(v + y^*) - f(v)] dt \right\} P(v, t) \\ \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \frac{\partial}{\partial t} P(v, t) dt &= \int_{-\infty}^{\infty} dv \left\{ \frac{\partial}{\partial v} a(v) P(v, t) + \lambda [P(v - y^*) - P(v)] \right\} f(v) dt. \end{aligned} \quad (2.19)$$

但し、2 行目から 3 行目にかけて部分積分の公式を用いた。結果、次の恒等式を得る：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \frac{\partial}{\partial t} P(v, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dv \left\{ \frac{\partial}{\partial v} a(v) P(v, t) + \lambda [P(v - y^*) - P(v)] \right\} f(v) \quad (2.20)$$

この等式は任意の $f(v)$ に対して成立するので、ジャンプを伴う Liouville 方程式 (2.17) を得る。

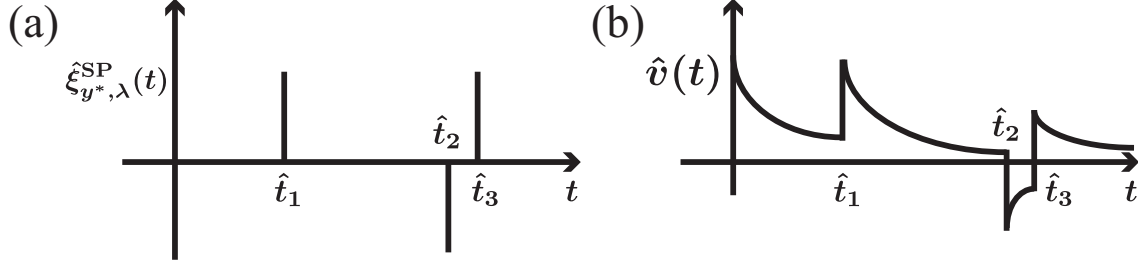


Figure 2.3: (a) 対称ポアソンノイズの典型的なトラジェクトリー． (b) 対称ポアソンノイズに駆動される系の典型的なトラジェクトリー ($a(\hat{v}) = \hat{v}$ の場合)． この図は文献 [9] の図を改変して作成した．

次に経路についての微分形式を考えよう．ここでの微分形式は特にガウスノイズで重要となるが、如何にガウスノイズが良い性質を持っているかを学ぶためにも、比較の意味を込めてポアソンノイズでの微分形式を扱う．簡単の為、決定論的な力がない場合 ($a(\hat{v}) = 0$) を考える．時間区間 $[t, t + dt]$ 中の差分 $d\hat{v}(t) \equiv \hat{v}(t + dt) - \hat{v}(t)$ の取り得る値は次の値になる：

$$d\hat{v} = \begin{cases} y^* & (\hat{t}_i \in [t, t + dt] : \text{確率} = \lambda dt) \\ 0 & (\hat{t}_i \notin [t, t + dt] : \text{確率} = 1 - \lambda dt) \end{cases} \quad (2.21)$$

この式は次の式とも等価である：

$$(d\hat{v})^n = \begin{cases} y^{*n} & (\hat{t}_i \in [t, t + dt] : \text{確率} = \lambda dt) \\ 0 & (\hat{t}_i \notin [t, t + dt] : \text{確率} = 1 - \lambda dt) \end{cases} \quad (2.22)$$

よって、モーメントの式は次の式で与えられる：

$$\langle (d\hat{v})^n \rangle = \lambda y^{*n} dt. \quad (2.23)$$

著しいことに、全次数の微分形式に関わるモーメントが $O(dt)$ となっている．これはトラジェクトリーに特異的な飛躍があるからである．この特異性のせいで、確率過程の微分形式は一般に全次数のモーメントを考慮する必要がある．

2.4.1 対称ポアソンノイズ

ポアソンノイズはマルコフ過程でも特別な位置を占めており、ポアソンノイズを使うことで多様なノイズを構成することが出来る．実際に以下ではポアソンノイズから構成されるノイズの例をいくつか調べていくことにする．まず、対称ポアソンノイズを調べよう．対称ポアソンノイズは次の式で定義される：

$$\hat{\xi}_{y^*, \lambda}^{SP}(t) \equiv \hat{\xi}_{y^*, \lambda/2}^P(t) + \hat{\xi}_{-y^*, \lambda/2}^P(t). \quad (2.24)$$

但し、 $\hat{\xi}_{y^*, \lambda/2}^P(t)$ と $\hat{\xi}_{-y^*, \lambda/2}^P(t)$ は独立である．対称ポアソンノイズの典型的なトラジェクトリーを図 2.3(a) に示す．次に、対称ポアソンノイズに駆動される系を考える：

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + \hat{\xi}_{y^*, \lambda}^{SP}(t). \quad (2.25)$$

この系の典型的なトラジェクトリーを図 2.3(a) に示す．式 (2.25) のマスター方程式は次の様に与えられる．

$$\frac{\partial P(v, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} a(v) P(v, t) + \frac{\lambda}{2} [P(v - y^*, t) - P(v, t)] + \frac{\lambda}{2} [P(v + y^*, t) - P(v, t)]. \quad (2.26)$$

ここで右辺の第1項は決定論的な力 $-a(\hat{v})$ に由来し、第2項はポアソンノイズ $\hat{\xi}_{y^*, \lambda/2}^{\text{P}}$ に由来し、第3項はポアソンノイズ $\hat{\xi}_{-y^*, \lambda/2}^{\text{P}}$ に由来する。この式は、式 Eq. (2.17) の導出と同様の方法で導出される（練習問題で導出）。また、微分形式 $d\hat{v}$ のモーメントは次の様に与えられる点に注意。

$$\langle (d\hat{v})^n \rangle = \begin{cases} 0 & (\text{for odd } n) \\ \lambda y^{*n} dt & (\text{for even } n) \end{cases}. \quad (2.27)$$

2.4.2 複合ポアソンノイズ

対称ポアソンノイズは2種類の独立なポアソンノイズを組み合わせることで構成できた。同様に、複数の互いに独立なポアソンノイズを組み合わせることで複合ポアソンノイズが構成できる。 N 個のポアソンノイズを組み合わせるとしよう。今、 k 番目のポアソンノイズのジャンプの距離を y_k^* 、遷移率を λ_k とする。この時、複合ポアソンノイズは次の様に構成される：

$$\hat{\xi}_{\mathbf{y}^*, \boldsymbol{\lambda}}^{\text{CP}}(t) \equiv \sum_{k=1}^N \hat{\xi}_{y_k^*, \lambda_k}^{\text{P}}(t). \quad (2.28)$$

但し、 $\mathbf{y}^* \equiv (y_1^*, \dots, y_N^*)$ であり、 $\boldsymbol{\lambda} \equiv (\lambda_1, \dots, \lambda_N)$ である。複合ポアソンノイズ (2.28) に駆動される系を考える

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + \hat{\xi}_{\mathbf{y}^*, \boldsymbol{\lambda}}^{\text{CP}}. \quad (2.29)$$

但し、 $a(\hat{v})$ は任意の滑らかな関数である。式 (2.29) のマスター方程式は

$$\frac{\partial P(v, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} a(v) P(v, t) + \sum_{k=1}^N \lambda_k [P(v - y_k^*, t) - P(v, t)] \quad (2.30)$$

である。この式は、式 (2.17) の導出と同様の方法で導出される。

また、複合ポアソンノイズをジャンプ幅が連続に分布するように拡張することも出来る。この為に、ジャンプ幅 y に対する遷移率密度 $\lambda(y)$ を導入する：時間区間 $[t, t + dt]$ の間に $y \leq y^* \leq y + dy$ を充たすジャンプ幅 y^* のポアソンフライトが発生する確率を

$$\lambda(y) dy dt \quad (2.31)$$

とする。以下簡約化のため、誤解を生まない範囲で遷移率密度を遷移率と呼ぶことにする。これを用いて、遷移率が $\lambda(y)$ の複合ポアソンノイズを次の様に定義する：

$$\hat{\xi}_{\lambda(y)}^{\text{CP}}(t) \equiv \sum_{-\infty \leq y \leq \infty} \hat{\xi}_{y, dy \lambda(y)}^{\text{P}}(t). \quad (2.32)$$

但し、 y はダミー変数であり全ての値を取る。複合ポアソン過程の定義に現れる和を、形式的に積分で記述することもある [10]：

$$\hat{\xi}_{\lambda(y)}^{\text{CP}}(t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\xi}_{y, dy \lambda(y)}^{\text{P}}(t). \quad (2.33)$$

次に、複合ポアソンノイズに駆動される系を考える。

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + \hat{\xi}_{\lambda(y)}^{\text{CP}}(t). \quad (2.34)$$

この系に対応するマスター方程式は

$$\frac{\partial P(v, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} a(v) P(v, t) + \int_{-\infty}^{\infty} dy \lambda(y) [P(v - y, t) - P(v, t)] \quad (2.35)$$

で与えられる。マスター方程式 (2.35) は積分偏微分方程式の一種で有り、ポアソンジャンプに由来して積分項が現れている。

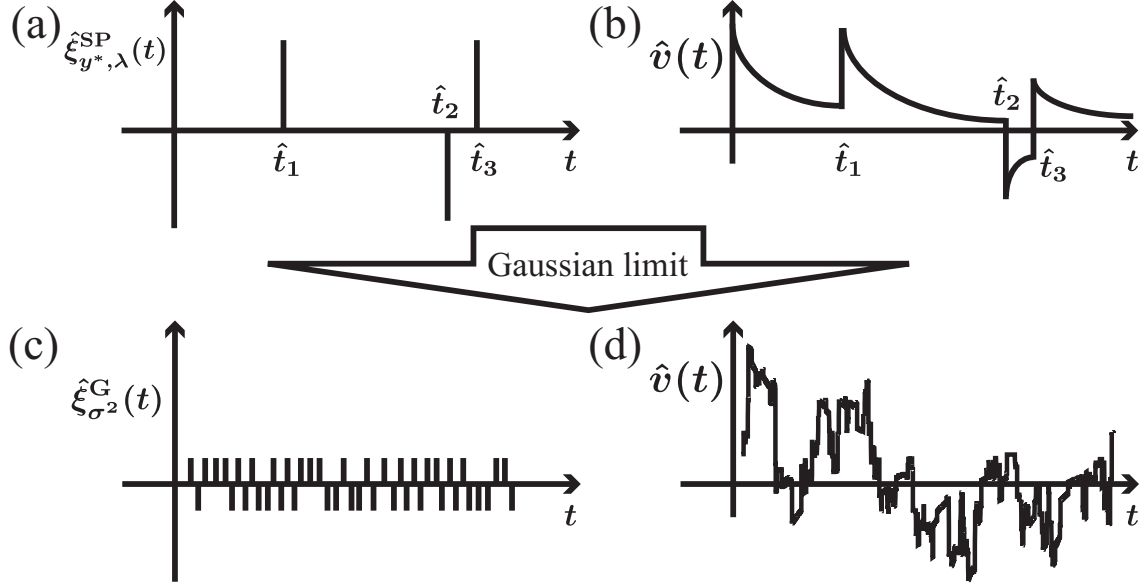


Figure 2.4: (a-b) 対称ポアソンノイズに駆動される系の典型的なトラジェクトリー (特に $a(\hat{v}) = \hat{v}$ の場合). (c-d) 対称ポアソンノイズからのガウス極限 ($y^* \rightarrow 0, \lambda y^{*2} = \sigma^2(\text{const.})$). (c) はガウスノイズの典型的なトラジェクトリー, (d) はガウスノイズに駆動される系の典型的なトラジェクトリー. この図は文献 [9] の図を改変して作成した.

2.5 ガウスノイズ

ここまで述べてきたポアソンノイズはデルタ関数由来の特異性によって, トラジェクトリーにジャンプを含んでいた. 次に, トラジェクトリーにジャンプが存在しない確率過程を考えてみよう. 具体的には, 対称ポアソンノイズ $\hat{\xi}_{y^*, \lambda}^{SP}$ に対してジャンプが存在しない極限 $y^* \rightarrow 0$ を取る. ただ, このままではノイズが消失して意味を為さなくなるので, 同時に, 遷移率について $\lambda \rightarrow \infty$ の極限を取り, ノイズの分散を固定する極限 $\sigma^2 \equiv \lambda y^{*2} = \text{const.}$ (図 2.4(a, c) がこの操作の直観的な図である) を考える. この極限で定義されるノイズをガウスノイズという²:

$$\hat{\xi}_{\sigma^2}^G(t) \equiv \lim_{\substack{\lambda y^{*2} = \sigma^2 \\ y^* \rightarrow 0}} \hat{\xi}_{y^*, \lambda}^{SP}(t). \quad (2.36)$$

ノイズの強さが小さくなるとともにノイズの発生回数が大きくなっており, 常に発生する弱いノイズがガウスノイズの正体である.

次に, ガウスノイズに駆動される系 (図 2.4(d)) を考える:

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + \hat{\xi}_{\sigma^2}^G(t). \quad (2.37)$$

但し, $a(\hat{v})$ は任意の滑らかな関数である. この系 (2.37) のマスター方程式は次の手順によって得ら

²数学的に厳密に考えるなら, この極限操作の収束先をどう定義するかが問題となる. 通常の数学的定式化ではこの問題を避けるためにガウスノイズ自体を定義せず, 後述のウィーナー過程のみを定義するのが普通である. その定式化では, ガウスノイズとはウィーナー過程の形式的な微分であり, 実体を伴わない「記法」として理解される. (但し, 近年ガウスノイズを超関数的な意味で定義する方法としてホワイトノイズ解析と呼ばれる手法が存在するらしい.) ここでは, 物理的直観を優先して曖昧な極限を元にガウスノイズを定義しているが, 曖昧なまま計算しても実用上の問題は生じない (少なくとも筆者は遭遇したことが無い).

れる。まず、対称ポアソンノイズのマスター方程式 (2.26) を展開する：

$$\begin{aligned}\frac{\partial P(v,t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial v} a(v)P(v,t) + \frac{\lambda}{2}[P(v-y^*,t) + P(v+y^*,t) - 2P(v,t)] \\ &= \frac{\partial}{\partial v} a(v)P(v,t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda y^{*2n}}{(2n)!} \frac{\partial^{2n}}{\partial v^{2n}} P(v,t).\end{aligned}\quad (2.38)$$

次に分散を固定したまま ($\lambda y^{*2} = \sigma^2$ (const.)), ガウス極限 $y^* \rightarrow 0$ を取る。

$$\frac{\partial P(v,t)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial v} a(v) + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] P(v,t).\quad (2.39)$$

この方程式はフォッカー・プランク方程式として知られている。フォッカー・プランク方程式 (2.39) には局所的な演算子しか含まれておらず、この点がポアソンノイズのマスター方程式と大きく異なっている。

次に、ガウスノイズの微分形式について説明する。ガウスノイズの微分形式には著しい特徴があり、実用的な計算にも重要になる。まず次の確率的量を考える：

$$\hat{W}(t) \equiv \int_{t_i}^t ds \hat{\xi}^G(s) \iff d\hat{W} = \hat{\xi}^G dt.\quad (2.40)$$

但し、 t_i は初期時間であり、 \hat{W} はウィーナー過程と呼ばれている。ウィーナー過程は形式的に $d\hat{W} \equiv \hat{\xi}^G dt$ と書かれることもあり、ガウスノイズはウィーナー過程の形式的な微分として理解できる。ウィーナー過程には独特な性質があり、3次以上の全てのモーメントがゼロになる：

$$\langle (d\hat{W})^n \rangle = \begin{cases} dt & (n=2) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}.\quad (2.41)$$

この性質はシングル・トラジェクトリーの解析においてより一般化され、伊藤ルールとしてよく使われている (詳細は第3章を参照)。

2.6 ホワイトノイズ

今まで扱われたノイズを一般化することで白色ノイズを得る。白色ノイズとは、系の状態変数 \hat{v} と相関を持たず、更に時間について自己相関も持たないノイズである。即ち、もし $\hat{\xi}$ が白色ノイズならば、次の関係式が任意の時刻 t_1, t_2, t_3 について成立する：

$$\langle \hat{\xi}(t_1) \hat{\xi}(t_2) \rangle_{\hat{v}(t_3)=v} = C \delta(t_1 - t_2).\quad (2.42)$$

但し、 $\langle \cdots \rangle_{\hat{v}(t)=v}$ は条件 $\hat{v}(t) = v$ のもとでのアンサンブル平均であり、 C は t_1, t_2, t_3, v と独立な定数である。伊藤・レヴィ分解 [5,11] によると、任意の白色ノイズ $\hat{\xi}$ は定数ドリフト m 、複合ポアソンノイズ $\hat{\xi}_{\lambda(y)}^{\text{CP}}$ 、ガウスノイズ $\hat{\xi}^G$ の3種類の項に分解できる：

$$\hat{\xi}(t) = m + \hat{\xi}_{\sigma^2}^G(t) + \hat{\xi}_{\lambda(y)}^{\text{CP}}(t) = m + \sigma \hat{\xi}^G(t) + \sum_y \hat{\xi}_{y, dy\lambda(y)}^{\text{P}}(t).\quad (2.43)$$

但し、 m は定数、 σ^2 は非負定数、 $\lambda(y)$ は遷移率である。この定理によれば、非ガウスノイズとは複合ポアソン過程であり、ポアソンノイズに分解できる。更に、ガウスノイズが対称ポアソンノイズから構成できることを鑑みるに、ポアソンノイズが白色ノイズの本質的な構成要素であることがわかる。白色ノイズに駆動される一般的な系のマスター方程式は、次の式で与えられる：

$$\frac{\partial P(v,t)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial v} \{a(v) - m\} + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] P(v,t) + \int_{-\infty}^{\infty} dy \lambda(y) [P(v-y,t) - P(v,t)].\quad (2.44)$$

但し、系の時間発展の確率微分方程式表示は次の式である：

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + \hat{\xi} = -a(\hat{v}) + m + \hat{\xi}_{\sigma^2}^G + \hat{\xi}_{\lambda(y)}^{CP}. \quad (2.45)$$

ここでレヴィ過程に言及しておく。レヴィ過程 $\hat{L}(t)$ とはウィーナー過程 $\hat{W}(t)$ のホワイトノイズ $\hat{\xi}$ への一般化であり、直観的には次の式で定義される：

$$\hat{L}(t) \equiv \int_0^t ds \hat{\xi}(s). \quad (2.46)$$

但し、 $\hat{\xi}$ は白色ノイズである。形式的に微分形式 $d\hat{L} = \hat{\xi}dt$ と書かれる。

2.7 一般のマスター方程式

今まで白色ノイズに関するマスター方程式を論じてきた。ここでは一般のマスター方程式について論じる。一般に、マルコフ過程で記述されるノイズは白色ノイズではなく、ノイズは系の状態変数 \hat{v} とカップルしている。即ち、時間相関がなくとも環境相関は存在しており、より複雑なマスター方程式になるのが一般である。最も幅広い一般化は、ガウスノイズの分散と複合ポアソンノイズの遷移率が系の状態変数 \hat{v} とカップルし、 \hat{v} の関数に一般化されることである：

$$\sigma^2 \rightarrow b^2(\hat{v}) \quad \lambda(y) \rightarrow \lambda(y|\hat{v}) \quad (2.47)$$

もしくは

$$\hat{\xi}_{\sigma^2}^G(t) \rightarrow \hat{\xi}_{b^2(\hat{v})}^G(t), \quad \hat{\xi}_{\lambda(y)}^{CP}(t) \rightarrow \hat{\xi}_{\lambda(y|\hat{v})}^{CP}(t). \quad (2.48)$$

即ち、一般のマスター方程式は次の形で記述される：

$$\frac{\partial P(v,t)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial v} a(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b^2(v) \right] P(v,t) + \int_{-\infty}^{\infty} dy [\lambda(y|v-y)P(v-y,t) - \lambda(y|v)P(v,t)]. \quad (2.49)$$

但し、 $b^2(v)$ は $\hat{v}(t) = v$ の条件下でのガウスノイズの分散であり、 $\lambda(y|v)$ は $\hat{v}(t) = v$ の条件下の複合ポアソンノイズの遷移率である。この形が最も汎用的な一般形であることは文献 [5] に示されている。マスター方程式 (2.49) 対応する確率微分方程式は、系の状態変数 \hat{v} に依存する一般のノイズに駆動される次の形である

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + b(\hat{v}) \cdot \hat{\xi}^G + \hat{\xi}_{\lambda(y|\hat{v})}^{CP}. \quad (2.50)$$

ここで、確率微分方程式 (2.50) の第2項と第3項の \hat{v} 依存性は、伊藤型の積（前進オイラー型の積）で定義されていることを暗に仮定した³、伊藤積分の詳細については第3章を参照すること。

