

速習・確率過程入門
～拡散現象のモデリング～

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	6
1.4	数学の準備～このノートで使う計算テクニックのまとめ～	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	8
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	9
1.5.1	拡散方程式の解	9
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	気体分子運動論	30
4.1	ブラウン運動の基礎方程式 (ランジュバン方程式)	30
4.2	ランジュバン方程式の簡易的な導出	31
	4.2.1 状態方程式	31
	4.2.2 ボルツマン分布	32
	4.2.3 ランジュバン方程式の係数決定	32
4.3	ランジュバン方程式の微視的導出	33
	4.3.1 レイリーピストン	33
	4.3.2 漸近展開～ランジュバン方程式の導出～	35
4.4	一般論：ファン・カンペンのシステムサイズ展開	36
4.5	練習問題	37
	4.5.1 ボルツマン分布の導出	37
	4.5.2 エネルギー等分配則	37
5	演習問題の略解	38

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。

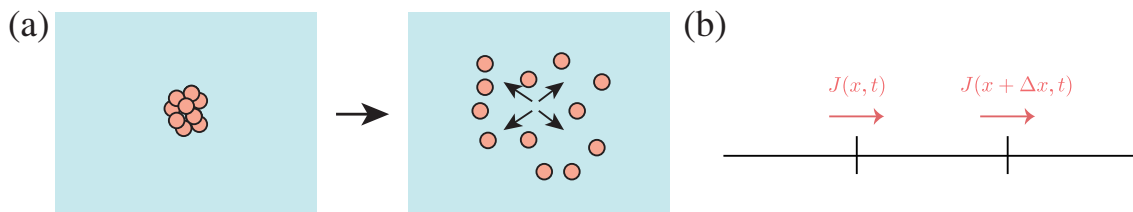


Figure 1.1: (a) 多数の粒子が拡散する。 (b) 連続の式のイメージ。

¹ $J > 0$ は、粒子が正の方向に移動することを表す。

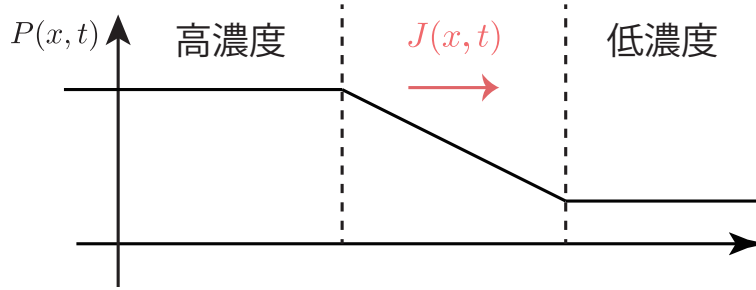


Figure 1.2: フィックの法則. 経験的に、拡散は高濃度から低濃度方向に粒子は流ることが知られている. これを踏まえると、 $J(x, t) \propto -\partial P(x, t)/\partial x$ となることが見込まれ、また実験的にもこの式が正しいことが知られている.

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、分子の揺らぎと市場での拡散現象を取り上げる².

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.

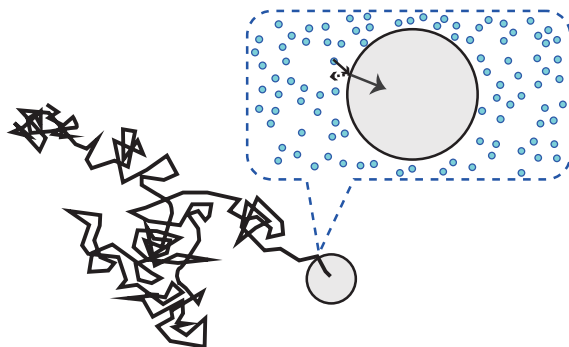


Figure 1.3: ブラウン粒子（1粒子）が拡散する。

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、この講義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が次の式であることがわかる：

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

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。

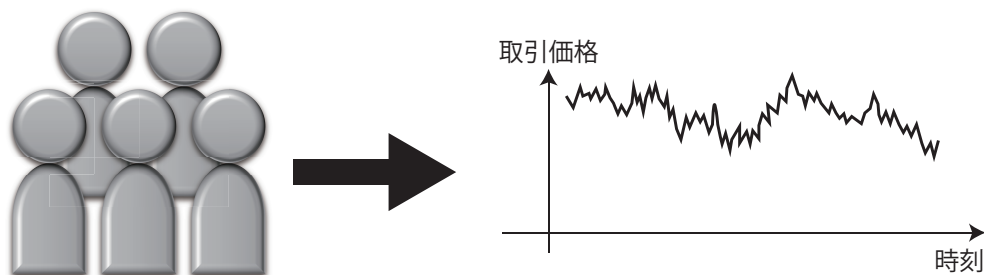


Figure 1.4: 株価市場・外国為替市場における価格の動き.

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。

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4つがある：

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。

- 拡散現象の代表例であるブラウン運動の数理を理解する。
- ブラウン運動を記述するランジュバン方程式を導出する。
- 気体分子運動論からアボガドロ定数を推定する。
- 確率的モデリングは現象を理解する (e.g., 原子の存在) 上で重要であることを理解する。

以上のように、科学的な事実 (原子の存在) を証明するにあたり、モデル (ブラウン運動) を構築し、そこから内部のパラメータを推定していく (アボガドロ数の推定) ことを目的とする。

1.4 数学の準備～このノートで使う計算テクニックのまとめ～

1.4.1 Taylor 展開

ここで Taylor 展開の復習を行う。この講義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^∞ 級程度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,

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

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。

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。

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。

1.4.4 確率変数・期待値の記号

この講義中において、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。

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。

1.4.5 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講義では呼ぶ。

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。

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。

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) 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 :

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

(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 :

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

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

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注目する (第2回~第4回の演習問題9):

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

(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.

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 [5–8] 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。

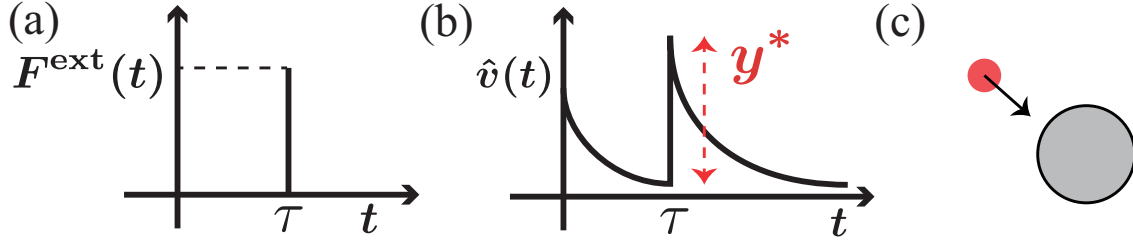


Figure 2.1: (a) 決定的な撃力 $F^{\text{ext}}(t) = y^* \delta(t - \tau)$. (b) その撃力に駆動される系の動力学 ($d\hat{v}/dt = -\hat{v} + F^{\text{ext}}$.) (c) 具体的な例：時刻 τ に粒子が衝突する現象．この図は文献 [9] から引用している．

$v_0) = P_0(v_0)$ 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．

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

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：

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

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）．

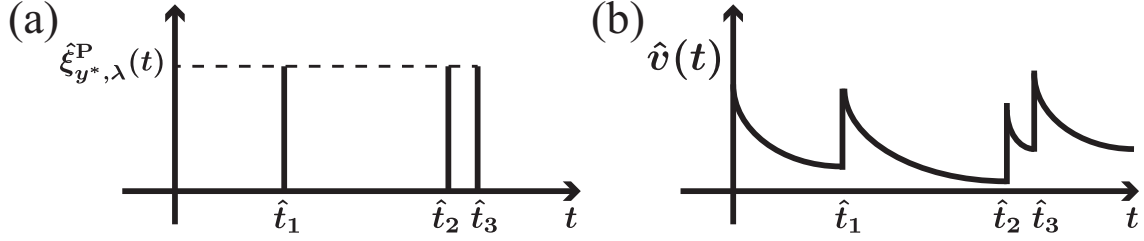


Figure 2.2: (a) ポアソンノイズの典型的な経路. (b) ポアソンノイズに駆動される系の典型的な経路 (但し, $a(\hat{v}) = \hat{v}$ の場合). この図は文献 [9] の図を改変して作成した.