2.8 クラマース・モヤル展開

マスター方程式の一般形 (2.49) は積分微分方程式であり、非常に複雑である。一般に微分方程式は解析的な取り扱い方法（厳密解・摂動論）が発達してきたが、積分微分方程式についてはあまり発達してきていない。そこで、マスター方程式 (2.49) を形式的に微分形に持って行くことを考える。一般に C^∞ 級を仮定できる場合は、積分形を形式的に無限階層の微分形に変形することができる。事実、次の恒等変形に着目すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy \lambda(y|v-y)P(v-y,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dy y^n \frac{\partial^n}{\partial v^n} \lambda(y|v)P(v,t), \quad (2.51)$$

³ここでの記号“ \cdot ”は伊藤型の積（伊藤積分）を意味する記号である。

マスター方程式 (2.49) は次の形に変形でき,

$$\frac{\partial P(v, t)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial v} a(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b^2(v) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial v^n} \alpha_n(v) \right] P(v, t), \quad (2.52)$$

この式は形式的に無限階層の微分方程式になっている。但し, ここでクラマース・モヤル係数を導入した:

$$\alpha_n(v) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dy y^n \lambda(y|v). \quad (2.53)$$

ここで, フォッカー・プランク方程式はクラマース・モヤル方程式の2階微分までの切断として理解する事が出来る。特に, 後述するヴァン・カンペンのシステムサイズ展開 [30,31] を用いると, 条件付きで第2階での切断を正当化することが出来, その結果物理系でランジュバン方程式が普遍的に現れる事になる。

2.9 練習問題

2.9.1 対称ポアソンノイズのマスター方程式

対称ポアソンノイズのマスター方程式 (2.26) を導出せよ。

2.9.2 複合ポアソンノイズのマスター方程式

複合ポアソンノイズのマスター方程式 (2.30) を導出せよ。

2.9.3 拡散過程の時間発展

次の式で記述される確率過程を考える:

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = \hat{\xi}_{\sigma^2}^G. \quad (2.54)$$

この系の拡散係数が次で与えられることを示せ:

$$D = \frac{\sigma^2}{2}. \quad (2.55)$$

2.9.4 オルンシュタイン・ウーレンベック過程の定常分布

次の式で記述される過程をオルンシュタイン・ウーレンベック過程と呼ぶ:

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -\gamma \hat{v} + \hat{\xi}_{\sigma^2}^G. \quad (2.56)$$

この確率過程の定常分布を調べてみよう。

(1) マスター方程式 (フォッカー・プランク方程式):

この系のマスター方程式は次の形状 (フォッカー・プランク型) になることを示せ:

$$\frac{\partial P(v, t)}{\partial t} = \left[\gamma \frac{\partial}{\partial v} v + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] P(v, t). \quad (2.57)$$

(2) 定常解：

上記のマスター方程式を解くことで、定常解が次の式になることを示せ：

$$P_{\text{SS}}(v) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} P(v, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma^2/\gamma}} e^{-\gamma v^2/\sigma^2} \quad (2.58)$$

Chapter 3

確率積分の定義

この章では確率解析における確率積分の役割を説明する。確率過程で現れるホワイトノイズはデルタ関数の特異性があり、計算過程において適切な取り扱い方法を理解しておく必要がある。ここではまず、確率積分の重要性を学び、乗法的ノイズについての定義から始める。最終的に伊藤ルールを使った微分計算ルールについてまで説明する。

3.1 乗法的ノイズへの入門

第2章では確率微分方程式として次の形のものを主に扱ってきた：

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + \hat{\xi}. \quad (3.1)$$

但し、 $\hat{\xi}$ はホワイトノイズである。この形のノイズを加法的ノイズという。何故なら、確率微分方程式に対して単純な足し算の形で導入されているからだ。以下、加法的なノイズに駆動される確率微分方程式を、加法的 SDE (Stochastic Differential Equation) と略記することにしよう。加法的 SDE は第2章で議論したように直観的に導入しても、特に定義レベルの問題は生じない。しかし、次の様な SDE は素朴な意味では定義できない：

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + b(\hat{v})\hat{\xi}. \quad (3.2)$$

ここで、ノイズが乗法的な関数 $b(\hat{v})$ を通じて、状態変数依存性を持っていることに注意しよう。この様なノイズ項 $b(\hat{v})\hat{\xi}$ のことを乗法的なノイズと呼び、乗法的ノイズを持つ確率微分方程式を乗法的 SDE と略記しよう。乗法的ノイズには素朴については、ノイズと関数 $b(\hat{v})$ の間の積を明示的に指定する必要がある。この定義問題を理解する為に、次の様な常微分方程式（※確率微分方程式ではない！）を考えよう：

$$\frac{dv}{dt} = v(t)\delta(t-1). \quad (3.3)$$

但し、初期条件は $v(0) = 1$ と設定する。常微分方程式 (3.3) は実は well-defined ではなく、 $v(t)$ と $\delta(t-1)$ の間の積に不定性が残っている。事実、離散時間での表示 Δt , $v(1+\Delta t) = v_{i+1}$, $v(1-0) = v_i$ を考えると、いくつか離散化方法の候補があり、しかも全てにおいて解が異なっている (図 3.1)：

- 前進オイラー型 (伊藤型：図 3.1 の赤丸)

$$\frac{v_{i+1} - v_i}{\Delta t} = v_i \frac{1}{\Delta t} \iff v(1+0) = 2, \quad (3.4)$$

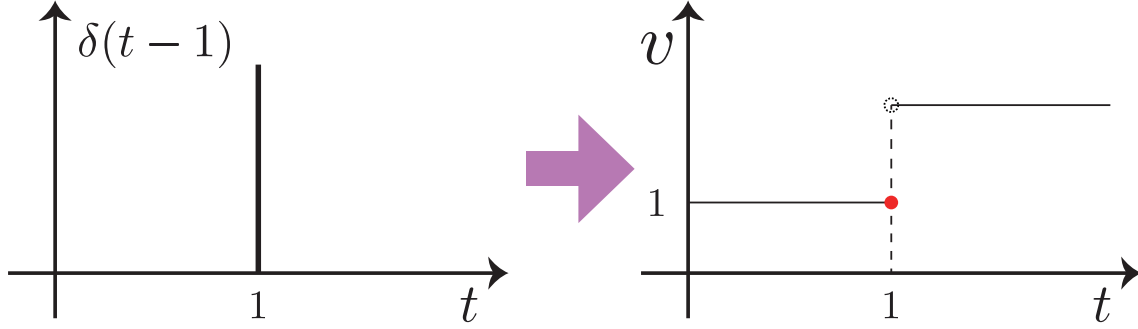


Figure 3.1: δ 関数型の撃力 (a) と、それに対応する $v(t)$ の動き (b). 図 (b) の赤丸での v の値 $v(t) = 1$ を採用するのが伊藤積分のアイデア.

- 中点規則型 (ストラトノビッチ型)

$$\frac{v_{i+1} - v_i}{\Delta t} = \frac{v_{i+1} + v_i}{2} \frac{1}{\Delta t} \iff v(1+0) = 3, \quad (3.5)$$

- α -線形補間 ($0 \leq \alpha < 1$)

$$\frac{v_{i+1} - v_i}{\Delta t} = [\alpha v_{i+1} + (1 - \alpha)v_i] \frac{1}{\Delta t} \iff v(1+0) = \frac{2 - \alpha}{1 - \alpha}. \quad (3.6)$$

上記の例から分かるように、デルタ関数と $v(t)$ の間の積を明示することが重要であり、これは常微分方程式でも重要な問題になっている。更にホワイトノイズは、本質的にデルタ関数列によって構築することが出来るので、同様の問題が存在している。この課題を明示的に解決するための概念が確率積分である。

3.2 伊藤型確率微分方程式

ここでは伊藤積分を説明し、その応用として伊藤型確率微分方程式を説明する。伊藤積分はもっとも標準的な確率積分の定義であり、特に数学の分野で好まれる¹。伊藤積分は式 (3.4) での離散化と本質的に同じ定式化であり、明示的な定義は次のようになる：まず、時間区間 $[0, T]$ を離散的に分割する ($0 = s_0 < s_1 < \dots < s_N = T$)。任意のホワイトノイズ $\hat{\xi}(t)$ に対して、次の積分を $N \rightarrow \infty$ の極限として導入する：

$$\int_0^T f(\hat{v}(t)) \cdot \hat{\xi}(s) ds = \int_0^T f(\hat{v}(t)) \cdot d\hat{L}(s) \equiv \lim_{\substack{|\Delta t| \rightarrow +0 \\ N \rightarrow \infty}} \sum_{i=0}^{N-1} f(\hat{v}(s_i)) \Delta \hat{L}(s_i). \quad (3.7)$$

但し、 $f(x)$ は任意の滑らかな関数、 $\hat{L}(t) \equiv \int_0^t ds \hat{\xi}(s)$ はレヴィ過程、 $\Delta \hat{L}(s_i) \equiv \hat{L}(s_{i+1}) - \hat{L}(s_i) = \hat{\xi}(s_i) \Delta s_i$ はレヴィ過程の差分、 $|\Delta t| \equiv \max_i |t_{i+1} - t_i|$ は時間差分の最大値である。ここで、記号 “.” を導入したが、これは $f(\hat{v})$ と $\hat{\xi}$ の間の積が伊藤の意味で定義されていることを強調する記号である²。

伊藤積分 (3.7) を用いることで、伊藤型確率微分方程式が定式化される：伊藤型確率微分方程式

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + b(\hat{v}) \cdot \hat{\xi} \quad (3.8)$$

¹物理学のコミュニティでは伊藤積分以外にストラトノビッチ積分もそれなりに市民権を得ている。但し、このノートではその事情を説明しない。

²特に物理学者の中で好んで用いられる。

を、次の確率積分方程式の形式的な表現として定義する：

$$\hat{v}(t) = \hat{v}(0) - \int_0^t a(\hat{v}(s))ds + \int_0^t b(\hat{v}(s)) \cdot \hat{\xi} ds. \quad (3.9)$$

但し、 $a(\hat{v})$ と $b(\hat{v})$ を任意の滑らかな関数とする。また、確率積分方程式を SIE (Stochastic Integral Equation) と略記することがある。数学では普通伊藤型が暗黙の内に仮定されており、伊藤積の記号“ \cdot ”を省略することが多く、更に白色ノイズ $\hat{\xi}$ を使わずにウィーナー過程 $d\hat{L} = \hat{\xi} dt$ を使って

$$d\hat{v} = -a(\hat{v})dt + b(\hat{v}) \cdot d\hat{L} \iff \hat{v}(t) = \hat{v}(0) - \int_0^t a(\hat{v}(s))ds + \int_0^t b(\hat{v}(s))d\hat{L}(s). \quad (3.10)$$

と記述する方がする方が普通である。

伊藤積分の性質： 伊藤積分に関する期待値は 0 になる：

$$\left\langle \int_0^t d\hat{L} \cdot f(\hat{v}) \right\rangle = 0. \quad (3.11)$$

この性質は確率微分方程式を差分形で書くと特にわかりやすい。

$$\hat{v}_{i+1} = \hat{v}_i + a(\hat{v}_i)\Delta t + b(\hat{v}_i)\Delta\hat{L}_i \quad (3.12)$$

となっているので、 $\Delta\hat{L}_i$ が相関を持つのは \hat{v}_i ではなく \hat{v}_{i+1} である。よって関係式 (3.11) が成り立つ。

3.3 ポアソンノイズに対する微分ルール

次に、ポアソンノイズに駆動される確率過程の微分ルールを説明する。ポアソンノイズのデルタ関数的特異性に由来して微分ルールが独特になる点を確認しよう。今、次の形の伊藤型 SDE を考える：

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + b(\hat{v}) \cdot \hat{\xi}_{y^*, \lambda}^P. \quad (3.13)$$

但し、ポアソンノイズはデルタ関数列を用いて

$$\hat{\xi}_{y^*, \lambda}^P(t) = \sum_{i=1}^{\infty} y^* \delta(t - \hat{t}_i). \quad (3.14)$$

として構築出来る。ここで、 \hat{v} の微分形式 $d\hat{v}(t) \equiv \hat{v}(t+dt) - \hat{v}(t)$ に注目しよう。微分形式 $d\hat{v}$ は次の値を取る。

$$d\hat{v}(t) = \begin{cases} b(\hat{v})y^* & (\hat{t}_i \in [t, t+dt]) \\ -a(\hat{v})dt & (\hat{t}_i \notin [t, t+dt]) \end{cases}. \quad (3.15)$$

ここで、ポアソンジャンプが存在している時は飛躍がある事に注意。

さてこの確率変数 \hat{v} に対して変数変換 $\hat{y} = f(\hat{v})$ を行う。ここで、 $f(\hat{v})$ は任意の滑らかな関数である。 $f(\hat{v})$ の微分形 $df(\hat{v}) \equiv f(\hat{v}(t+dt)) - f(\hat{v}(t))$ は次の値を取る：

$$df(\hat{v}(t)) = f(\hat{v}(t+dt)) - f(\hat{v}(t)) = \begin{cases} f(\hat{v} + b(\hat{v})y^*) - f(\hat{v}) & (\hat{t}_i \in [t, t+dt]) \\ -f'(\hat{v})a(\hat{v})dt & (\hat{t}_i \notin [t, t+dt]) \end{cases}. \quad (3.16)$$

ここで時刻 $t = \hat{t}_i$ において、式 (3.16) は導関数 $f'(\hat{v})$ を用いても簡単に記述出来ないことに注意。これは飛躍の幅 y^* が有限だからである。事実、式 (3.16) をテイラー展開すると打ち切ることが出来ず、

$$df(\hat{v}) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(d\hat{v})^n}{n!} \cdot \frac{d^n f(\hat{v})}{d\hat{v}^n}, \quad (3.17)$$

または

$$\frac{df(\hat{v})}{dt} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{(d\hat{v})^n}{dt} \cdot \frac{d^n f(\hat{v})}{d\hat{v}^n} \quad (3.18)$$

となる。ここで、 $(d\hat{v})^n$ と $(d^{n+1}f(\hat{v})/d\hat{v}^{n+1})$ の間の積は伊藤積の意味で定義されていることに注意。式 (3.16) は通常の微分ルール $(df(v)/dt) = (df(v)/dv)(dv/dt)$ とは違うため、確率過程において通常の微分ルールが適用できないことが自明に分かる。

3.4 ガウスノイズに対する微分ルール

次に、ガウスノイズに対する微分ルールを考えよう： $\hat{\xi}(t) = \hat{\xi}^G(t)$ (つまりレヴィ過程がウィーナー過程に置き換わる $\hat{L}(t) = \hat{W}(t)$)。ガウスノイズに対する微分ルールは非常に綺麗であり、ポアソンノイズの微分ルール (3.16) とは対照的であり、伊藤の公式と呼ばれている。

3.4.1 ガウスノイズの特別な性質 (伊藤ルール)

ホワイトガウスノイズには次の2つの特徴があり、これが数学的に重要である：

- (i) トラジェクトリーの連続性: トラジェクトリーが殆ど確かに連続な1変数確率過程であること、系のダイナミクスがガウス型SDEによって記述されることは等価である。ここでガウス型SDEとは次の形のSDEを指す： $(d\hat{v}/dt) = -a(\hat{v}) + b(\hat{v}) \cdot \hat{\xi}^G$ 。
- (ii) 伊藤ルール: ガウスノイズに関する微分形式は極めて単純で、非自明である。

性質 (i)： ガウスノイズが対称ポアソンノイズのジャンプ・ゼロの極限として定義されていたことを思いだそう。この観点から特徴 (i) は理解できる。事実、フォッカー・プランク方程式は空間的に局所的な方程式であり、経路が連続であることを示唆している。

性質 (ii)： 重要で非自明な特徴は (ii) である。式 (2.41) に表されるように、ガウスノイズ $\hat{\xi}^G$ (もしくはウィーナー過程 \hat{W}) の微分形式に関わる平均値は $O(dt)$ までで記述され、特に3次以降の項が消失している点が特徴である。著しいことに、この微分形式の関係式はアンサンブル平均抜きに拡張することが出来る：

$$(d\hat{W})^n = \begin{cases} dt & (n=2) \\ 0 & (n \geq 3) \end{cases}. \quad (3.19)$$

アンサンブル平均がない微分形式 (3.19) がガウスノイズの解析的な面からの特徴である。この関係式も、積分形でのみ意味を持つ。具体的には

$$\int_0^t (d\hat{W})^n f(\hat{v}) = \begin{cases} \int_0^t dt f(\hat{v}) & (n=2) \\ 0 & (n \geq 3) \end{cases}. \quad (3.20)$$

この関係式 (3.20) は平均 2 乗収束 (Mean Square Convergence) の意味で定義されている. 具体的には, 極限 $\Delta t \rightarrow 0$ で確率変数 \hat{A} が別の確率変数 \hat{B} に平均 2 乗収束の意味で等しいとは

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \langle (\hat{A} - \hat{B})^2 \rangle = 0 \quad (3.21)$$

を意味する. この意味で関係式 (3.20) を示す. まずは離散化された状態で計算を開始する:

$$\begin{aligned} & \left\langle \left[\sum_{i=0}^{N-1} f(\hat{v}_i) \Delta \hat{W}_i^2 - \sum_{i=0}^{N-1} f(\hat{v}_i) \Delta t_i \right]^2 \right\rangle \\ &= \left\langle \left[\sum_{i=0}^{N-1} f(\hat{v}_i) (\Delta \hat{W}_i^2 - \Delta t_i) \right]^2 \right\rangle \\ &= \left\langle \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} f(\hat{v}_i) f(\hat{v}_j) (\Delta \hat{W}_i^2 - \Delta t_i) (\Delta \hat{W}_j^2 - \Delta t_j) \right\rangle \\ &= \left\langle \underbrace{\sum_{i=0}^{N-1} f^2(\hat{v}_i) (\Delta \hat{W}_i^2 - \Delta t_i)^2}_{\text{過去}} \right\rangle + 2 \left\langle \underbrace{\sum_{i>j}^{N-1} f(\hat{v}_i) f(\hat{v}_j) (\Delta \hat{W}_j^2 - \Delta t_j) (\Delta \hat{W}_i^2 - \Delta t_i)}_{\text{過去}} \right\rangle \end{aligned} \quad (3.22)$$

よって, $\langle \Delta \hat{W}_i^2 \rangle = \Delta t_i$ と $\langle \Delta \hat{W}_i^4 \rangle = o(\Delta t_i)$ を使うと

$$\lim_{\substack{|\Delta t| \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \left\langle \left[\sum_{i=0}^{N-1} f(\hat{v}_i) \Delta \hat{W}_i^2 - \sum_{i=0}^{N-1} f(\hat{v}_i) \Delta t_i \right]^2 \right\rangle = 0 \quad (3.23)$$

であり, 関係式 (3.20) が $n = 2$ の場合に示された. $n \geq 3$ の場合も同様.