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。

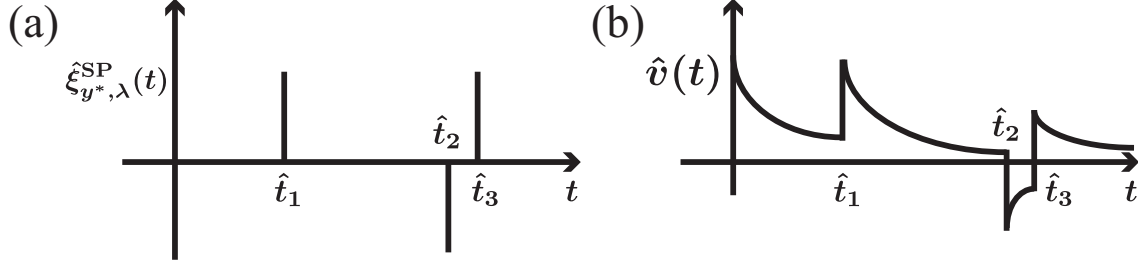


Figure 2.3: (a) 対称ポアソンノイズの典型的なトラジェクトリー． (b) 対称ポアソンノイズに駆動される系の典型的なトラジェクトリー ($a(\hat{v}) = \hat{v}$ の場合)． この図は文献 [9] の図を改変して作成した．

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。

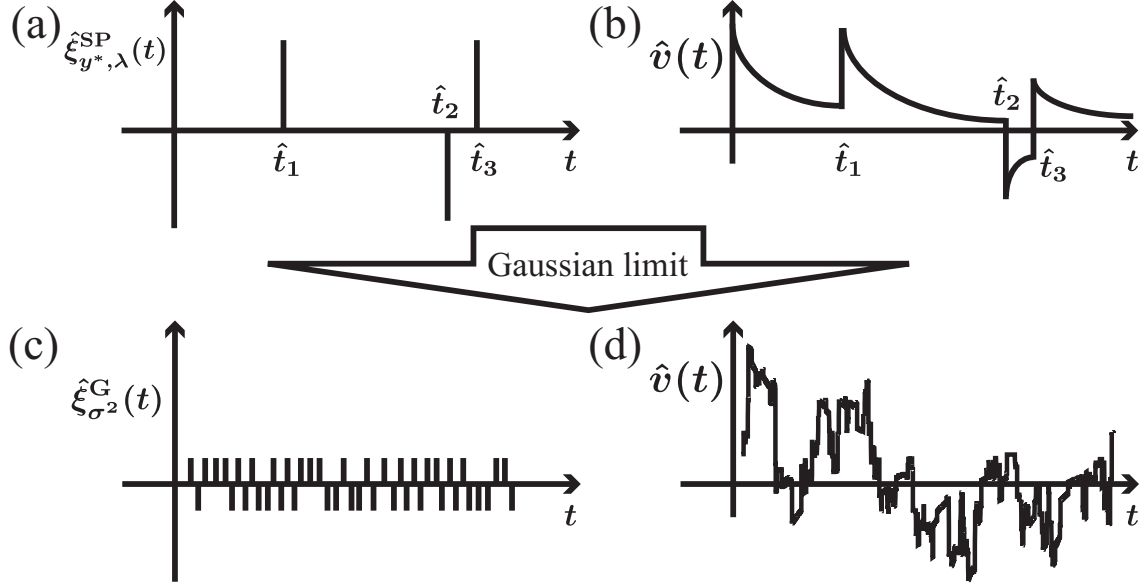


Figure 2.4: (a-b) 対称ポアソンノイズに駆動される系の典型的なトラジェクトリー (特に $a(\hat{v}) = \hat{v}$ の場合). (c-d) 対称ポアソンノイズからのガウス極限 ($y^* \rightarrow 0, \lambda y^{*2} = \sigma^2(\text{const.})$). (c) はガウスノイズの典型的なトラジェクトリー, (d) はガウスノイズに駆動される系の典型的なトラジェクトリー. この図は文献 [9] の図を改変して作成した.