3.4.2 伊藤の公式

次に, 伊藤ルールを応用することでガウス型確率過程の微分ルール (伊藤の公式) を導出しよう. まず, 次のガウス型確率過程を考える:

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + b(\hat{v}) \cdot \hat{\xi}^G. \quad (3.24)$$

ポアソンノイズに対する微分公式 (3.18) を見て分かる通り, トラジェクトリーのジャンプに由来して, 確率過程の微分ルールは一般的に単純にはならない. これに対し, ガウス型の確率過程 (3.24) の微分ルールは極めて綺麗になることが予想される. 何故なら, ガウスノイズとは本質的にジャンプ幅がゼロの極限 (2.36) として定義されており, その結果としてテイラー展開の打ち切りが可能になることが予想されるからだ. 事実, 任意の滑らかな関数 $f(\hat{v})$ に対して次の伊藤の公式を得る:

$$df(\hat{v}) = \left[-\frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} a(\hat{v}) + \frac{1}{2} b^2(\hat{v}) \frac{d^2 f(\hat{v})}{d\hat{v}^2} \right] dt + b(\hat{v}) \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} \cdot d\hat{W}, \quad (3.25)$$

または

$$\frac{df(\hat{v})}{dt} = \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} \cdot \frac{d\hat{v}}{dt} + \frac{1}{2} b^2(\hat{v}) \frac{d^2 f(\hat{v})}{d\hat{v}^2}. \quad (3.26)$$

公式 (3.25) と (3.25) の導出は以下の通りである：まず式 (3.24) を Wiener 過程を用いて $d\hat{v} = -a(\hat{v})dt + b(\hat{v}) \cdot d\hat{W}$ と書き直す。すると、式 (3.18) は次の形に変形できる：

$$\begin{aligned} df(\hat{v}) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n f(\hat{v})}{d\hat{v}^n} \cdot \left(-a(\hat{v})dt + b(\hat{v}) \cdot d\hat{W} \right)^n \\ &= \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} \cdot \left(-a(\hat{v})dt + b(\hat{v}) \cdot d\hat{W} \right) + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n f(\hat{v})}{d\hat{v}^n} b^n(\hat{v}) \cdot (d\hat{W})^n. \end{aligned} \quad (3.27)$$

但し、 $dt d\hat{W} = 0$ を用いた。次に伊藤ルール (3.19) を用いることで公式 (3.25) と (3.26) が得られる。重要な事は、公式 (3.25) と (3.26) は平均値に対してのみ成立するのではなく、シングル・トラジェクトリーに対してさえも成立するという点である。

3.4.3 フォッカー・プランク方程式

次にフォッカー・プランク方程式を一般のガウス型 SDE (3.24) に対して導出しよう。SDE (3.24) のマスター方程式であるフォッカー・プランク方程式は次の式で与えられる：

$$\frac{\partial P(v, t)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial v} a(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b^2(v) \right] P(v, t). \quad (3.28)$$

この式の導出方法は以下のようにになる。任意の滑らかな関数 $f(\hat{v})$ に対して、伊藤の公式を適応することで次の恒等式が得られる。

$$\left\langle \frac{df(\hat{v})}{dt} \right\rangle = \left\langle -\frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} a(\hat{v}) + \frac{1}{2} b^2(\hat{v}) \frac{d^2 f(\hat{v})}{d\hat{v}^2} \right\rangle + \left\langle \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} b(\hat{v}) \cdot \hat{\xi}^G \right\rangle. \quad (3.29)$$

伊藤積分の性質である $\left\langle (df(\hat{v})/d\hat{v})b(\hat{v}) \cdot \hat{\xi}^G \right\rangle = 0$ を用いると、次の恒等式に変形できる：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} dv P(v, t) f(v) &= \int_{-\infty}^{\infty} dv P(v, t) \left[-\frac{df(v)}{dv} a(v) + \frac{1}{2} b^2(v) \frac{d^2 f(v)}{dv^2} \right] \\ \iff \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \frac{\partial}{\partial t} P(v, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \left[\frac{\partial}{\partial v} a(v) P(v, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b^2(v) P(v, t) \right]. \end{aligned} \quad (3.30)$$

但し、この計算過程で部分積分を用いた。ここで式 (3.30) は任意の滑らかな関数について成立するので、フォッカー・プランク方程式 (3.28) が導出される。

3.5 練習問題

3.5.1 伊藤の公式の一般化

(1) 関数 $f(\hat{W})$

任意の関数 $f(\hat{W})$ に対して、伊藤の公式は

$$df(\hat{W}) = \frac{df(\hat{W})}{d\hat{W}} d\hat{W} + \frac{1}{2} \frac{d^2 f(\hat{W})}{d^2 \hat{W}} dt \quad (3.31)$$

であることを示せ。

(2) 関数 $f(\hat{W}, t)$

任意の関数 $f(\hat{W}, t)$ に対して、伊藤の公式は

$$df(\hat{W}, t) = \frac{\partial f(\hat{W}, t)}{\partial \hat{W}} d\hat{W} + \frac{\partial f(\hat{W}, t)}{\partial t} dt + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(\hat{W}, t)}{\partial^2 \hat{W}} dt \quad (3.32)$$

であることを示せ.

3.5.2 ブラック・ショールズ方程式

次の伊藤型のブラックショールズモデルを考える（伊藤積の記号“ \cdot ”は省略）：

$$d\hat{S} = \mu \hat{S} dt + \sigma \hat{S} d\hat{W}, \quad \hat{W}(0) = 0. \quad (3.33)$$

伊藤の公式 (3.32) を使うことで、この確率微分方程式の解が次の形（幾何ブラウン運動）になることを示せ：

$$\hat{S}(t) = S_0 \exp \left\{ \left(\mu - \frac{\sigma^2}{2} \right) t + \sigma \hat{W}(t) \right\}. \quad (3.34)$$

但し、解の一意性を仮定してよい。このことから、対数価格 $\log S(t)$ がドリフト付きのブラウン運動になることがわかる：

$$\log S(t) = \log S_0 + \left(\mu - \frac{\sigma^2}{2} \right) t + \sigma \hat{W}(t). \quad (3.35)$$

Chapter 4

確率現象のモデリング：分子運動論の数理

ここまででは確率過程にまつわる数理的なテクニックについて解説してきた。これによって、問題設定が与えられさえすれば原理上様々な量の計算が可能になったと思われる。一方で、実際の現象を研究するには数学的テクニックというよりは、「問題を如何に設定するか」のほうが問題になると思われる。こういったモデリング手法の問題は、物理現象のみならず、様々な現象（e.g., 社会現象、生物物理現象、化学反応）を確率過程の枠組みに落とし込む際に問題になる。そこでこの章では、物理現象のブラウン運動を微視的な設定からモデル化するための数理手法として、分子運動論の数理 [27–29] を取り上げる。具体的にはミクロな階層を記述するニュートン力学を出発点に、ブラウン粒子の運動を記述する確率モデルを、体系的な近似を用いて導出しておく。この章の内容は文献 [9] の原稿をもとに、適時加筆しながら執筆したことを明記しておく。

4.1 動機

ここで分子運動論の数理の流れをモデリングの観点から簡単に説明しておく。分子運動論とは

【気体を構成するミクロな要素が「原子・分子」というミクロモデルで記述することができ、それらは我々が知っているマクロ系のニュートン力学に従っている】という仮説のもとで、マクロな現象（気体の性質やブラウン運動）を記述するマクロモデルを導出する

という枠組みである¹。特に今回は、ブラウン運動周りの様々な確率モデルをミクロな個別具体的な設定から導出していくことに焦点を置いて解説する。

ブラウン運動という単語を聞いたときに最も素朴に浮かぶ設定は図 4.1(a) のような 3 次元空間でのブラウン運動であろう。しかし「ブラウン運動」という単語が、「熱揺らぎに駆動されるマクロな粒子」を一般的に指すのだとすると、様々な設定を考えることができる。例えば、図 4.1(b) のようなレイリーピストンと呼ばれるより単純な 1 次元ブラウン運動を考えることもできる。更に、図 4.1(c) のように異なる温度の熱浴 2 つに接触するブラウン・ラチェットを考えることもできる。特にブラウン・ラチェットは非平衡定常状態のブラウン運動であるが、この場合どの向きに歯車は回転するだろうか？このような複雑なブラウン運動を、ミクロな設定をもとに、力学的に正しい確率モデルを構築する指針はないだろうか？このような疑問は平衡統計力学を学んだものならば自然な疑問だと筆者は考えている。なぜなら平衡統計力学では、個別具体的なミクロな設定（ハミルトニアン）を与えると、平衡系に関するマクロな物理量を予言する熱力学関数が対応して導出されるからだ。同様のことが、揺ら

¹もちろん低温状態の細かい性質まで調べていくなれば、動力学として量子力学を採用する必要があったり、逆に原子がばらばらになってプラズマ化してしまうような超高温では、原子・分子というモデルが破綻し、原子核・電子というモデルを採用する必要があるかもしれないもっと極端にエネルギースケールを大きくとれば、クォークのレベルまでモデル化する必要があるかもしれない。しかし、今回は量子効果が効かない程度に高温で、原子・分子モデルが適応できる程度の適温の気体だけを対象とする。

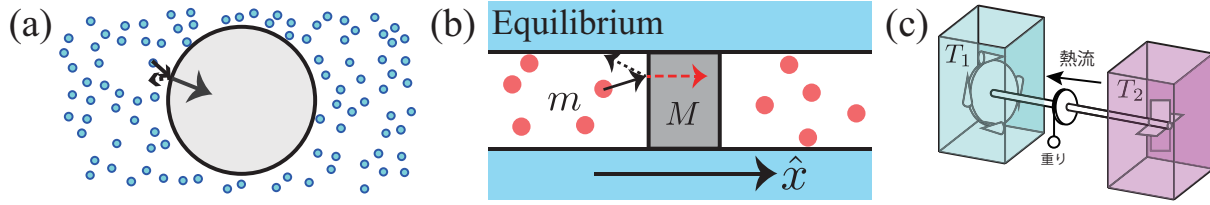


Figure 4.1: (a) 3次元ブラウン運動. (b) 1次元ブラウン運動（レイリーピストン，文献 [9] のものを改変して引用）. (c) ブラウンラチェット（文献 [26] の画像を縮小して引用．この設定は文献 [36] に基づく．）

ぎを含んだ確率モデルに対してできると，揺らぎに関する統計力学が完成したことになる．こういったことは，例えば生物物理，化学，ひいては社会科学で現れる「揺らぎ」をモデリングする際にも問題になる．

このノートにおいて，分子運動論は上記の動機を解決する一つの処方箋として解説される．例えば上記の3種類のブラウン運動のように，個別的具体的なミクロな設定が与えられたときに，その対応する確率モデルを分子運動論の枠組みから体系的に導出することができる．もちろん分子運動論というのは希薄気体にしか使えないという弱点もあるが，ある一つのモデルケースとしてその価値は現代でも失われていないと筆者は考えている．特に分子運動論の枠組みは希薄気体であれば非平衡状態であっても適応が可能であるというメリットがあり，非平衡状態の熱浴をも直接扱うことが可能である．

4.2 あらすじ

この章では，上記の動機をもとに分子運動論の数理を解説していく．分子運動論の基礎方程式はボルツマン方程式である．ボルツマン方程式は十分希薄な気体に対して，一体分布関数を記述する方程式であり，ニュートン力学から導出が可能である．ここでは特に，Bogoliubov, Born, Green, Kirkwood, Yvon (BBGKY) が発展させた方法をベースに説明する：まず，剛体球気体のハミルトン系に対して，擬 Liouville 方程式を導出する [28, 29]．次に擬 Liouville 方程式に恒等変形を施すことで，少数体の分布関数の時間発展を階層的に明らかにする (BBGKY 階層構造)．更に分子カオスを仮定することでボルツマン方程式・線形ボルツマンを導出する．最後に，解析的にわかりやすい例としてレイリーピストンをあつかう [30-33]．この章では i, j, k はすべて正の整数とし ($i, j, k \geq 1$)， α, β は非負整数とする ($\alpha, \beta \geq 0$)．

4.3 トイモデルの擬リュウビル方程式

剛体球系の分子運動論の計算はなかなか複雑なので，その本質をとらえるためにトイモデルで最初に計算練習を試みよう．初期条件が $\hat{x} = x_0$ ， $\hat{v} = v_0$ の粒子があり，壁が $x = x_c$ に固定されているとする ($x_c \geq x_0$ を仮定)．系の動力学は δ 関数型のパルスを用いて，次のような決定論的方程式に従う (図 4.2):

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -2\hat{v}\delta(t - \hat{t}_c), \quad \frac{d\hat{x}}{dt} = \hat{v}, \quad (4.1)$$

ここで \hat{t}_c は衝突時刻であり次の条件を充たす：

$$\hat{x}(\hat{t}_c) = x_c, \quad \hat{v}(\hat{t}_c) > 0. \quad (4.2)$$

ここで， $\hat{v}\delta(t - \hat{t}_c)$ の項は伊藤型の積で定義されているとする： $\hat{v}(t)\delta(t - \hat{t}_c) \equiv \hat{v}(t - 0)\delta(t - \hat{t}_c) = v_0\delta(t - \hat{t}_c)$ ．この章では δ 関数の積はすべて伊藤型だと仮定する．この系の確率分布関数 $P_t(v, x)$ の時

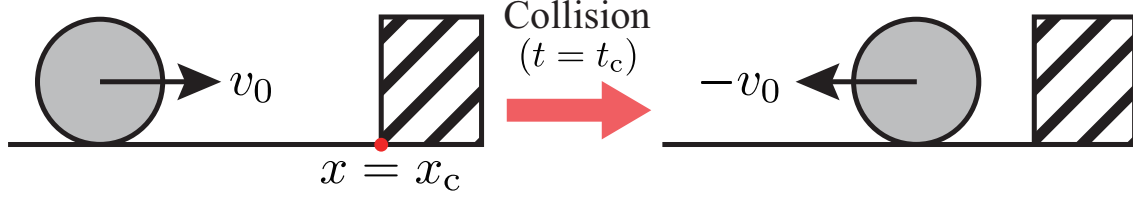


Figure 4.2: 決定論的衝突のポンチ絵（文献 [9] より引用）． $x = x_c$ にある壁に時刻 $t = t_c$ に衝突する一次元の粒子運動を考えている．

間発展方程式は次のような擬 Liouville 方程式に従う：

$$\frac{\partial P_t(v, x)}{\partial t} = [P_t(-v, x)\Theta(-v) - P_t(v, x)\Theta(v)]|v|\delta(x - x_c) - \frac{\partial P_t(v, x)}{\partial x}v. \quad (4.3)$$

ここでヘビサイド関数 $\Theta(v)$ は次の式で定義される： $v > 0$ の時は $\Theta(v) = 1$ ， $v < 0$ の時は $\Theta(v) = 0$ ， $v = 0$ の時は $\Theta(0) = 1/2$ ． $P_t(v, x)$ は系の状態が時刻 t に $(\hat{v}, \hat{x}) \in [v, v + dv] \times [x, x + dx]$ の領域にある確率を $P_t(v, x)dvd x$ として特徴づける．これは剛体球多体系の擬 Liouville 方程式のもっとも簡単な場合の式になっている．項の解釈としては次のようになる：

$$\frac{\partial P_t(v, x)}{\partial t} = \underbrace{P_t(-v, x)\Theta(-v)|v|\delta(x - x_c)}_{\text{流入項}} - \underbrace{P_t(v, x)\Theta(v)|v|\delta(x - x_c)}_{\text{流出項}} + \underbrace{\left(-\frac{\partial P_t(v, x)}{\partial x}v\right)}_{\text{移流項}}. \quad (4.4)$$

導出方法： δ 関数の恒等式に着目する：

$$\delta(f(t)) = \sum_k \frac{\delta(t - t_k)}{|f'(t_k)|} \iff g(t)\delta(f(t)) = \sum_k \frac{g(t_k)}{|f'(t_k)|} \delta(t - t_k), \quad (4.5)$$

ここで $f(t)$ と $g(t)$ は任意の関数であり， t_k は $f(t)$ の k 番目のゼロ点である．つまり， $f(t_k) = 0$ と $t_k \leq t_{k+1}$ を充たす ($f'(t_k)$ は非ゼロだと仮定する： $f'(t_k) \neq 0$)．任意の関数 $f(\hat{v}, \hat{x})$ の時間微分は

$$\begin{aligned} \frac{df(\hat{v}, \hat{x})}{dt} &= [f(\hat{v} - 2\hat{v}, \hat{x}) - f(\hat{v}, \hat{x})]\delta(t - \hat{t}_c) + \frac{\partial f(\hat{v}, \hat{x})}{\partial \hat{x}}\hat{v} \\ &= [f(-\hat{v}, \hat{x}) - f(\hat{v}, \hat{x})]|\hat{v}|\delta(\hat{x} - x_c)\Theta(\hat{v}) + \frac{\partial f(\hat{v}, \hat{x})}{\partial \hat{x}}\hat{v}, \end{aligned} \quad (4.6)$$

とかける．ここで恒等式 (4.5) を用いて $\delta(t - \hat{t}_c) = |d(\hat{x} - x_c)/dt|\delta(\hat{x} - x_c)\Theta(\hat{v}) = |\hat{v}|\delta(\hat{x} - x_c)\Theta(\hat{v})$ という風に分解した．両辺の期待値をとって，次の恒等式を得る：

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dv dx \frac{\partial P_t(v, x)}{\partial t} f(v, x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dv dx P_t(v, x) \left\{ [f(-v, x) - f(v, x)]|v|\delta(x - x_c)\Theta(v) + \frac{\partial f(v, x)}{\partial x}v \right\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dv dx f(v, x) \left\{ [P_t(-v, x)\Theta(-v) - P_t(v, x)\Theta(v)]|v|\delta(x - x_c) - \frac{\partial P_t(v, x)}{\partial x}v \right\}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

ただし途中で部分積分を用いた．この恒等式は任意の関数 $f(\hat{v}, \hat{x})$ に対して成立するので，式 (4.3) がトイモデル (4.1) のマスター方程式として導出される．この計算方法が節 4.4 でのボルツマン方程式の導出の基礎となるテクニックとなる．

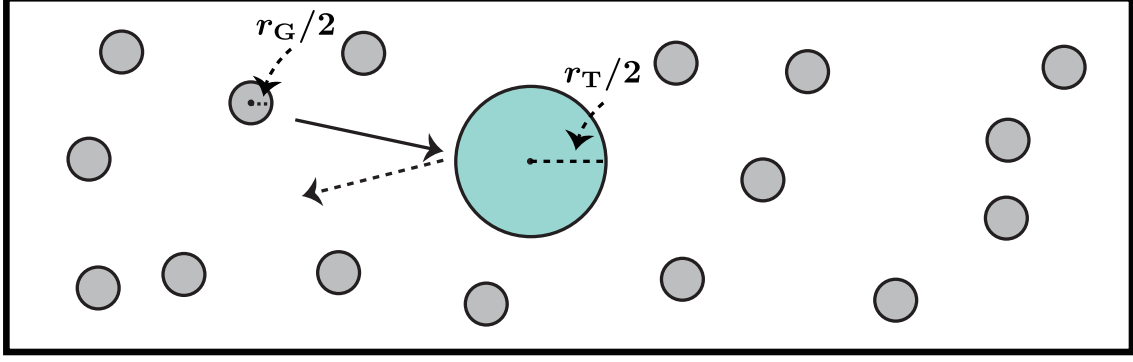


Figure 4.3: 多数のガス粒子とトレーサー粒子. 十分希薄なガスであり, 全粒子が剛体球だと仮定した. 文献 [9] より引用.

解: トイモデル (4.1) は非常に簡単なモデルなので, その挙動が直観から直ちにわかる. 具体的には分布関数は次のようにふるまうはずである:

$$P_t(v, x) = \begin{cases} \delta(v - v_0)\delta(x - x_0 - v_0t) & (t < \hat{t}_c) \\ \delta(v + v_0)\delta(x - x_0 + v_0t) & (t > \hat{t}_c) \end{cases} \quad (4.8)$$

$t = \hat{t}_c$ での, この解の切り替えがうまく擬 Liouville 方程式 (4.3) から導出できることを示そう. $t < \hat{t}_c$ では, 式 (4.3) がただの移流方程式になるのでこの解は正しい. $t = \hat{t}_c$ 近傍では, 小さい正数 ε をとって式 (4.3) の両辺を時間積分すると

$$\begin{aligned} P_{\hat{t}_c+\varepsilon}(v, x) &= P_{\hat{t}_c-\varepsilon}(v, x) + \int_{\hat{t}_c-\varepsilon}^{\hat{t}_c+\varepsilon} dt [P_t(-v, x)\Theta(-v) - P_t(v, x)\Theta(v)]|v|\delta(x - x_c) + O(\varepsilon) \\ &= P_{\hat{t}_c-\varepsilon}(v, x) + \int_{\hat{t}_c-\varepsilon}^{\hat{t}_c+\varepsilon} dt [\delta(v + v_0)\delta(x - x_0 - v_0t)\Theta(-v) - \delta(v - v_0)\delta(x - x_0 - v_0t)\Theta(v)]|v|\delta(x - x_c) + O(\varepsilon) \\ &= \delta(v + v_0)\delta(x - x_c) + \underbrace{[\delta(v + v_0)\delta(x - x_c)]}_{\text{流入項}} - \underbrace{[\delta(v - v_0)\delta(x - x_c)]}_{\text{流出項}} + O(\varepsilon) = \delta(v + v_0)\delta(x - x_c) + O(\varepsilon) \end{aligned} \quad (4.9)$$

である. 但し $v_0 > 0$ を用いた. よって, 速度が衝突によって $v_0 \rightarrow -v_0$ に切り替わることが正しく表現されている.

4.4 多体剛体球系の擬 Liouville 方程式

4.4.1 設定

ガス粒子・トレーサー粒子の質量を m, M とする. ガス粒子の個数は N であり, i 番目のガス粒子の位置・速度を \hat{x}_i, \hat{v}_i と記述する. トレーサー粒子の位置・速度を $\hat{X} = \hat{x}_0, \hat{V} = \hat{v}_0$ と書く. 系の運動方程式は次のように与えられる (図 4.3 を参照):

$$\frac{d\hat{x}_i}{dt} = \hat{v}_i, \quad \frac{d\hat{v}_i}{dt} = -\frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial \hat{x}_i}, \quad \frac{d\hat{X}}{dt} = \hat{V}, \quad \frac{d\hat{V}}{dt} = -\frac{1}{M} \frac{\partial U}{\partial \hat{X}}. \quad (4.10)$$

ポテンシャルは

$$U(\hat{X}, \hat{x}_1, \dots, \hat{x}_N) = \sum_{\alpha} U_{\text{EX}}(\hat{x}_{\alpha}) + \sum_{j < k} U_{\text{GG}}(|\hat{x}_j - \hat{x}_k|) + \sum_j U_{\text{TG}}(|\hat{x}_j - \hat{X}|) \quad (4.11)$$

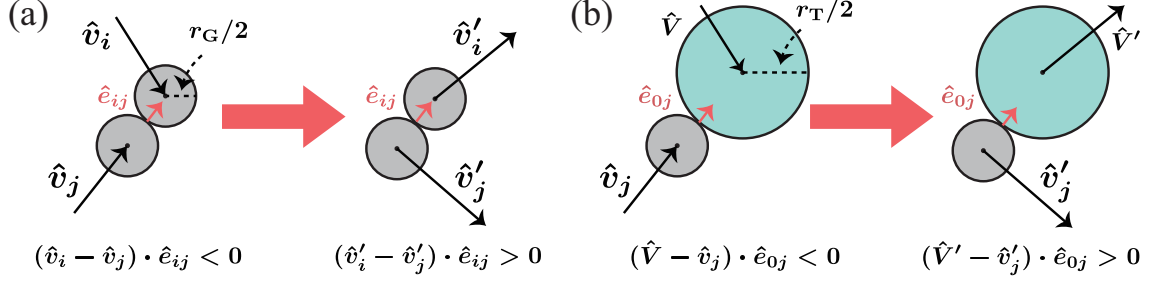


Figure 4.4: (a) 2つのガス粒子間の衝突. (b) ガス粒子とトレーサー粒子との衝突（レイリーピストン, 文献 [9] のものを改変して引用）.

であり, U_{EX} は外部的な閉じ込めポテンシャル, U_{GG} はガス粒子の相互作用, U_{TG} はトレーサー粒子とガスの相互作用とする. ガス粒子・トレーサー粒子がともに剛体の3次元の箱（体積 L^3 ）に閉じ込められているときは, U_{EX} は次の式として書ける:

$$U_{\text{EX}}(\hat{x}_\alpha) = \begin{cases} 0 & (\hat{x}_\alpha \in [0, L]^3) \\ \infty & (\hat{x}_\alpha \notin [0, L]^3) \end{cases}. \quad (4.12)$$

4.4.2 剛体球ポテンシャルと衝突ルール

相互作用ポテンシャルを剛体球ポテンシャルを採用する. 粒子が十分硬い球でできているとき, 相互作用ポテンシャルは

$$U_{\text{GG}}(r) = \begin{cases} 0 & (r > r_G) \\ \infty & (r \leq r_G) \end{cases}, \quad U_{\text{TG}}(r) = \begin{cases} 0 & (r > (r_G + r_T)/2) \\ \infty & (r \leq (r_G + r_T)/2) \end{cases} \quad (4.13)$$

と書ける. ここで r_G はガス粒子の直径であり, r_T はトレーサー粒子の直径である. この極限ではポテンシャルの微分が well-defined ではないので, 衝突ルールを明示的に考える必要がある.

ガス粒子間の衝突: 手始めにガス粒子間の衝突を考えてみよう (図 4.4). i 番目の粒子と j 番目の粒子間の衝突条件は

$$|\hat{x}_i - \hat{x}_j| = r_G, \quad (\hat{v}_i - \hat{v}_j) \cdot \hat{e}_{ij} < 0 \quad (4.14)$$

で与えられる. ただし, $\hat{e}_{ij} \equiv (\hat{x}_i - \hat{x}_j)/|\hat{x}_i - \hat{x}_j|$ は球の中心同士を結ぶ単位法線ベクトルである. 衝突後の速度 \hat{v}'_i , \hat{v}'_j は運動量交換, エネルギー保存則, 滑りなし条件²で決まる.

$$m\hat{v}_i + m\hat{v}_j = m\hat{v}'_i + m\hat{v}'_j, \quad \frac{m}{2}\hat{v}_i^2 + \frac{m}{2}\hat{v}_j^2 = \frac{m}{2}\hat{v}'_i{}^2 + \frac{m}{2}\hat{v}'_j{}^2, \quad \hat{v}'_i - \hat{v}_i \propto \hat{e}_{ij} \quad (4.15)$$

この方程式を解くと衝突後速度を得る (図 4.4a):

$$\hat{v}'_i = \hat{v}_i - [(\hat{v}_i - \hat{v}_j) \cdot \hat{e}_{ij}] \hat{e}_{ij}, \quad \hat{v}'_j = \hat{v}_j + [(\hat{v}_i - \hat{v}_j) \cdot \hat{e}_{ij}] \hat{e}_{ij}. \quad (4.16)$$

\hat{v}'_i と \hat{v}'_j は関係 $(\hat{v}'_i - \hat{v}'_j) \cdot \hat{e}_{ij} > 0$ を満たす.

ガス粒子とトレーサー粒子間の衝突: ガス粒子とトレーサー粒子との間の衝突に対して, 上記と同様の計算を行う衝突後速度は

$$\hat{V}' = \hat{V} - \frac{2m}{m+M} [(\hat{V} - \hat{v}_j) \cdot \hat{e}_{0j}] \hat{e}_{0j}, \quad \hat{v}'_j = \hat{v}_j + \frac{2M}{m+M} [(\hat{V} - \hat{v}_j) \cdot \hat{e}_{0j}] \hat{e}_{0j} \quad (4.17)$$

で与えられる. ただし, $\hat{e}_{0j} \equiv (\hat{X} - \hat{x}_j)/|\hat{X} - \hat{x}_j|$ は法線ベクトルである (図 4.4(b)).

²表面での接線方向の摩擦がなく, 衝突力が回転に影響を及ぼさない条件.

動力学： 衝突ルールに従ってニュートン力学を書き直す。ここでは表記の簡約化のため、トレーサー粒子も $\alpha = 0$ として統一的に記述する。 α 番目の粒子と β 番目の粒子が k 回目に衝突する時刻を $\hat{t}_{k;\alpha\beta}$ とする³。この衝突時系列 $\{\hat{t}_{k;\alpha\beta}\}$ を用いると、次のように動力学が書ける：

$$\frac{d\hat{\mathbf{x}}_\alpha}{dt} = \hat{\mathbf{v}}_\alpha, \quad \frac{d\hat{\mathbf{v}}_\alpha}{dt} = -\frac{1}{m_\alpha} \frac{\partial U_{\text{EX}}}{\partial \hat{\mathbf{x}}_\alpha} + \sum_\beta' \sum_{k=1}^{\infty} \hat{\mathbf{F}}_{\alpha;\beta} \delta(t - \hat{t}_{k;\alpha\beta}). \quad (4.18)$$

ここで、プライムがついた和の記号 \sum_β' のなかでは $\beta \neq \alpha$ を仮定する。また、衝突の劇力の大きさは

$$\hat{\mathbf{F}}_{\alpha;\beta} = -\frac{2m_\beta}{m_\alpha + m_\beta} [(\hat{\mathbf{v}}_\alpha - \hat{\mathbf{v}}_\beta) \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\alpha\beta}] \hat{\mathbf{e}}_{\alpha\beta} \quad (4.19)$$

である。ただし、 $m_0 = M$, $m_i = m$ とする。衝突の時系列 $\{\hat{t}_{k;\alpha\beta}\}$ は衝突条件から一意に決定される：

$$|\hat{\mathbf{x}}_\alpha(\hat{t}_{k;\alpha\beta}) - \hat{\mathbf{x}}_\beta(\hat{t}_{k;\alpha\beta})| = (r_\alpha + r_\beta)/2, \quad (\hat{\mathbf{v}}_\alpha(\hat{t}_{k;\alpha\beta}) - \hat{\mathbf{v}}_\beta(\hat{t}_{k;\alpha\beta})) \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\alpha\beta}(\hat{t}_{k;\alpha\beta}) < 0. \quad (4.20)$$

但し、 $\alpha = 0$ では $r_\alpha = r_T$ であり、 $\alpha \neq 0$ では $r_\alpha = r_G$ である。

Direct collision と inverse collision： 公式 (4.19) は初期速度 $(\hat{\mathbf{v}}_\alpha, \hat{\mathbf{v}}_\beta)$ を出発点に、衝突後速度 $(\hat{\mathbf{v}}'_\alpha, \hat{\mathbf{v}}'_\beta)$ を予言する。分子運動論の文脈 [29] では、この手の衝突を *direct collision* と呼ぶ。その反対として、*inverse collision* と呼ばれる別種の衝突の見方も重要である：inverse collision とは衝突後速度 $(\hat{\mathbf{v}}'_\alpha, \hat{\mathbf{v}}'_\beta)$ から初期速度 $(\hat{\mathbf{v}}_\alpha, \hat{\mathbf{v}}_\beta)$ を逆推定することを指す。つまり、初期速度 $(\hat{\mathbf{v}}_\alpha, \hat{\mathbf{v}}_\beta)$ を衝突後速度 $(\hat{\mathbf{v}}'_\alpha, \hat{\mathbf{v}}'_\beta)$ の関数として陽に書き下して、

$$\hat{\mathbf{v}}_\alpha = \hat{\mathbf{v}}'_\alpha + \hat{\mathbf{F}}'_{\alpha;\beta}, \quad \hat{\mathbf{F}}'_{\alpha;\beta} \equiv -\frac{2m_\beta}{m_\alpha + m_\beta} [(\hat{\mathbf{v}}'_\alpha - \hat{\mathbf{v}}'_\beta) \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\alpha\beta}] \hat{\mathbf{e}}_{\alpha\beta}. \quad (4.21)$$

となる。ここで direct collision の公式 (4.19) と inverse collision の公式 (4.21) が全く同じ形であることは注目に値する。これは今、弾性衝突のみを考えており、時間反転対称性があることに起因している。その意味で、弾性衝突を考える際には両者の区別はあまり必要ない。一方で、非弾性衝突（粉体）を考えると時間反転対称性が破れ、両者の形状が変化し、両者の区別が本質になる。

4.4.3 擬 Liouville 方程式

次に位相空間上の状態点の動力学方程式を導出する。位相空間上の状態点を

$$\hat{\Gamma}(t) \equiv (\hat{\mathbf{V}}, \hat{\mathbf{X}}; \hat{\mathbf{v}}_1, \hat{\mathbf{x}}_1; \dots; \hat{\mathbf{v}}_N, \hat{\mathbf{x}}_N) \quad (4.22)$$

として定義する。また、位相分布関数を $P_t^{(N)}(\Gamma)$ として定義する。位相分布関数は状態点が $\hat{\Gamma} \in \prod_\alpha [v_\alpha, v_\alpha + dv_\alpha] \times [x_\alpha, x_\alpha + dx_\alpha]$ の領域にある確率を $P_t^{(N)}(\Gamma) d\Gamma$ として特徴づける。ただし $d\Gamma \equiv \prod_\alpha dv_\alpha dx_\alpha$ は体積要素である。この位相分布関数は次の擬 Liouville 方程式に従う：

$$\frac{D^{(N)}}{Dt} P_t^{(N)}(\Gamma) = \sum_{\alpha < \beta} \left[P_t^{(N)}(\Gamma + \Delta\Gamma_{\alpha;\beta}) \Theta(\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) - P_t^{(N)}(\Gamma) \Theta(-\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \right] |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}). \quad (4.23)$$

但し、 $\mathbf{v}_{\alpha\beta} \equiv \mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta$, $\mathbf{x}_{\alpha\beta} \equiv \mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_\beta$, $r_{\alpha\beta} \equiv (r_\alpha + r_\beta)/2$ であり、(通常の) Liouville 演算子 $D^{(N)}/Dt$ は

$$\frac{D^{(N)}}{Dt} \equiv \left[\frac{\partial}{\partial t} + \sum_\alpha \left(\mathbf{v}_\alpha \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_\alpha} - \frac{1}{m_\alpha} \frac{\partial U_{\text{EX}}}{\partial \mathbf{x}_\alpha} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_\alpha} \right) \right] \quad (4.24)$$

で定義される。また、衝突撃力は $\Delta\Gamma_{\alpha;\beta} \equiv (\mathbf{0}, \dots, \mathbf{0}; \overbrace{\mathbf{F}_{\alpha;\beta}}^\alpha; \mathbf{0}, \mathbf{0}, \dots, \mathbf{0}; \overbrace{\mathbf{F}_{\beta;\alpha}}^\beta; \mathbf{0}, \mathbf{0}, \dots, \mathbf{0})$ である。

³同じペアで複数回ぶつかる可能性があるため、 k も指定する必要がある。

導出： 任意の関数 $f(\Gamma(t))$ に対して時間変動を考える． $f(\Gamma(t))$ の時間変化は次の式で与えられる．

$$\frac{df}{dt} = \sum_{\alpha} \left(\mathbf{v}_{\alpha} \frac{\partial f}{\partial \hat{\mathbf{x}}_{\alpha}} - \frac{1}{m_{\alpha}} \frac{\partial U_{\text{EX}}}{\partial \mathbf{x}_{\alpha}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}_{\alpha}} \right) + \sum_{\alpha < \beta} \sum_{k=1}^{\infty} \left[f(\hat{\Gamma} + \Delta \hat{\Gamma}_{\alpha;\beta}) - f \right] \delta(t - \hat{t}_{k;\alpha\beta}). \quad (4.25)$$

恒等式 (4.25) を次のように変形しよう，

$$\begin{aligned} & \frac{df}{dt} - \sum_{\alpha} \hat{\mathbf{v}}_{\alpha} \frac{\partial f}{\partial \hat{\mathbf{x}}_{\alpha}} + \sum_{\alpha} \frac{1}{m_{\alpha}} \frac{\partial U_{\text{EX}}}{\partial \mathbf{x}_{\alpha}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}_{\alpha}} \\ &= \sum_{\alpha < \beta} \left[f(\hat{\Gamma} + \Delta \hat{\Gamma}_{\alpha;\beta}) - f \right] |\hat{\mathbf{v}}_{\alpha\beta} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\alpha\beta}| \Theta(-\hat{\mathbf{v}}_{\alpha\beta} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\alpha\beta}) \delta(|\hat{\mathbf{x}}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}). \end{aligned} \quad (4.26)$$

但し， $\hat{\mathbf{v}}_{\alpha\beta} \equiv \hat{\mathbf{v}}_{\alpha} - \hat{\mathbf{v}}_{\beta}$ ， $\hat{\mathbf{x}}_{\alpha\beta} \equiv \hat{\mathbf{x}}_{\alpha} - \hat{\mathbf{x}}_{\beta}$ であり， 関係式

$$\sum_{k=1}^{\infty} \hat{\mathbf{F}}_{\alpha;\beta} \delta(t - \hat{t}_{k;\alpha\beta}) = \hat{\mathbf{F}}_{\alpha;\beta} \left| \frac{d}{dt} (|\hat{\mathbf{x}}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \right| \delta(|\hat{\mathbf{x}}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \Theta(-\hat{\mathbf{v}}_{\alpha\beta} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{ij}) \quad (4.27)$$

を用いた．この恒等式は式 (4.5) と

$$\frac{d|\hat{\mathbf{x}}_{\alpha\beta}|}{dt} = \hat{\mathbf{v}}_{\alpha\beta} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\alpha\beta} \quad (4.28)$$

を用いて導出される⁴．両辺の平均をとると次の恒等式を得る，

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} d\Gamma \left[\frac{\partial P_t^{(N)}(\Gamma)}{\partial t} f(\Gamma) + \sum_{\alpha} \left(-\mathbf{v}_{\alpha} \frac{\partial f(\Gamma)}{\partial \mathbf{x}_{\alpha}} + \frac{1}{m_{\alpha}} \frac{\partial U_{\text{EX}}}{\partial \mathbf{x}_{\alpha}} \frac{\partial f(\Gamma)}{\partial \mathbf{v}_{\alpha}} \right) P_t^{(N)}(\Gamma) \right] \\ &= \sum_{\alpha < \beta} \int_{-\infty}^{\infty} d\Gamma P_t^{(N)}(\Gamma) [f(\Gamma + \Delta \Gamma_{\alpha;\beta}) - f(\Gamma)] |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \Theta(-\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}). \end{aligned} \quad (4.30)$$

ここで direct collision と inverse collision の関係式の表記を導入しておく：

$$\Gamma \equiv (\dots, \mathbf{v}_{\alpha}, \dots, \mathbf{v}_{\beta}, \dots) \rightarrow \Gamma' \equiv (\dots, \mathbf{v}'_{\alpha}, \dots, \mathbf{v}'_{\beta}, \dots) = \Gamma + \Delta \Gamma_{\alpha;\beta}(\Gamma), \quad (4.31)$$

$$\Gamma' \equiv (\dots, \mathbf{v}'_{\alpha}, \dots, \mathbf{v}'_{\beta}, \dots) \rightarrow \Gamma \equiv (\dots, \mathbf{v}_{\alpha}, \dots, \mathbf{v}_{\beta}, \dots) = \Gamma' + \Delta \Gamma'_{\alpha;\beta}(\Gamma'). \quad (4.32)$$

ここで，今は弾性衝突を考えているので変数変換 $\Gamma \rightarrow \Gamma'$ で体積要素が変化しない ($d\Gamma = d\Gamma'$) 点に注意⁵．また，弾性衝突では direct collision と inverse collision は時間反転対称性のせいで関数形が一致する：

$$\Delta \Gamma'_{\alpha;\beta}(\Gamma') = \Delta \Gamma_{\alpha;\beta}(\Gamma') \quad (4.33)$$

結果，次の恒等変形を得る：

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} d\Gamma P_t^{(N)}(\Gamma) f(\Gamma') |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \Theta(-\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\Gamma' P_t^{(N)}(\Gamma' + \Delta \Gamma'_{\alpha;\beta}) f(\Gamma') |\mathbf{v}'_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \Theta(\mathbf{v}'_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \end{aligned} \quad (4.34)$$

⁴簡単のため2次元の場合に証明しよう． $\hat{\mathbf{x}} = (x, y)$ に対して微分すると次のようになる：

$$\frac{d|\hat{\mathbf{x}}|}{dt} = \frac{d}{dt} \sqrt{x^2 + y^2} = \frac{1}{2\sqrt{x^2 + y^2}} \left(2x \frac{dx}{dt} + 2y \frac{dy}{dt} \right) = \frac{\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{v}}}{|\hat{\mathbf{x}}|} = \hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{e}}. \quad (4.29)$$

⁵粉体のように非弾性衝突を行う場合は位相空間での体積が段々縮小するので，定数項が補正として現れる [29]．

但し, $d\mathbf{\Gamma} = d\mathbf{\Gamma}'$, および $\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta} = -\mathbf{v}'_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}$. 更にダミ変数の表記を変え ($\mathbf{\Gamma}' \rightarrow \mathbf{\Gamma}$), $\Delta\mathbf{\Gamma}'_{\alpha;\beta}(\mathbf{\Gamma}) = \Delta\mathbf{\Gamma}_{\alpha;\beta}(\mathbf{\Gamma})$ に着目することで次の恒等式を得る:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{\Gamma} P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma}) f(\mathbf{\Gamma}') |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \Theta(-\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{\Gamma} P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma} + \Delta\mathbf{\Gamma}'_{\alpha;\beta}(\mathbf{\Gamma})) f(\mathbf{\Gamma}) |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \Theta(\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{\Gamma} P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma} + \Delta\mathbf{\Gamma}_{\alpha;\beta}(\mathbf{\Gamma})) f(\mathbf{\Gamma}) |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \Theta(\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}). \end{aligned} \quad (4.35)$$

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{\Gamma} f(\mathbf{\Gamma}) \left[\frac{\partial P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma})}{\partial t} + \sum_{\alpha} \left(\mathbf{v}_{\alpha} \frac{\partial P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma})}{\partial \mathbf{x}_{\alpha}} - \frac{1}{m_{\alpha}} \frac{\partial U_{\text{EX}}}{\partial \mathbf{x}_{\alpha}} \frac{\partial P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma})}{\partial \mathbf{v}_{\alpha}} \right) \right] \\ &= \sum_{\alpha < \beta} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{\Gamma} f(\mathbf{\Gamma}) \left[P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma} + \Delta\mathbf{\Gamma}_{\alpha;\beta}) \Theta(\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) - P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma}) \Theta(-\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \right] |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}). \end{aligned} \quad (4.36)$$

ここで変数変換 $\mathbf{\Gamma}' \rightarrow \mathbf{\Gamma}$ に伴い, $\Delta\mathbf{\Gamma}'_{\alpha;\beta}$ は $\Delta\mathbf{\Gamma}_{\alpha;\beta}$ に置き換えられている. この置き換えが可能なのは, direct collision 公式 (4.19) と inverse collision の公式が弾性衝突では同じ形状をとることに起因している⁶. この恒等式は任意の関数 $f(\mathbf{\Gamma})$ について成立するので, 式 (4.23) が $P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma})$ の時間発展方程式として導出される.

4.5 BBGKY 階層構造と Boltzmann 方程式

擬 Liouville 方程式 (4.23) は形式的には厳密である. しかし, 厳密な変形をしている以上元の多体ニュートン方程式と等価であり, (系が特殊で可積分でない限り) 解析的に解けるはずはない. 多体系の非自明な物理現象を解析的手法を用いて解析するには, なんらかの近似を入れる必要がある. そこでこの節では, 分子カオスの仮定を用いることで, Boltzmann 方程式という近似的な可解モデルを導出する. Boltzmann 方程式を導出する前に, 擬 Liouville 方程式を出発点に, BBGKY が発展させた方法を用いて少数体の分布動力学を形式的に導出する. 最低次の BBGKY 階層方程式を導出し, 分子カオスの仮定を援用することでガス粒子に対する Boltzmann 方程式, およびトレーサー粒子に対する Boltzmann-Lorentz 方程式がそれぞれ導出される.

4.5.1 BBGKY 階層構造

まず少数体 (1体・2体) の分布関数を導入する:

$$\begin{aligned} \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma}) \prod_{i=0, i \geq 2}^N d\mathbf{v}_i d\mathbf{x}_i, \quad \phi_t^{(2)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1; \mathbf{v}_2, \mathbf{x}_2) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma}) \prod_{i=0, i \geq 3}^N d\mathbf{v}_i d\mathbf{x}_i, \\ P_t^{(T)}(\mathbf{V}; \mathbf{X}) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma}) \prod_{i \geq 1}^N d\mathbf{v}_i d\mathbf{x}_i, \quad P_t^{(TG)}(\mathbf{V}, \mathbf{X}; \mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma}) \prod_{i \geq 2}^N d\mathbf{v}_i d\mathbf{x}_i. \end{aligned}$$

更に, 多体分布について対称性を仮定する:

$$P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma}) = P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma}'), \quad \mathbf{\Gamma}' = (\mathbf{V}, \mathbf{X}; \mathbf{v}_{i_1}, \mathbf{x}_{i_1}; \dots; \mathbf{v}_{i_N}, \mathbf{x}_{i_N}) \quad (4.37)$$

⁶非弾性衝突を考えるときは両者が一致しないので, direct collision の公式ではなく, inverse collision の公式を用いて置き換える必要がある.

但し、 $\{i_k\}_{1 \leq k \leq N}$ は整数列 $\{k\}_{1 \leq k \leq N}$ を入れ替えたものである。これらを用いると、厳密な恒等変形として最低次の BBGKY 階層構造を得る：

$$\begin{aligned} \frac{D^{(1)}}{Dt} \phi_t^{(1)} &= (N-1)r_G^2 \int d\mathbf{v}_2 d\mathbf{e}_{12} [\phi_t^{(2)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{x}_1; \mathbf{v}'_2, \mathbf{x}_2) - \phi_t^{(2)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1; \mathbf{v}_2, \mathbf{x}_2)] \Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}| \\ &\quad + r_{\text{TG}}^2 \int d\mathbf{V} d\mathbf{e}_{01} [P_t^{(\text{TG})}(\mathbf{V}', \mathbf{X}; \mathbf{v}'_1, \mathbf{x}_1) - P_t^{(\text{TG})}(\mathbf{V}, \mathbf{X}; \mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1)] \Theta(-\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}_{01}) |\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}_{01}|, \end{aligned} \quad (4.38)$$

および,

$$\frac{D^{(\text{T})}}{Dt} P_t^{(\text{T})} = N r_{\text{TG}}^2 \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{e}_{01} [P_t^{(\text{TG})}(\mathbf{V}', \mathbf{X}; \mathbf{v}'_1, \mathbf{x}_1) - P_t^{(\text{TG})}(\mathbf{V}, \mathbf{X}; \mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1)] \Theta(-\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}_{01}) |\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}_{01}| \quad (4.39)$$

である。但し、ガス粒子とトレーサー粒子の平均半径 $r_{\text{TG}} \equiv (r_{\text{T}} + r_{\text{G}})/2$ と 1 体の Liouville 演算子

$$\frac{D^{(1)}}{Dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} - \frac{1}{m} \frac{\partial U_{\text{EX}}}{\partial \mathbf{x}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_1}, \quad \frac{D^{(\text{T})}}{Dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{V} \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} - \frac{1}{m} \frac{\partial U_{\text{EX}}}{\partial \mathbf{X}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{V}}. \quad (4.40)$$

を導入した。

導出： 式 (4.23) を \mathbf{v}_1 と \mathbf{x}_1 以外で積分すると,

$$\begin{aligned} &\int \frac{D^{(N)}}{Dt} P_t^{(N)}(\Gamma) \prod_{i=0, i \geq 2} d\mathbf{v}_i \mathbf{x}_i \\ &= \sum_{(\alpha < \beta) \wedge (\alpha, \beta \neq 1)} \int \left[P_t^{(N)}(\Gamma + \Delta\Gamma_{\alpha; \beta}) \Theta(\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) - P_t^{(N)}(\Gamma) \Theta(-\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \right] |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \prod_{i=0, i \geq 2} d\mathbf{v}_i \mathbf{x}_i \\ &\quad + \sum_{\beta \neq 1} \int \left[P_t^{(N)}(\Gamma + \Delta\Gamma_{1; \beta}) \Theta(\mathbf{v}_{1\beta} \cdot \mathbf{e}_{1\beta}) - P_t^{(N)}(\Gamma) \Theta(-\mathbf{v}_{1\beta} \cdot \mathbf{e}_{1\beta}) \right] |\mathbf{v}_{1\beta} \cdot \mathbf{e}_{1\beta}| \delta(|\mathbf{x}_{1\beta}| - r_{1\beta}) \prod_{i=0, i \geq 2} d\mathbf{v}_i \mathbf{x}_i. \end{aligned} \quad (4.41)$$

2 行目の項は、着目している 1 番目の粒子以外の、粒子衝突の寄与を表しており、キャンセルしてしまはずである。また、3 行目の項は着目している 1 番目の粒子が関わる粒子衝突の寄与であり、キャンセルせずに残るはずである。これを踏まえて式変形しよう。

まず式 (4.41) の 2 行目の項がキャンセルして消えることを示そう。恒等式 (4.35) の $f(\Gamma)$ に $\delta(\mathbf{v}_1 - \mathbf{u}_1) \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{y}_1)$ を代入する⁷ と、 $\alpha, \beta \neq 1$ の時は⁸

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} P_t^{(N)}(\Gamma + \Delta\Gamma_{\alpha; \beta}) |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \Theta(\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \prod_{i=0, i \geq 2} d\mathbf{v}_i d\mathbf{x}_i \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} P_t^{(N)}(\Gamma) |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \Theta(-\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \prod_{i=0, i \geq 2} d\mathbf{v}_i d\mathbf{x}_i \end{aligned} \quad (4.43)$$

を得る。この関係式から式 (4.41) の 2 行目はキャンセルされる。

⁷任意の $f(\Gamma)$ に δ 関数を入れるのは一種の周辺化と等価である。簡単な場合で感覚をつかむとすると、 $f(x, y) = \delta(x - x')$ を使うと、次のように y についての周辺化を行うのと等価である：

$$\int dx dy f(x, y) P(x, y) = \int dy P(x', y). \quad (4.42)$$

⁸この時は、衝突後速度 \mathbf{v}'_1 が衝突前速度 \mathbf{v}_1 と同じなので、 $f(\Gamma') = \delta(\mathbf{v}'_1 - \mathbf{u}_1) \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{y}_1) = \delta(\mathbf{v}_1 - \mathbf{u}_1) \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{y}_1)$ である。この関係は α か β のどちらかが 1 だと成り立たないので。

次に、式 (4.41) の 3 行目の項がどのように残るか示そう。 $(\alpha, \beta) = (1, 2)$ の時は、

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} P_t^{(N)}(\boldsymbol{\Gamma} + \Delta\boldsymbol{\Gamma}_{1;2}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}| \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \delta(|\mathbf{x}_{12}| - r_G) \prod_{i=0, i \geq 2} d\mathbf{v}_i d\mathbf{x}_i \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{v}_2 d\mathbf{x}_2 \phi_t^{(2)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{x}_1; \mathbf{v}'_2, \mathbf{x}_2) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}| \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \delta(|\mathbf{x}_{12}| - r_G) \\
&= r_G^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{v}_2 d\mathbf{x}_2 \int d\mathbf{e} \phi_t^{(2)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{x}_1; \mathbf{v}'_2, \mathbf{x}_2) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}| \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \delta(\mathbf{x}_{12} - r_G \mathbf{e}) \\
&= r_G^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{v}_2 \int d\mathbf{e}_{12} \phi_t^{(2)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{x}_1; \mathbf{v}'_2, \mathbf{x}_2) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}| \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \tag{4.44}
\end{aligned}$$

を得る。ここで単位ベクトル \mathbf{e} に対する恒等式として次を用いている⁹：

$$\begin{aligned}
\delta(\mathbf{x}_{12} - r_G \mathbf{e}) &= \frac{1}{r_G^2} \delta(|\mathbf{x}_{12}| - r_G) \delta(\mathbf{e}_{12} - \mathbf{e}) \\
\implies \delta(|\mathbf{x}_{12}| - r_G) &= r_G^2 \int d\mathbf{e} \delta(\mathbf{x}_{12} - r_G \mathbf{e}) \tag{4.45}
\end{aligned}$$

式 (4.44) の 4 行目のダミー変数の符号を置き換える ($\mathbf{e}_{12} \rightarrow -\mathbf{e}_{12}$) ことで、

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} P_t^{(N)}(\boldsymbol{\Gamma} + \Delta\boldsymbol{\Gamma}_{1;2}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}| \Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \delta(|\mathbf{x}_{12}| - r_G) \prod_{i=0, i \geq 2} d\mathbf{v}_i d\mathbf{x}_i \\
&= r_G^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{v}_2 \int d\mathbf{e}_{12} \phi_t^{(2)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{x}_1; \mathbf{v}'_2, \mathbf{x}_2) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}| \Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \tag{4.46}
\end{aligned}$$

を得る。これらの等式を使うと、式 (4.38) の 1 行目が得られる。同様にして式 (4.39) も得られる。

4.5.2 Boltzmann 方程式

次に立方体中に閉じ込められた希薄ガスに対する Boltzmann 方程式を導出する。立方体に閉じ込められているとき、ポテンシャルは $\hat{\mathbf{x}}_\alpha \in [0, L]^3$ の時、 $U_{\text{EX}}(\hat{\mathbf{x}}_\alpha) = 0$ 、 $\hat{\mathbf{x}}_\alpha \notin [0, L]^3$ の時 $U_{\text{EX}}(\hat{\mathbf{x}}_\alpha) = \infty$ で与えられる。ここで気体が十分希薄であると仮定しよう。定量的には、体積分率 η に対して

$$\eta \equiv \frac{4\pi N r_G^3}{3L^3} \ll 1 \tag{4.47}$$

の極限を考えることになる。この条件では分子カオスの仮定が正当化される、

$$\phi_t^{(2)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1; \mathbf{v}_2, \mathbf{x}_2) \simeq \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}_2, \mathbf{x}_2). \tag{4.48}$$

ここで式 (4.38) の 2 行目（トレーサー粒子との衝突項）は $N \rightarrow \infty$ で無視できるので、Boltzmann 方程式を得る：

$$\frac{D^{(1)}}{Dt} \phi_t^{(1)} \simeq \lambda \int d\mathbf{v}_2 d\mathbf{e}_{12} [\phi_t^{(1)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{x}_1) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}'_2, \mathbf{x}_2) - \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}_2, \mathbf{x}_2)] \Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}|. \tag{4.49}$$

より数学的に厳密な定式化が可能な希薄極限も存在する。それは次の Boltzmann-Grad 極限である [34, 35]:

$$N \rightarrow \infty \text{ with } \lambda_G \equiv N r_G^2 = \text{const. and } \lambda_T \equiv N r_{TG}^2 = \text{const.} \tag{4.50}$$

⁹ボルツマン方程式を単位ベクトル \mathbf{e} 上の積分の形で定式化すると r_G^2 が外に出て無次元化できる。

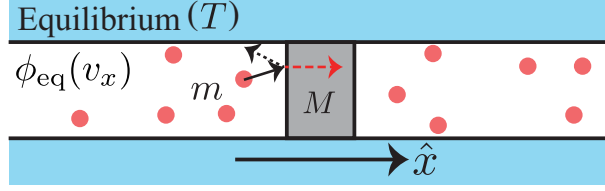


Figure 4.5: 1次元ブラウン運動としての Rayleigh ピストン. 質量 M の壁粒子が細いチューブに沿って動き, 質量 m のガス粒子と相互作用する (文献 [9] の図から引用).

この極限では平均自由行程を保ったまま, 球の半径が小さくなる極限に対応している. 体積分率 η は $O(N^{-1/2})$ の速度で減衰するので, 希薄極限になっている.

平衡状態ではガスは一様分布することが期待される: $\lim_{t \rightarrow \infty} \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}, \mathbf{x}) = \phi_{\text{eq}}(\mathbf{v})/L^3$. 平衡速度分布 $\phi_{\text{eq}}(\mathbf{v})$ は

$$\int d\mathbf{v}_2 d\mathbf{e}_{12} [\phi_{\text{eq}}(\mathbf{v}'_1) \phi_{\text{eq}}(\mathbf{v}'_2) - \phi_{\text{eq}}(\mathbf{v}_1) \phi_{\text{eq}}(\mathbf{v}_2)] \Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}| = 0 \quad (4.51)$$

を充たすので, Maxwell-Boltzmann 分布が定常分布になる:

$$\phi_{\text{eq}}(\mathbf{v}) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-m\mathbf{v}^2/2k_B T}. \quad (4.52)$$

4.5.3 Boltzmann-Lorentz 方程式

トレーサー粒子とガス粒子の2体相関についても分子カオスを仮定する:

$$P_t^{(\text{TG})}(\mathbf{V}, \mathbf{X}; \mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1) \simeq P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}, \mathbf{X}) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1). \quad (4.53)$$

結果 Boltzmann-Lorentz 方程式を得る,

$$\frac{D^{(\text{T})}}{Dt} P_t^{(\text{T})} \simeq \lambda_T \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{e}_{01} [P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}', \mathbf{X}) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{x}_1) - P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}, \mathbf{X}) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1)] \Theta(-\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}_{01}) |\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}_{01}|. \quad (4.54)$$

この式 (4.54) は6次元の位相空間 $(\hat{\mathbf{V}}, \hat{\mathbf{X}})$ 上でのマスター方程式であり, ハミルトン力学からブラウン運動の確率モデルに接続されたことになる.

4.6 具体例で遊ぶ

4.6.1 例1: Rayleigh ピストン

ここまでは運動論をベースに希薄ガス中の3次元ブラウン運動をモデル化した. しかし計算を見ての通り3次元ブラウン運動は計算が大変である. そこでより簡単な例として, 1次元ブラウン運動の例である Rayleigh ピストンを考える (図 4.5). 重い粒子 (質量 M) が細いチューブに囲まれている, 幾何学的に x 軸方向にのみ動くとして仮定する. 軽い粒子 (質量 m) の希薄気体もチューブに入っており, 壁粒子にランダム衝突すると仮定する. チューブは温度 T の熱浴に接しているとし, x 方向の速度分布 $\phi_{\text{eq}}(v_x)$ は Maxwell-Boltzmann 分布しているとする:

$$\phi_{\text{eq}}(v_x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} e^{-mv_x^2/2k_B T}. \quad (4.55)$$

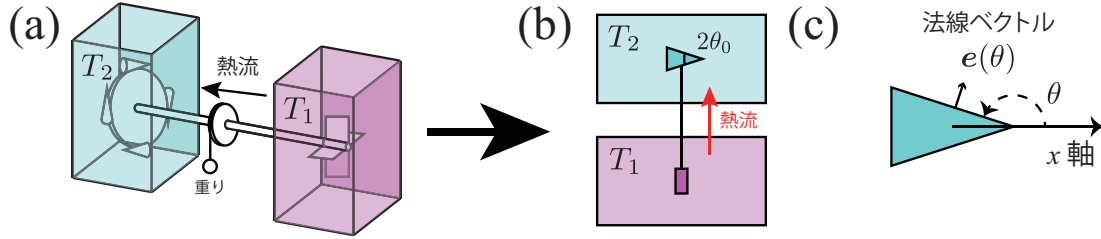


Figure 4.6: (a) 3次元系でのブラウンラチェット. (b) 本質的に等価な1次元系のブラウン運動. ブラウン粒子の形状は2次元だが, 粒子は1次元方向 (x 方向) にしか進まないとする. (文献 [26] の画像を縮小・改変して (a) として引用. (a) と (b) の両設定は文献 [36] に基づく.)

ガスが十分希薄ならば, 壁粒子の速度は Boltzmann-Lorentz 方程式で記述できる [30–33]:

$$\frac{\partial P_t(V)}{\partial t} = \rho S \int_{-\infty}^{\infty} dv_x |v_x - V| \{P_t(V') \phi_{\text{eq}}(v'_x) - P_t(V) \phi_{\text{eq}}(v_x)\}, \quad (4.56)$$

ただし $P_t(V) \equiv P(\hat{V}(t) = v)$ は速度 $\hat{V}(t)$ の分布であり, ρ はガスの数密度であり, S は壁粒子の面積であり,

$$V' \equiv V - \frac{2m}{m+M}(V - v_x), \quad v'_x \equiv v_x + \frac{2M}{m+M}(V - v_x). \quad (4.57)$$

は衝突後速度である. 式 (4.56) はマスター方程式の標準形に書き直すことができる,

$$\frac{\partial P_t(V)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} dY \{W_\varepsilon(Y; V - Y) P_t(V - Y) - W_\varepsilon(Y; V) P_t(V)\}. \quad (4.58)$$

但しジャンプサイズは Y , 質量比を $\varepsilon \equiv m/M$, ジャンプレート

$$W_\varepsilon(Y; V) = \rho S \frac{(1 + \varepsilon)^2}{4\varepsilon^2} |Y| \phi_{\text{eq}} \left(V + \frac{1 + \varepsilon}{2\varepsilon} Y \right). \quad (4.59)$$

と書いた. この式 (4.58) は Langevin 方程式のマスター方程式とは異なっている. これは Langevin 方程式が更に粗視化することで得られるものだからである [30–32]. ここについては次の章で説明する.

4.6.2 例2: Brownian ラチェット

運動論を出発点としたモデリングの手法の良い点として, 希薄ならば非平衡状態でも手法が使えることである. なので, 非平衡定常状態にあるブラウン運動をモデル化する出発点として使うことができる. 例えば図 4.6(a) のように, 温度の異なる2つの熱浴の間に, 歯車を「ブラウン粒子」として置いてみよう ($T_1 > T_2$). 左右で歯車の形状が異なっているのが特徴であり, Brownian ラチェット (もしくは Feynmann ラチェット) と呼ばれている. この様な設定では, 歯車の自由度を通じて熱流が生じ, 系は非平衡定常状態に保たれる. この時, **左右のどちらに歯車が回転し続けるか?** という問題を考えよう. このような設定を運動論を用いて一般的にモデル化できる.

問題を簡約化するために, 図 4.6(b) のような1次元系を考えよう. この1次元系のモデルは, 3次元のラチェットでの形状依存性を最低限取り入れたモデルになっている. この系なら**左右のどちらの一方にブラウン粒子が進むか**を考えることになる. この場合のマスター方程式は次で与えられる:

$$\frac{\partial P_t(V)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} dY \{W_\varepsilon(Y; V - Y) P_t(V - Y) - W_\varepsilon(Y; V) P_t(V)\}. \quad (4.60)$$

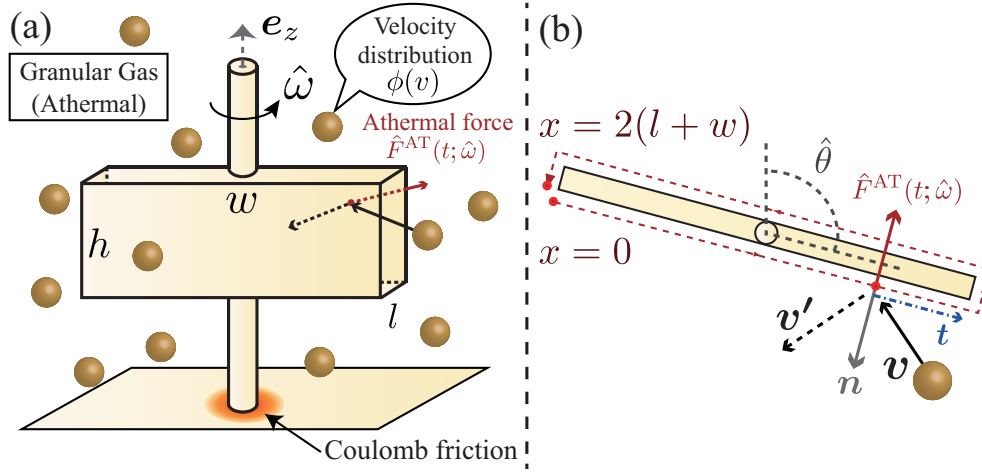


Figure 4.7: 希薄粉体ガス中のローター．粉体は加振されて非平衡定常状態を保っており，非平衡状態の粉体粒子がローターにぶつかる．非平衡状態での「ブラウン運動」の例．文献 [46] より引用．

ジャンプレートは運動論を考えると次の式で与えられる，

$$W_\varepsilon(Y; V) = \sum_{i=1,2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_{-\infty}^{\infty} dv_x dv_y \rho_i \phi_i(v_x, v_y) L_i F_i(\theta) [(\mathbf{V} - \mathbf{v}) \cdot \mathbf{e}(\theta)] \Theta((\mathbf{V} - \mathbf{v}) \cdot \mathbf{e}(\theta)) \times \delta\left(Y + \frac{m}{M} B(\theta)(V - v_x + v_y \cot \theta)\right). \quad (4.61)$$

ここで ρ_i はガスの数密度， L_i は物体の全周長， $B(\theta) \equiv 2M \sin^2 \theta / (M + m \sin^2 \theta)$ ， $\mathbf{e}(\theta) \equiv (\sin \theta, -\cos \theta)$ ， $\phi_i(v_x, v_y) = m \exp[-m(v_x^2 + v_y^2)/2k_B T_i] / 2\pi k_B T_i$ ． $F_i(\theta)$ は正規化された確率密度であり，形状を特徴付ける．より具体的には，法線ベクトルの角度が $[\theta, \theta + d\theta]$ の範囲にある表面の割合が $F_i(\theta)d\theta$ で与えられる．図 4.6(b) の場合は $F_i(\theta)$ は次の式で与えられる：

$$F_1(\theta) = \frac{1}{2} (\delta(\theta - \pi/2) + \delta(\theta - 3\pi/2)) \quad (4.62)$$

$$F_2(\theta) = \frac{2\delta(\theta - 3\pi/2) \sin \theta_0 + \delta(\theta - \theta_0) + \delta(\theta - (\pi - \theta_0))}{2(1 + \sin \theta_0)}. \quad (4.63)$$

このモデルを解析すると，ブラウン粒子は右に定常的に進むことがわかる（そのための解析のツールは次の章で触れる）．この1次元ブラウン運動の結果を踏まえると，3次元ブラウンラチェット（図 4.6）も一方に回り続ける．この現象を直観的に説明するには，文献 [25] で議論されているエネルギー流と運動量のクロスカップリングを考えるのがよい．

4.6.3 例3：粉体ローター

今までの例では揺らぎはすべて熱揺らぎだった．例1では平衡系の熱揺らぎであり，例2では温度差に起因する非平衡定常系の熱揺らぎである．次は揺らぎの元となる環境自体が非平衡状態にある場合（非熱的な揺らぎ）を考えよう．分子運動論が使用可能な非熱的揺らぎが現れる設定として，粉体ローター [39–44] と呼ばれる設定を考える（図 4.7a）．砂のような粉体を考え，粉体を加振することで粉体をガス上の非平衡定常状態に保つ．このような設定は，平衡から遠い非平衡定常状態の系にありながら分子運動論の数理がある程度使えるので，非平衡定常状態を調べるときのある種の理想的な系だと思って研究がされて来た [29]．この粉体ガス中にローターを入れて，粉体粒子の衝突由来の揺らぎを考える．ローターは直方体の形状をしている ($w \times h \times l$) とし，粉体ガスの速度分布を $f(\mathbf{v})$ と置く．

粉体ガスは非平衡定常状態にあるので、一般的には Maxwell-Boltzmann 分布していない。ローターは軸の周りに固体摩擦（高校で習うクーロン・アモントン則）があるとすると、

$$F^{\text{fri}}(\hat{\omega}) = \gamma \text{sgn}(\hat{\omega}). \quad (4.64)$$

その他に粉体由来の撃力 $\hat{F}^{\text{AT}}(t; \hat{\omega})$ も受ける、

$$\frac{d\hat{\omega}}{dt} = F^{\text{fri}}(\hat{\omega}) + \hat{F}^{\text{AT}}(t; \hat{\omega}). \quad (4.65)$$

単純のため、粉体ガスの速度分布は指数分布 $f(\mathbf{v}) = e^{-|\mathbf{v}|/v_0}/8\pi v_0^3$ 、ローターは十分薄いと仮定する ($l \simeq 0$ (i.e., $l \ll w, h$)). この非熱的揺らぎ $\hat{F}^{\text{AT}}(t; \hat{\omega})$ も粉体粒子の衝突に由来する以上、分子運動論の数理でモデル化できる。つまりマスター方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(\omega) = \gamma \frac{\partial}{\partial \omega} \text{sgn}(\omega) P_t(\omega) + \int dy [W_\varepsilon(y; \omega - y) P_t(\omega - y) - W_\varepsilon(y; \omega) P_t(\omega)], \quad (4.66)$$

で与えられる。ここでジャンプレートは

$$W_\varepsilon(y; \omega) = \rho h \int_0^{2(l+w)} ds \int_{-\infty}^{\infty} dv \phi(|\mathbf{v}|) \Theta(\Delta \mathbf{V}(s) \cdot \mathbf{n}(s)) |\Delta \mathbf{V}(s) \cdot \mathbf{n}(s)| \delta(y - \Delta \omega(s)), \quad (4.67)$$

であり、 ρ は粉体ガスの数密度、 γ は摩擦係数、

$$\mathbf{V}(s) \equiv \omega \mathbf{e}_z \times \mathbf{r}(s), \quad g(s) \equiv \frac{\mathbf{r}(s) \cdot \mathbf{t}(s)}{R_1}, \quad \mathbf{t}(s) \equiv \mathbf{e}_z \times \mathbf{n}(s), \quad (4.68)$$

$$\Delta \mathbf{V}(s) \equiv \mathbf{V}(s) - \mathbf{v}, \quad \Delta \omega \equiv (1 + e) \frac{\Delta \mathbf{V} \cdot \mathbf{n}}{R_1} \frac{\varepsilon g(s)}{1 + \varepsilon g^2(s)}. \quad (4.69)$$

s は立方体に沿った座標であり、 $\mathbf{n}(s)$ は場所 s での法線ベクトル、 $\varepsilon \equiv m/M$ は質量比 (図 4.7b).

4.7 ランジュバン方程式はどう出てくるか？

分子運動論で導出されるモデルは基本的にマスター方程式で記述される。即ち、確率微分方程式に対応する表記で無理やり書くと

$$\frac{d\hat{V}}{dt} = \hat{\xi}_{W_\varepsilon(Y; \hat{V})}^{\text{CP}} \quad (4.70)$$

となる。つまり、ポアソンのようなノイズが一定確率でやって来る。そのノイズの統計は系の速度 \hat{V} に依存している。

4.8 進んだ注記

この章では分子運動論の数理を用いて、揺らぎをミクロな視点からモデル化することを行い、最終的には平衡状態・非平衡定常状態にある様々なブラウン粒子の動力学をモデル化した。この手法は希薄でさえあれば幅広く使えるため、色々なトイモデルを気軽に構築するベースになりうる。

ところでこの章では、運動方程式のレベルから体系的に確率モデルを導出したが、その際に本質的には力学特有の性質をあまり使っていないことがわかる。事実使用したのは、衝突の際に δ 関数型の撃力発生することと、その発生時刻が決定論的な衝突条件で決まることだけであり、すべては δ 関数に関する恒等変形である。即ち、本質的に効いているのは

- 2体衝突型の相互作用をもつ。このおかげで BBGKY 階層構造が導出できる。例えばもし相互作用が全結合型の衝突だったならば、1体分布の運動を縮約しても N体分布に駆動されることとなり、BBGKY 階層構造が簡約化できない。具体的には、もし多体衝突型の相互作用があるならば次のような BBGKY 階層になってしまう。

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t^{(1)}(x) = \underbrace{\mathcal{L}_1 P_t^{(1)}(x) + \mathcal{L}_2 P_t^{(2)}(x, x')}_{\text{2体衝突型だとここで切れる}} + \cdots + \mathcal{L}_N P_t^{(N)}(x, x_1, \dots) + \dots \quad (4.71)$$

- なんらかの近似として2体相関が失われ、1体分布での近似理論が有効に働く（分子運動論では希薄極限では厳密だったが、一般には厳密だとは仮定できない。平均場近似のようなもの）。即ち、次の式がある程度有効であることだけ仮定する：

$$P_t^{(2)}(x, x') \simeq P_t^{(1)}(x) P_t^{(1)}(x'). \quad (4.72)$$

ということである。逆にこれらの条件さえ満たされていれば、物理現象と無関係に枠組みが使えるはずである。実際、Prigogine は交通流のモデリングに分子運動論を使用しているし、社会現象でも富の再分配・意見形成 [37] などにも使用できるのではないかという研究がある。特に筆者は、金融市場のブラウン運動のモデリングに分子運動論の数理の応用することで研究している [38]。その意味で、分子運動論の数理は様々な現象をモデリングする際の基礎として使えるのではないかと筆者は思っている。

Chapter 5

ランジュバン方程式とその導出

この節ではランジュバン方程式の導出を行う。ランジュバン方程式は熱揺らぎに駆動されて揺らぐ粒子 (ブラウン運動) を記述する有効モデルとして有名である [1]。ブラウン運動の確率的記述は最初、アインシュタインによって行われたが [2]、その導出は直観的であり体系だっではいなかった。そこで確率的記述をより洗練するために、ランジュバンは確率的な動力学方程式のモデルを提案した [3]。このモデルがランジュバン方程式であり、物理における確率微分方程式の初めての例である。確率微分方程式を用いた記述は様々な物理系で有効であるだけでなく、化学系、生物系、経済系でも有効である。

この章では、まずランジュバン方程式の具体形を導入し、その数学的性質を説明する。次にシステムサイズ展開 [5, 30, 31] を用いて、ランジュバン方程式を線形ボルツマン方程式を出発点に導出する。単一な確率的環境に接する粒子の動力学は、一般に弱結合極限でランジュバン方程式によって有効記述されることを示す。具体例として前の章でも議論したレイリーピストンなどを用いる。

5.1 ランジュバン方程式

熱平衡状態の環境に接する小さな粒子を考えよう。例えば、図 5.1 の様に水中のビーズを考えても良いだろう。この様な設定では、ビーズは水分子由来の抵抗・熱揺らぎを感じる筈である。ここで、ビーズの3次元速度 \hat{v} の1成分だけを取り出して \hat{v} と書くことにすると、その動力学は次の式でモデル化できる：

$$M \frac{d\hat{v}}{dt} = -\gamma \hat{v} + \hat{\xi}_T. \quad (5.1)$$

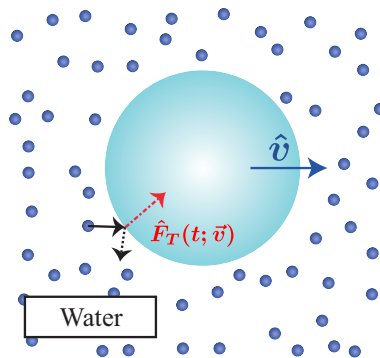


Figure 5.1: 水中のビーズのブラウン運動の絵。ビーズは水分子によって駆動され、ランダムに動く。(文献 [9] のものを引用)

ここで、 M は粒子の質量、 γ は粘性抵抗、 $\hat{\xi}_T$ は熱揺らぎである。簡単の為、熱揺らぎ $\hat{\xi}_T$ をホワイトガウスノイズとしてモデル化しよう： $\hat{\xi}_T(t) = c\hat{\xi}^G(t)$ 。但し、 c は定数。この定数 c は平衡統計力学との整合性の観点から一意に定まる。即ち、エネルギー等分配則との整合性から

$$\left\langle \frac{M}{2} \dot{v}^2 \right\rangle = \frac{1}{2} k_B T. \quad (5.2)$$

を充たす必要がある。ここで k_B はボルツマン定数であり、 T は水の温度である。この条件から第2種揺動散逸定理が導かれる [45]：

$$c^2 = 2\gamma k_B T \iff \langle \hat{\xi}_T(t_1) \hat{\xi}_T(t_2) \rangle = 2\gamma k_B T \delta(t_1 - t_2). \quad (5.3)$$

5.1.1 フォッカー・プランク方程式

分布関数の時間発展方程式はフォッカー・プランク方程式に従う：

$$\frac{\partial P(v, t)}{\partial t} = \gamma \left[\frac{\partial}{\partial v} v + T \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] P(v, t). \quad (5.4)$$

但し、式 (2.39) を用いた。この定常解としてカノニカル分布が得られる：

$$P_{SS}(v) = \sqrt{\frac{M}{2\pi k_B T}} \exp \left[-\frac{Mv^2}{2k_B T} \right]. \quad (5.5)$$

但し、 $P_{SS}(v) \equiv \lim_{v \rightarrow \infty} P(v, t)$ は定常分布である。カノニカル分布は平衡統計力学が予言する分布であり、ランジュバン方程式は平衡統計力学と無矛盾である事がわかる。

5.1.2 ランジュバン方程式の良いところ

ランジュバン方程式の良いところとして、可解モデルであることがあげられる。実際、確率分布はフォッカー・プランク方程式という2階の偏微分方程式に従うのであり、定常分布のみならず Green 関数などの様々な量を計算することができる（例えば H. Risken, C. Gardiner を読めばかなりの計算ができる）。

一方、分子運動論から導出されるボルツマン方程式はマスター方程式の一種であり、積分微分方程式である。そのため、多くの場合解析的には解くことができない（たまたま平衡系の場合はカノニカル分布が定常分布として求まるが、Green 関数などはほとんどの場合求まらない。また、化学反応系・粉体のような非平衡系のマスター方程式については定常分布すら求まらない。）。その意味で、マスター方程式の方がはるかに性質が悪い。また、ランジュバン方程式の方が直観的にわかることも事実だと思う。例えば、マスター方程式からどうやって散逸が現れるかはあまりピンとこないのではないかと思われる。そこで、性質の悪いマスター方程式をなんとか解析的に扱う方法が必要となる。それが後述のシステムサイズ展開である。

5.2 ランジュバンの漸近的導出

ここまででランジュバン方程式というブラウン運動を記述する現象論的なモデルの説明を行ってきた。しかし、微視的な視点から構成したブラウン運動の動力学は、本来ランジュバン方程式とはかけ離れている。事実、微視的に導出された線形ボルツマン方程式 (4.54) や (4.56) は、フォッカー・プランク方程式 (5.4) とは全く違う方程式である。その意味で、本来ブラウン粒子はランジュバン方程式に従っていない事がわかる。しかし、ブラウン粒子の運動がランジュバン方程式によってうまく説明できることも事実であり、なんらかの意味でランジュバン方程式にも正当性があると信じられてきた。そこ

で、ファン・カンペンはランジュバン方程式がどういう意味で有効なモデルになり得るかを調べ、漸近的にランジュバン方程式が有効になる条件を明示化した [5,30,31]. この節では、ファン・カンペンが提案したシステムサイズ展開を説明する. このシステムサイズ展開によれば、ミクロに導出された線形ボルツマン方程式を元に、漸近的にランジュバン方程式が導出される. 更に、この理論は弱結合の確率過程の一般論として定式化されており、ランジュバン方程式が何故物理を離れた幅広い系の有効モデルとして妥当なのかも説明される.

5.2.1 システムサイズ展開のアイデア

まず、システムサイズ展開のアイデアを説明しよう. 節 4.6.1 で説明されたように、一般のブラウン運動はランジュバン方程式に従わず、遙かに複雑な確率過程のモデルに従っている. 事実、線形ボルツマン方程式 (4.56) のノイズの統計は、系の状態 \hat{V} に合わせて時々刻々と変化しており、環境との相関が無視できない. 更に、線形ボルツマン方程式 (4.56) には、決定論的な摩擦項も存在しない. こういった複雑な確率過程から、ランジュバン方程式のようなホワイトノイズ+摩擦型の単純な確率過程を導出するには、多数の近似が必要となる. 例えば、次の様な近似が必要となるだろう:

(1) 安定点の存在・その周りでの小さな揺らぎ (安定性・微小ノイズ):

ランジュバン方程式には摩擦項 $(-\gamma\hat{v})$ があり、 $\hat{v} = 0$ 近傍では系が安定である事を示唆している. 即ち、確率過程として $\hat{v} = 0$ が何らかの意味で安定点となっている必要がある. 更に、ランジュバン方程式の摩擦は線形化されているが、これは安定点周りで小さく動いているときは正しいことが予想される.

(2) 環境相関の切断 (弱い結合定数):

ランジュバン方程式中のノイズ項はホワイトノイズであり、環境相関がない. 即ち、環境と系の状態変数 \hat{v} との間の相関を切断する必要がある. これは、系から環境へのバックアクションを切ることに相関し、何らかの意味で環境との結合が弱くなければならない.

(3) 中心極限定理の適応 (弱い摩擦):

ランジュバン方程式中のホワイトノイズはガウスノイズである. ところが、線形ボルツマン方程式 (4.56) 中にはガウスノイズの項は現れない. そのため、ポアソンノイズからガウスノイズを近似的に構成する必要がある. 通常、ガウスノイズが普遍的に現れる数学的な根拠とは中心極限定理であり、中心極限定理がなぜ使えるのかを明示化する必要がある. 中心極限定理によると、独立同分布 (i.i.d.) の確率変数の単純和を沢山取ると、ガウスランダム変数に収束する. もし仮定 (2) によって既にノイズがホワイトになっているとすれば、ホワイトノイズは時間に関する i.i.d. のクラスに所属しているので、その単純和 $\int_0^t ds \hat{\xi}(s)/\sqrt{t}$ は、 $t \gg \tau_P$ ならばガウスランダム変数に収束するはずである. 但し、 τ_P はジャンプの典型的な時間間隔である. この様な仮定を正当化するには、系の緩和時間 τ_R が十分長くないと行けない (i.e., $\tau_R \gg \tau_P$). というのは、もし系の緩和時間が十分長ければ、系は衝突の時間スケールから見れば停止していると見做すことが出来、衝突の影響は単純和として長時間に渡って積算していく. すなわち、系の緩和時間が長い \Rightarrow 摩擦が小さいならば中心極限定理が使える.

ここでファン・カンペンが明らかにしたことは、安定な単一環境に弱結合する確率過程は一般的にランジュバン方程式で体系的に近似できるということだ. というのは、弱結合する確率過程を考えると、上記の近似 (1)-(3) は全て自動的に起こることがわかったのだ. ここでいう弱結合とは、ブラウン粒子が十分大きいこととも等価であることに注意. 何故ならブラウン粒子が十分大きければ、衝突の影響は相対的に小さくなり、実質的に弱結合と等価になるからだ.

5.2.2 システムサイズ展開

では、上記のアイデアを数学的な土俵に載せることにしよう。まず単一なマルコフジャンプノイズに駆動される系を考えよう。

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = \hat{\xi}_{W_\varepsilon(y;\hat{v})}^{CP}. \quad (5.6)$$

ここで、 $W_\varepsilon(y;\hat{v})$ はノイズの遷移率である。但し、後述する重要なパラメータ ε を含むとする。この系について以下の重要な仮定を置く：

(i) 弱結合性 (微小ノイズ)：

環境由来のマルコフジャンプノイズ $\hat{\xi}_{W_\varepsilon(y;\hat{v})}^{CP}$ が小さいとしよう。即ち、微小パラメータ ε によって次の形にスケーリングされているとしよう：

$$\hat{\xi}_{W_\varepsilon(y;\hat{v})}^{CP} = \varepsilon \hat{\xi}_{\bar{W}(\mathcal{Y};\hat{v})}^{CP}(t). \quad (5.7)$$

ここで、 $\bar{W}(\mathcal{Y};\hat{v})$ は ε と無関係な遷移率である。この仮定をマスター方程式の言葉で記述すると、系のマスター方程式

$$\frac{\partial P(v,t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} dy [W_\varepsilon(y;v-y)P(v-y,t) - W_\varepsilon(y;v)P(v,t)], \quad (5.8)$$

のカーネル $W_\varepsilon(y;v)$ について、以下のスケーリングが成立するのと等価である：

$$W_\varepsilon(y;v)dy = \bar{W}(\mathcal{Y};v)d\mathcal{Y} \iff W_\varepsilon(y;v) = \frac{1}{\varepsilon} \bar{W}\left(\frac{y}{\varepsilon};v\right). \quad (5.9)$$

ただしこの関係式は、 $\hat{\xi}_{W_\varepsilon(y;\hat{v})}^{CP}$ 由来のジャンプサイズ y と、 $\hat{\xi}_{\bar{W}(\mathcal{Y};\hat{v})}^{CP}$ 由来のジャンプサイズ \mathcal{Y} が $y = \varepsilon\mathcal{Y}$ で結びついていることを念頭に、変数変換に関するヤコビアン関係式を考えると等価である。

(ii) ノイズの安定性：

次に、ノイズが $\hat{v} = 0$ 周りで安定であることを要請する。この安定性を定式化するために、マスター方程式をクラマース・モヤル展開する (2.52)：

$$\frac{\partial P(v,t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\varepsilon)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial v^n} [\alpha_n(v)P(v,t)], \quad (5.10)$$

但し、 $\alpha_n(v)$ はクラマース・モヤル係数である

$$\alpha_n(v) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{Y} \bar{W}(\mathcal{Y};v) \mathcal{Y}^n. \quad (5.11)$$

今、第1次の係数 $\alpha_1(v)$ が摩擦の役割を果たすことを考えよう¹。摩擦関数 α_1 が次の安定性を持つことを仮定する：

$$\alpha_1^{(0)} = 0, \quad \alpha_1^{(1)} = -\gamma < 0, \quad \alpha_2^{(0)} = 2\gamma T > 0. \quad (5.12)$$

但し、テイラー展開の係数 $\alpha_n(v) = \sum_{k=0}^{\infty} v^k \alpha_n^{(k)}/k!$ を導入した。

¹この直観は結果から逆算して、最終的に肯定化される。今の段階では、「もしランジュバン方程式の摩擦がもしクラマース・モヤル展開と対応するなら、対応物は α_1 だろう」となんとなくあたりをつけて理解すれば良い。

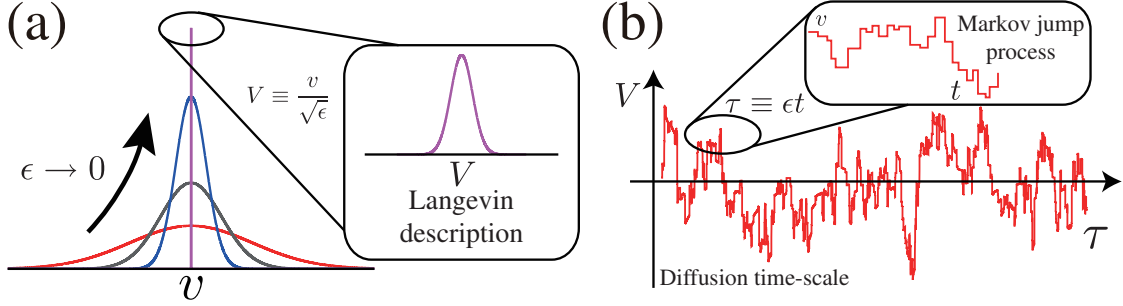


Figure 5.2: (a) 弱結合極限では、デルタ関数に定常分布が収束する．速度スケールを変数変換 V によってリスケールすることで、ランジュバン描像が有効なピーク近傍を拡大している．(b) マルコフジャンププロセスを粗視化するために、リスケールされた時間スケール τ で現象を見る．このスケールではジャンププロセスが拡散プロセスに見える．文献 [46] の図を改変して使用．

以上の2つの仮定に基づき、典型的なトラジェクトリーについてランジュバン方程式を導出する．まず、弱結合極限 $\epsilon \rightarrow 0$ においては、定常分布が自明にデルタ関数に収束することに注意しよう： $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} P_{SS}(v) = \delta(v)$ (図 5.2(a) を見よ)．更に、摩擦関数 $-\epsilon\alpha_1(v)$ が $\epsilon \rightarrow 0$ で小さくなり、緩和時間が発散することにも注意しよう (図 5.2(b) を見よ)．これは弱結合極限が特異摂動になっていることを意味し、適切な変数を施して特異性を取り除く必要がある．具体的には次の変数変換を導入する：

$$V \equiv \frac{v}{\sqrt{\epsilon}}, \quad \tau \equiv \epsilon t. \quad (5.13)$$

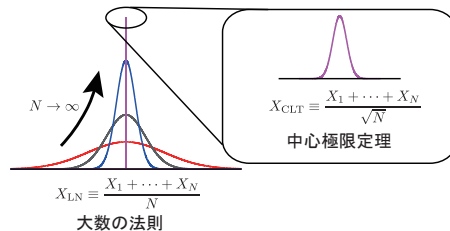
変数変換 $V \equiv v/\sqrt{\epsilon}$ は、ランジュバン描像が有効的に正しい領域である、分布のピークだけを拡大する変数変換である (図 5.2(a))．また変数変換 $\tau \equiv \epsilon t$ は、緩和時間の発散を取り除くために、時間スケールをリスケールする変数変換である (Fig. 5.2(b))²．上記の変数変換を用いて、クラマース・モヤル展開されたマスター方程式 (5.10) を更にテイラー展開する：

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(V, \tau)}{\partial \tau} &= \left[\frac{\partial}{\partial V} \gamma V - \sum_{k=2}^{\infty} \frac{\epsilon^{(k-1)/2}}{k!} \frac{\partial}{\partial V} V^k \alpha_1^{(k)} + \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \epsilon^{(n+k)/2-1}}{n!k!} \frac{\partial^n}{\partial V^n} V^k \alpha_n^{(k)} \right] P(V, \tau) \\ &= \gamma \left[\frac{\partial}{\partial V} V + T \frac{\partial^2}{\partial V^2} \right] P(V, \tau) + O(\epsilon^{1/2}), \end{aligned} \quad (5.14)$$

ここで式 (5.14) は $\epsilon \rightarrow 0$ の極限でフォッカー・プランク方程式に一致し、即ちランジュバン方程式と等価になる：

$$\frac{d\hat{V}}{d\tau} = -\gamma \hat{V} + \sqrt{2\gamma T} \hat{\xi}^G \iff \frac{d\hat{v}}{dt} = -\epsilon\gamma v + \epsilon\sqrt{2\gamma T} \hat{\xi}^G. \quad (5.15)$$

²これは中心極限定理の本質を考えると自然だと思われる．一応大数の法則と中心極限定理の直観的理解をしておく．今期待値が0の変数列 $\{X_i\}_{i=1, \dots, N}$ に対して $X_{LN} \equiv (X_1 + \dots + X_N)/N$ と $X_{CLT} \equiv (X_1 + \dots + X_N)/\sqrt{N}$ を定義する．大数の法則・中心極限定理によれば、 X_{LN} は $\lim_{N \rightarrow \infty} P(X_{LN}) = \delta(X_{LN})$ 、 X_{CLT} は $\lim_{N \rightarrow \infty} P(X_{CLT}) = \exp(-X_{CLT}^2/2\sigma^2)/\sqrt{2\pi\sigma^2}$ となる．これは、大数の法則で δ 関数化しているピークを拡大してみるとガウス分布になっていることを言っている．



ここで重要な事は、マスター方程式内の非線形な項は全て弱結合条件下では消えることだ。そのため、この近似は線形近似 (Linear Noise Approximation) とも呼ばれている。また、ノイズと系の相関は全て摩擦項に繰り込まれてしまし、揺らぎの環境相関は消えてホワイトノイズ化していることに注意。更に、環境が単一であることに起因して、弱結合極限では自動的に弱い摩擦が現れ、その結果中心極限定理が自動適応されていることに注意。

注意：レア・イベントでの摂動の破綻

注意しておくことは、システムサイズ展開はレア・イベントでは一般に使用できないことだ。何故なら、式 (5.14) の最中で、スケールされた速度 V が典型的な速度 $V^* \equiv \sqrt{T_A}$ に比べて、あまり大きくないことが暗に仮定されているからだ (i.e., $|V| \lesssim V^*$)。事実、 $V \simeq V^*/\varepsilon$ の領域を考えると、自明にテイラー展開の高次項が重要になってくる³。この意味で、ランジュバン描像はレア・イベントを無視して典型的なイベントだけに着目した時に得られる有効描像である。そのため、仮にランジュバン描像で上手に記述出来る系であっても、レア・イベント (例えば分布のテール) などは正しく記述出来ていないかわからない。しかし、その様なテールが現実的なトラジェクトリーとして現れる事は希であることが見積もれ、そのために期待値などを議論する分にはランジュバン方程式を用いても全く影響がない。ランジュバン描像の妥当性はこの意味で成立していることに注意する必要がある。

5.2.3 具体例：レイリーピストンでのランジュバン

システムサイズ展開のデモとして、節 4.6.1 で取り扱ったレイリーピストンをもう一度扱おう。具体的には、システムサイズ展開を使うために、質量比 ε が小さいという仮定を置く：

$$\varepsilon \ll 1 \iff m \ll M. \quad (5.16)$$

この仮定を用いるとランジュバン方程式がリーディング・オーダーでの近似として導出される。まず、遷移率がシステムサイズ展開のスケーリング (5.9) を有効的に充たしていることを確認する：

$$W_\varepsilon(y; V) = \rho S \frac{(1+\varepsilon)^2}{4\varepsilon^2} |Y| \phi_{eq} \left(V + \frac{1+\varepsilon}{2\varepsilon} y \right) \simeq \frac{1}{\varepsilon} \bar{W} \left(\frac{y}{\varepsilon}; V \right). \quad (5.17)$$

ここで ε に依存しない遷移率として

$$\bar{W}(y; V) = \frac{\rho S}{4} |y| \phi_{eq} \left(V + \frac{y}{2} \right) \quad (5.18)$$

を導入した。但し、 $y \equiv y/\varepsilon$ である。ここで、システムサイズ展開のスケーリング (5.9) からのずれが少しあるが、この項はリーディング・オーダーには寄与しないことが簡単に確認できる⁴。ここでリスケールされた変数 $\mathcal{V} \equiv V/\sqrt{\varepsilon}$ と $\tau \equiv t/\varepsilon$ を導入し、式 (5.14) とほぼ同等の計算を行うことで、ランジュバン方程式を得られる：

$$\frac{d\hat{\mathcal{V}}}{d\tau} = -8\rho S \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi m}} \hat{\mathcal{V}} + 8\rho S \sqrt{\frac{(k_B T)^3}{2\pi m^3}} \hat{\xi}^G, \quad (5.19)$$

または、

$$M \frac{d\hat{V}}{dt} = -\gamma \hat{V} + \sqrt{2\gamma T} \hat{\xi}^G. \quad (5.20)$$

ここでの摩擦係数の微視的表現は $\gamma = \varepsilon 8\rho S \sqrt{k_B T / 2\pi m}$ となる。更に第 2 種揺動散逸定理が自動的に充たされていることに注意。

³数学的には、システムサイズ展開が速度に関して一様な漸近級数になっていないことを意味する。

⁴また、より良い変数を選ぶとこの補正項の問題は生じないことが文献 [31] で指摘されている。具体的には $\varepsilon \equiv m/(m+M)$ と選ぶとシステムサイズ展開のスケーリングを厳密に充たす。

計算ノート

ここではレイリーピストンに対するランジュバン方程式 (5.15) の導出に関わる、計算をまとめておく。マスター方程式 (4.56) に対するクラマース・モヤル展開は次の式で与えられる：

$$\frac{\partial}{\partial t} P(V, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\varepsilon)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial V^n} \alpha_n(V) P(V, t). \quad (5.21)$$

ここでクラマース・モヤル係数 α_n は

$$\alpha_n(V) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{Y} \mathcal{Y}^n \overline{W}(\mathcal{Y}; V) = \frac{\rho S}{4} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{Y} \mathcal{Y}^n |\mathcal{Y}| \phi_{eq} \left(V + \frac{\mathcal{Y}}{2} \right) \quad (5.22)$$

で与えられる。ここで、低次の係数について具体的に計算すると

$$\alpha'_1(0) = \frac{\rho S}{2} \int_0^{\infty} d\mathcal{Y} \mathcal{Y}^2 \left. \frac{d\phi_{eq}(V + \mathcal{Y}/2)}{dV} \right|_{V=0} = -8\rho S \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi m}}, \quad (5.23)$$

$$\alpha_2(0) = \frac{\rho S}{2} \int_0^{\infty} d\mathcal{Y} \mathcal{Y}^3 \phi_{eq}(\mathcal{Y}/2) = 16\rho S \sqrt{\frac{(k_B T)^3}{2\pi m^3}}, \quad (5.24)$$

を得る。これらの結果は式 (5.19) を意味している。

5.2.4 システムサイズ展開の摂動補正

今まで説明したシステムサイズ展開の手法は主要項で打ち切ることが前提にした上で説明した。この計算は当然主要近似で止める必要はなく、摂動的な計算も可能である。例えば章 4.6.2 で扱った Brownian ラチェットであるが、ラチェットの進む向きを調べるには ε の 0 次摂動だけでは不十分であり、1 次摂動まで取り入れる必要がある。例えば $\varepsilon \equiv \sqrt{m/M}$ と置くと定常速度は

$$\langle V \rangle = \varepsilon \rho_1 \rho_2 (1 - \sin^2 \theta_0) \sqrt{\frac{\pi k_B}{8M}} \frac{(T_1 - T_2) \sqrt{T_1}}{[2\rho_1 \sqrt{T_1} + \rho_2 \sqrt{T_2} (1 + \sin \theta_0)]^2} + O(\varepsilon^2). \quad (5.25)$$

となる。興味があれば文献 [36] の計算を追えばよい。

Pawula の定理について

ここでクラマースモヤル展開および、システムサイズ展開に関する注意点を Pawula の定理の観点から述べておく。システムサイズ展開を行うと、主要近似としてクラマースモヤル展開が 2 次で打ち切れる。システムサイズ展開は ε に関する漸近展開として定式化しているので、1 次摂動などの項を計算可能である。その場合、クラマース・モヤル展開は 3 次や 4 次の項で打ち切られることになる。そういう意味で、クラマースモヤル展開は摂動的な展開になってはいる。

しかし、この摂動論は高次の項に関していうと確率論的に微妙な問題点を含んでいる。これはテクニカルな問題だが、しばしば問題になりうるので知っておいてもよいと思われる。これを理解する際に役立つ定理が Pawula の定理である。Pawula の定理によれば、クラマースモヤル係数は独立に設定できない。クラマースモヤル係数について

$$\alpha_{2k}(v) = 0 \text{ がある } k \geq 1 \text{ に対して成立するなら, } n \geq 3 \text{ で } \alpha_n(v) = 0 \quad (5.26)$$

が成り立つ。この要請は**確率の非負性**から来る。逆に言うと、この要請を充たさない展開を行うと、確率分布の非負性が破壊される。つまり**確率論的に健全な範囲で打ち切りが可能なのは 2 次まで**でし

かない，ということだ．システムサイズ展開の高次摂動項を計算すると，負の確率分布が出てきた状態で摂動展開を行うことになる．

だからといって，「システムサイズ展開について高次摂動をしてはいけない」というわけでは必ずしもない．これはなぜだろうか？システムサイズ展開の論理構造を考えてみよう．まずマスター方程式が与えられる．マスター方程式は確率分布 $P_t^\varepsilon(v)$ についての時間発展方程式であり，この段階では確率論的に健全な式になっているとする ($\int dv P_t^\varepsilon(v) = 1, P_t^\varepsilon(v) \geq 0$)．ここで，今扱っている方程式が確率論にかかわっていることをまず忘れよう．というのは， $P_t^\varepsilon(t)$ を確率分布として正常に保ったまま摂動展開することは簡単ではないからだ．事実，健全な確率分布に対して低次摂動で打ち切ると，確率論的に非健全になる例は山ほど考えつく．例えば，

$$P^\varepsilon(v) = \frac{(1+\varepsilon)}{2} e^{-(1+\varepsilon)|v|} \quad (5.27)$$

に対して摂動展開すると，

$$P^\varepsilon(v) = P_{(0)}(v) + \varepsilon P_{(1)}(v) + \dots = \frac{1}{2} e^{-|v|} + \frac{\varepsilon(1-|v|)}{2} e^{-|v|} + \dots \quad (5.28)$$

但し，

$$P_{(0)}(v) = \frac{1}{2} e^{-|v|}, \quad P_{(1)}(v) = \frac{(1-|v|)}{2} e^{-|v|}. \quad (5.29)$$

今摂動を1次で打ち切ると， $v \rightarrow \infty$ で非常に小さい負の確率が現れることがわかる．すなわち，**確率分布を素朴に摂動展開すると確率論的な性質を破壊しながら展開していくことになる**．しかし，この負の確率はすそ野の非常に小さいところでしか関わって来ない．なので，十分速く確率が減衰するのならば，モーメントなどのように裾野があまり効かない量を計算するときは実用に耐える可能性がある．以上の論理を踏まえると，マスター方程式を展開するときに， $P_t^\varepsilon(v)$ が確率分布だと忘れ，ただの偏微分積分方程式だと思い込んで展開していることがわかる．その意味では高次摂動項が計算でき，モーメントのように性質の良い量だけを記述するならばその結果を信用できる可能性がある．この辺は適時問題に応じて検討する必要がある（これを踏まえると，システムサイズ展開は裾野の領域ではやはり正しいとは限らないことがわかると思われる．システムサイズ展開は殆どの確率でランジュバン方程式+その摂動で描けることを主張していても，本当に極端なレアイベントの領域で正しい保証は全くない．つまりレアイベントを記述する出発点としてランジュバン方程式を使うときはその「レア度」を適時評価しておく必要があると思われる）．

もうすこし数学的な言い方をすると，システムサイズ展開は ε についての素朴な摂動展開になっていて， $v = O(1)$ では正しくても， $v \gg 1$ の領域でも正しいとは限らない（上の例だと $v \gg O(\varepsilon^{-1})$ で $|P_{(0)}| \ll \varepsilon |P_{(1)}|$ となって破綻する）．即ち， v について一様な摂動展開ではないということである．しかし，その様な v の領域では確率分布が十分減衰しているため，モーメントなどの安定量を計算するときは，摂動が破たんする領域のイベントは寄与しないので，正しい答えを与えることができる．

5.2.5 揺動散逸関係との関わり

システムサイズ展開を用いると，マスター方程式からランジュバン方程式が導出される．ここで着目すべき点として次のようなことがある

1. 元々は状態依存性を持つ1つのポアソンノイズに過ぎなかったのに，散逸項と揺動項という2つの効果に自発的に分離する．これはマスター方程式という純粋な確率モデルから決定論的な散逸項が出てきたということである．
2. 自発的に第2種揺動散逸関係式が充たされる
3. 線形ランジュバン方程式が現れる（非線形摩擦や乗法的ガウスノイズが現れない）

特に線形ランジュバン方程式しか現れないことが注目に値する

ここでシステムサイズ展開では、揺動と散逸は同一起源をもっていることに着目しよう。すなわち、揺動と散逸は独立ではなく、同じ環境から現れてきている。同一起源をもつ以上、両者を独立に設定することはできない。これは重要な事実で、例えば次のような非線形ランジュバン方程式をモデル化の出発点に採ることの物理的妥当性などに関わってくる：

$$\frac{d\hat{V}}{dt} = -\alpha(\hat{V}) + \beta(\hat{V}) \cdot \hat{\xi}^G. \quad (5.30)$$

Van Kampen はこういう非線形ランジュバン方程式の使用にはかなり批判的で、実際に批判するための論文も書いている。特に適当に $\alpha(\hat{V})$ と $\beta(\hat{V})$ を自由に設定しまうと、モデルが熱力学第2法則と反してしまう（詳細釣り合いが破れる）ことも指摘している。なので、非平衡揺らぎならまだしも、平衡揺らぎのモデルとして非線形ランジュバン方程式を使うときは気を付けた方がよい。実際、非線形ランジュバン方程式をシステムサイズ展開の文脈で導出するには、摩擦の効果がなくなる時しか現れない。このことを次に議論しよう。

5.3 非線形ランジュバン方程式（乗法的ノイズ）の導出

確率微分方程式を勉強すると、数学的に自然な発想として、非線形ランジュバン方程式を使いたくなる。ここではシステムサイズ展開で非線形ランジュバン方程式の導出を行う。詳細は Van Kampen の教科書を読むのがよい。しかし、非線形ランジュバン方程式の使用には批判がある。それはシステムサイズ展開を使って導出する際に、そんなに物理的に自然な設定ではないと思われるからだ、

5.3.1 乗法的ノイズ（摩擦がないとき）

システムサイズ展開を振り返る。マスター方程式

$$\frac{\partial P(v, t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} dy [W_{\varepsilon}(y; v - y)P(v - y, t) - W_{\varepsilon}(y; v)P(v, t)] \quad (5.31)$$

のカーネルが次のスケーリングを充たすとする：

$$W_{\varepsilon}(y; v)dy = \overline{W}(\mathcal{Y}; v)d\mathcal{Y} \iff W_{\varepsilon}(y; v) = \frac{1}{\varepsilon} \overline{W}\left(\frac{y}{\varepsilon}; v\right). \quad (5.32)$$

ここでクラマースモヤル展開

$$\frac{\partial}{\partial t} P(V, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\varepsilon)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial V^n} \alpha_n(V) P(V, t), \quad \alpha_n(V) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{Y} \mathcal{Y}^n \overline{W}(\mathcal{Y}; V) \quad (5.33)$$

の係数についてノイズの安定性についての仮定を変更する。散逸項が1次の係数に由来することを物理的描像として念頭に置き、その散逸が存在しないとする：

$$\alpha_1(V) = 0. \quad (5.34)$$

この場合、引き伸ばされた時間として

$$\tau \equiv \varepsilon^2 t \quad (5.35)$$

を導入する。この時間の定義は前の定義 (5.13) と異なる点に注意。システムサイズ展開のスケーリングは状況設定で変化し、それぞれに異なる結果を導出することになるからだ。結果、クラマースモヤル展開は $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限で

$$\frac{\partial}{\partial \tau} P(V, \tau) = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-\varepsilon)^{n-2}}{n!} \frac{\partial^n}{\partial V^n} \alpha_n(V) P(V, \tau) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial V^2} \alpha_2(V) P(V, \tau) + O(\varepsilon) \quad (5.36)$$

となり，乗法的ノイズが現れる，

$$\frac{d\hat{V}}{dt} = \sqrt{\alpha_2(\hat{V})} \cdot \hat{\xi}^G. \quad (5.37)$$

5.3.2 より一般の場合

より一般的には「散逸が十分小さい」時に乗法的ノイズが現れ，非線形ランジュバン方程式が導出される．具体的にはマスター方程式のカーネルが，次のより一般的なスケージングを充たすとする：

$$W_\varepsilon(y; v) = \frac{1}{\varepsilon} \left[\bar{W}_0 \left(\frac{y}{\varepsilon}; v \right) + \varepsilon \bar{W}_1 \left(\frac{y}{\varepsilon}; v \right) + \dots \right]. \quad (5.38)$$

この場合のクラマースモヤル展開は

$$\frac{\partial P_t(V)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \varepsilon^{n+m}}{n!} \frac{\partial^n}{\partial V^n} \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_{n,m}(V) P_t(V), \quad \alpha_{n,m}(V) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{Y} \mathcal{Y}^n \bar{W}_m(\mathcal{Y}; V) \quad (5.39)$$

である．ここで散逸が十分弱いと仮定する．具体的には

$$\alpha_{1,0}(V) = 0 \quad (5.40)$$

とする．この時，

$$\frac{\partial P_t(V)}{\partial t} = \varepsilon^2 \left[-\frac{\partial}{\partial V} \alpha_{1,1}(V) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial V^2} \alpha_{2,0}(V) \right] + O(\varepsilon^3). \quad (5.41)$$

となるので，引き延ばされた時間スケール (5.35) を導入すると， $\varepsilon \rightarrow 0$ 極限で

$$\frac{d\hat{V}}{dt} = \alpha_{1,1}(\hat{V}) + \sqrt{\alpha_{2,0}(\hat{V})} \cdot \hat{\xi}^G. \quad (5.42)$$

を導出することができる．この様な状況設定では非線形ランジュバン方程式を用いることは適切だが，それなりに物理的に変わった設定ではある．また，非線形ランジュバン方程式について熱力学第2法則との整合性を考えると， $\alpha_{1,1}(\hat{V})$ と $\alpha_{2,0}(\hat{V})$ とを独立に設定することはあまり薦められない (第2法則に反しないためには，詳細つり合いを充たすように設定すればよい．フォッカー・プランク方程式の詳細つり合いは Gardiner の教科書 [5] に載っているので興味があれば調べるのがよい)．このように，線形ランジュバン方程式を超えたモデル化は注意して行った方がよい．

5.3.3 解析的性質

非線形ランジュバン方程式も所詮は2階の偏微分方程式なので，固有値や Green 関数を求めたりする際にそこそこ解析的な手法が使えることが多い．特に定常分布に関しては任意の非線形ランジュバン方程式に対して得ることができる．事実，定常分布は次の式で与えられる：

$$0 = \left[-\alpha_{1,1}(V) + \frac{1}{2} \frac{d}{dV} \alpha_{2,0}(V) \right] P_{SS}(V) \implies P_{SS}(V) = \frac{C}{\alpha_{2,0}(V)} \exp \left[2 \int dV \frac{\alpha_{1,1}(V)}{\alpha_{2,0}(V)} \right]. \quad (5.43)$$

5.4 非ガウスランジュバン方程式の導出

ここまで導出したのはガウス型の線形 (非線形) ランジュバン方程式だった．システムサイズ展開は本質的にただの弱結合の確率過程論だが，ノイズの安定性などの条件次第で異なる結果を導出する．事実．線形ランジュバン方程式を導出した時と，非線形ランジュバン方程式を導出した時とで，時間・空間のスケージング変数まで変わっていることに注意．なので，うまく状況を設定すると非ガウス型

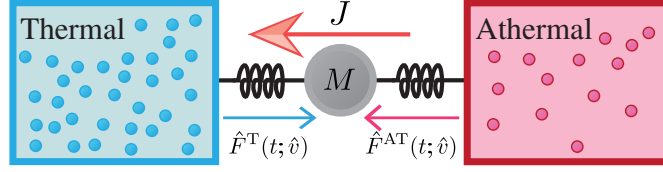


Figure 5.3: 「ブラウン」粒子が2つの環境に接しているとする。図は文献 [46] から引用。

のランジュバン方程式 (NGL と略する) も導出できる。例えば、節 4.6.3 の粉体ローターの設定では NGL が導出できる。

NGL の導出で重要なのは、**揺動と散逸の起源が異なる**ように問題を設定するという点である。揺動と散逸が同じ起源をもつようにモデルを組むと、ガウス型のランジュバン方程式が出てくるのは今までのシステムサイズ展開の理論からわかることである。そこで、次は複数の確率的環境を用意する。具体的には図 5.3 のように2つの熱浴と接していると仮定する。片方は平衡状態の熱浴（例えば、水）であり、片方は非平衡状態の熱浴（例えば、粉体ガス）である。

この系の運動方程式は熱揺らぎを $\hat{F}^T(t; \hat{v})$ 、非熱揺らぎを $\hat{F}^{AT}(t; \hat{v})$ と置くと

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = \hat{F}^T(t; \hat{v}) + \hat{F}^{AT}(t; \hat{v}) \quad (5.44)$$

と書けるだろう。ここまでの議論から熱揺らぎ $\hat{F}^T(t; \hat{v})$ については

$$\hat{F}^T(t; \hat{v}) = -\gamma\hat{v} + \sqrt{2\gamma T}\hat{\xi}^G \quad (5.45)$$

とモデル化できる⁵。更に、非熱揺らぎ $\hat{F}^{AT}(t; \hat{v})$ については、環境と弱結合（システムサイズ展開のスケーリング）を充たすとすると：

$$\hat{F}^{AT}(t; \hat{v}) = \varepsilon \hat{\xi}_{\bar{W}(\mathcal{Y}; \hat{v})}^P \iff W_\varepsilon(y; \hat{v}) = \frac{1}{\varepsilon} \bar{W}\left(\frac{y}{\varepsilon}; \hat{v}\right). \quad (5.46)$$

ここで次の仮定を置く：

1. 熱的散逸 γ が十分大きい。数式で書くと、 γ が ε に依存しない定数であるということ。あるいは非熱的散逸の係数を γ^{AT} と書くと、 $\gamma^{AT} = O(\varepsilon)$ ということがシステムサイズ展開の計算からわかるので、

$$\gamma \gg \gamma^{AT} \quad (5.47)$$

ということ。

2. 熱揺らぎが非熱揺らぎに比べて同程度の大きさ、もしくは小さいこと：

$$T = \varepsilon^2 \mathcal{T} \quad (5.48)$$

但し、 \mathcal{T} は ε に寄らない定数。

これらの仮定を置くと、図 5.4 のように揺動と散逸の起源が分離する。これらを仮定してクラマースモヤル展開をやり直す。そうすると揺動と散逸の大きさのバランスが崩れ、システムサイズ展開の計算が変わる。具体的にはクラマースモヤル係数 $\alpha_n(V) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{Y} \mathcal{Y}^n \bar{W}(\mathcal{Y}; V)$ を使って

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(v) = \gamma \left[\frac{\partial}{\partial v} v + \varepsilon^2 \mathcal{T} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] P_t(v) + \int dy [W_\varepsilon(y; v-y) P_t(v-y) - W_\varepsilon(y; v) P_t(v)]. \quad (5.49)$$

⁵あるいは一度システムサイズ展開を適応してガウス型のランジュバン方程式は導出し終わっていると解釈してもいい。

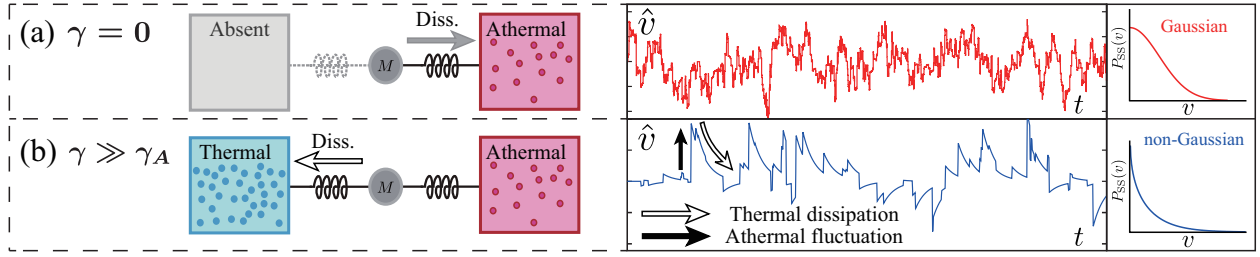


Figure 5.4: 熱散逸が十分大きい仮定をおく．散逸は主に熱揺らぎから寄与し，揺動は非熱揺らぎから寄与する．つまり，揺動と散逸の起源が明瞭に分離する．図は文献 [46] から引用．

ここでスケール変数として

$$V = \frac{v}{\varepsilon} \quad (5.50)$$

を導入する．このスケールは通常システムサイズ展開と異なるが，今置いた仮定の下では最適なスケール変数はこれになる．実際， $y = \varepsilon \mathcal{Y}$ を導入して

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P_t(V) &= \gamma \left[\frac{\partial}{\partial V} V + \mathcal{T} \frac{\partial^2}{\partial V^2} \right] P_t(v) + \int d\mathcal{Y} [\bar{W}(\mathcal{Y}; \varepsilon(V - \mathcal{Y})) P_t(V - \mathcal{Y}) - \bar{W}(\mathcal{Y}; \varepsilon V) P_t(V)] \\ &= \gamma \left[\frac{\partial}{\partial V} V + \mathcal{T} \frac{\partial^2}{\partial V^2} \right] P_t(v) + \int d\mathcal{Y} \bar{W}(\mathcal{Y}; 0) [P_t(V - \mathcal{Y}) - P_t(V)] + O(\varepsilon) \end{aligned} \quad (5.51)$$

となる．この式は積分が畳み込み型になっており，白色非ガウスノイズ（白色ポアソンノイズの組み合わせ）に駆動されるランジュバン方程式と等価である，

$$\frac{d\hat{V}}{dt} = -\gamma V + \sqrt{2\gamma\mathcal{T}} \hat{\xi}^G + \hat{\xi}^{\text{NG}}, \quad \hat{\xi}^{\text{NG}} = \hat{\xi}_{\bar{W}(\mathcal{Y}; 0)}^{\text{CP}}(t). \quad (5.52)$$

この系は元の系と異なって可解モデルになっている．実際，系の定常分布は

$$P_{\text{SS}}(V) = \int \frac{ds}{2\pi} \exp \left[-isV + \int_0^s \frac{ds' \Phi(s')}{\gamma s'} \right], \quad \Phi(s) \equiv \int d\mathcal{Y} \bar{W}(\mathcal{Y}; 0) (e^{is\mathcal{Y}} - 1) \quad (5.53)$$

で与えられる．この導出は非線形摩擦があるときにも拡張できる．更に，非線形摩擦があるときも，定常解はフルオーダーの摂動解が利用できる．詳細は文献 [38] を参照．

具体例：粉体ローター

上記の手法が使える設定として，粉体ローターがある．例えば図 5.5 のように，流体由来の熱散逸と，粉体由来の非熱揺らぎが共存する設定を考える．この設定では気体分子運動論の手法を使ってモデル化ができる．更に，上記の仮定が適応でき，システムサイズ展開の一般化として非ガウス型のランジュバン方程式が微視的に導出できる．

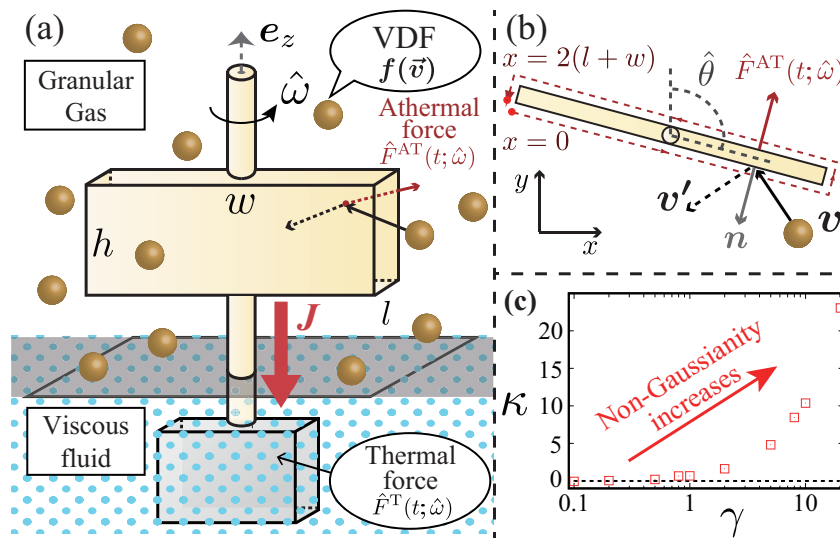


Figure 5.5: 熱散逸が十分大きい仮定をおく．散逸は主に粘性流体から寄与し，揺動は粉体の衝突から寄与する．つまり，揺動と散逸の起源が明瞭に分離する．図は文献 [46] から引用．

Bibliography

- [1] R. Brown, *Phil. Mag.* **4**, 121 (1828)
- [2] A. Einstein, *Ann. Phys. (Leipzig)* **17**, 549 (1905).
- [3] P. Langevin, *Comptes Rendues* **146**, 530 (1906).
- [4] F. Black and M. Scholes, *Journal of Political Economy* **81**, 637 (1973).
- [5] C. Gardiner, *Stochastic Methods*, 4th ed. (Springer-Verlag, Berlin, 2009).
- [6] N.G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North-Holland, Amsterdam, 2007), 3rd ed.
- [7] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation*, 2nd ed. (Springer-Verlag, Berlin, 1989).
- [8] H. Haken, *Synergetics: Introduction and Advanced Topics*, 3rd ed. (Springer-Verlag, Berlin, 2004).
- [9] K. Kanazawa, *Statistical mechanics for athermal fluctuation: non-Gaussian noise in physics.* (Springer Theses, Nature-Springer, 2017).
- [10] D. Applebaum, *Lévy Processes and Stochastic Calculus* (Cambridge, 2009), 2nd ed.
- [11] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistical and Polymer Physics*, 5th ed. (World Scientific, Singapore, 2009).
- [12] N.G. van Kampen, *Can. J. Phys.* **39**, 551 (1961).
- [13] T. Li, S. Kheifets, D. Medellin, and M.G. Raizen, *Science* **328**, 1673 (2010).
- [14] S. Kheifets, A. Simha, K. Melin, T. Li, and M.G. Raizen, *Science* **343**, 1493 (2014).
- [15] 早川尚男, *非平衡統計力学* (サイエンス社, 2007) .
- [16] J.-P. Hansen and I.R. McDonald, *Theory of Simple Liquids*. 4th ed. Academic Press (2013).
- [17] A. Siegel, *J. Math. Phys.* **1**, 378 (1960).
- [18] C.T.J. Alkemade, N.G. van Kampen, and D.K.C. MacDonald, *Proc. Roy. Soc. Lond. Ser. A* **271**, 449 (1963).
- [19] H. Lorentz, *Arch. Néerl.* **10**, 336 (1905).
- [20] N.V. Brilliantov and T.Pöschel, *Kinetic of Theory of Granular Gases*, Oxford, (2003).

- [21] G. Gallavotti, Phys. Rev. **185**, 308 (1969).
- [22] H. Spohn, Comm. Math. Phys. **60**, 277 (1978).
- [23] C. Boldrighini, L.A. Bunimovich, and Y.G. Sinai, J. Stat. Phys. **32**, 477 (1983).
- [24] C. Cercignani, R. Illner, M. Pulvirenti: *The mathematical theory of dilute gases*. Applied Mathematical Sciences **106** (New York: Springer-Verlag, 1994).
- [25] A. Fruleux, R. Kawai, and K. Sekimoto, Phys. Rev. Lett. **108**, 160601 (2012).
- [26] 金澤輝代士, 微小非平衡系の熱力学的安定性と制御限界, 計測と制御 Vol.55 No.04 (2016).
- [27] S. Chapman and T.G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases* (Cambridge University Press, Cambridge, 1970), 3rd ed.
- [28] P. Résibois and M. de Leener, *Classical Kinetic Theory of Liquids* (Wiley, New York, 1977).
- [29] N.V. Brilliantov and T.Pöschel, *Kinetic of Theory of Granular Gases* (Oxford University Press, Oxford, 2003).
- [30] N.G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North-Holland, Amsterdam, 2007), 3rd ed.
- [31] N.G. van Kampen, Can. J. Phys. **39**, 551 (1961).
- [32] C.T.J. Alkemade, N.G. van Kampen, and D.K.C. MacDonald, Proc. Roy. Soc. Lond. Ser. A **271**, 449 (1963).
- [33] A. Siegel, J. Math. Phys. **1**, 378 (1960).
- [34] H. Grad, Commun. Pure Appl. Math. **2**, 331 (1949).
- [35] C. Cercignani, Trans. Theory Stat. Phys. **2**, 211 (1972).
- [36] C. Van den Broeck, R. Kawai, and P. Meurs, Phys. Rev. Lett. **93**, 090601 (2004); P. Meurs, C. Van den Broeck, and A. Garcia, Phys. Rev. E **70**, 051109 (2004).
- [37] L. Pareschi and G. Toscani, *Interacting multiagent systems: kinetic equations and Monte Carlo methods* (Oxford University Press, Oxford, 2013).
- [38] K. Kanazawa, T. Sueshige, H. Takayasu, and M. Takayasu, Phys. Rev. Lett. **120**, 138301 (2018); Phys. Rev. E **98**, 052317 (2018).
- [39] P. Eshuis, K. van der Weele, D. Lohse, and D. van der Meer, Phys. Rev. Lett. **104**, 248001 (2010).
- [40] J. Talbot, R.D. Wildman, and P. Viot, Phys. Rev. Lett. **107**, 138001 (2011).
- [41] A. Gnoli, A. Petri, F. Dalton, G. Pontuale, G. Gradenigo, A. Sarracino and A. Puglisi, Phys. Rev. Lett. **110**, 120601 (2013).
- [42] A. Gnoli, A. Puglisi, and H. Touchette, Europhys. Lett. **102**, 14002 (2013).
- [43] A. Gnoli, A. Sarracino, A. Puglisi, and A. Petri, Phys. Rev. E **87**, 052209 (2013).

- [44] L.O. Gálvez and D. van der Meer, *J. Stat. Mech.* (2016) 043206.
- [45] R. Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume, *Statistical Physics II*, 2nd ed. (Springer, Berlin, 1991).
- [46] K Kanazawa, TG Sano, T Sagawa, and H Hayakawa, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 090601 (2015); *J. Stat. Phys.* **160**, 1294 (2015).