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 [6, 12] 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る, 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)

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

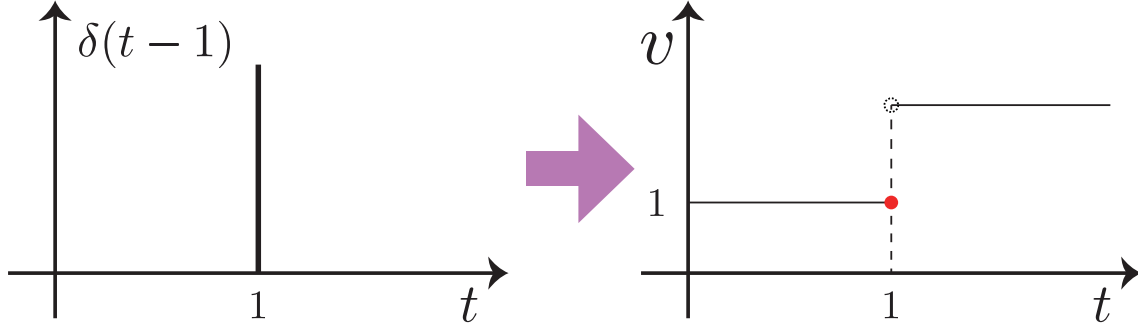


Figure 3.1: δ 関数型の撃力 (a) と, それに対応する $v(t)$ の動き (b). 図 (b) の赤丸での v の値 $v(t) = 1$ を採用するのが伊藤積分のアイデア.

- 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:

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

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期される. 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：

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

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

気体分子運動論

この章から気体分子運動論をもとに、物理における確率過程の基礎理論を説明していく。今まで説明してきた内容はどちらかといえば形式的であり、現実と対応することの根拠についてはふれなかった。ここでは、次の2つの仮説を基にモデルを立てていく：

- 目に見えないかもしれないが、分子が本当に存在する。
- その分子に対して、ニュートン力学が成立する。

以上のことをもとに、最終的には分子論を検証するためにアボガドロ数を測定する方法を考えていく。

4.1 ブラウン運動の基礎方程式（ランジュバン方程式）

ここまではブラウン運動周りの計算テクニック（確率過程の数理）を集中的に説明してきた¹。ここからは数学的テクニックに目を向けるのではなく、物理現象のモデリングに戻ってくることにしよう。ブラウン運動を記述する方程式は次のランジュバン方程式 [3] である²：

$$M \frac{d\hat{v}}{dt} = -\gamma \hat{v} + \sqrt{2\gamma k_B T} \xi^G. \quad (4.1)$$

但し、 $\hat{v} \equiv d\hat{x}/dt$ は速度であり、 M はブラウン粒子の質量であり、 γ は摩擦係数、 $k_B \equiv R/N_A$ はボルツマン定数である。流体力学によると、ブラウン粒子の半径を a 、水の粘性率を η と置くと

$$\gamma = 6\pi a \eta \quad (4.2)$$

と書ける点に注意。この式は次の素朴な考えの元で、運動方程式を立てたものである：

$$M \frac{d\hat{v}}{dt} = (\text{水の粘性摩擦}) + (\text{水分子の衝突によるノイズ}). \quad (4.3)$$

ただし、(水分子の衝突によるノイズ) の分散が $2\gamma k_B T$ になることを節 4.2.3 で導出する。

しかし、オリジナルのランジュバン方程式 (4.1) を実験的にそのまま観測することは歴史的に非常に難しかった³。何故なら、式 (4.1) を検証するには、速度が減衰する時間スケールである

$$\tau_p \equiv \frac{M}{\gamma} \simeq 1 \mu\text{s} \quad (4.4)$$

¹ここまでの内容がわかれば計算の細かな部分に気を取られることなく、現象の本質のみに着目しながらモデリングに進進できるはずである。ちなみに物理学者ランダウは次のことを述べている：「数学をあらかじめ学んでおかないと、物理を勉強する時に問題の数学的な難しさの方に気を取られてしまい、肝心の問題の物理的難しさの方がおろそかになってしまう。」

²数学ではオルンシュタイン・ウーレンベック過程と呼ばれている。

³ちなみにオリジナルのランジュバン方程式 (4.1) を検証するには瞬間的な速度を測定する必要があるが、それが実験的に観測されたのは歴史上 2010 年 [13] が初めてである（非常に最近!! 稀薄気体中で観測した）。更に、水中でのランジュバン方程式については 2014 年 [14] であり、科学的な実験として真面目に揺らぎを調べることはとても大変。

の分解能を持つ観測機器が必要⁴だが、そういう精密な観測が可能になったのは21世紀に入ってからだからだ。そういう「粗い精度」の測定器具しかないときは、速度が減衰する時間を無視することが出来、慣性項 $Md\hat{v}/dt$ を無視することが出来る⁵。つまり、実験器具の観測精度を τ_o としたとき、

$$\tau_p \ll \tau_o \implies \gamma \frac{d\hat{x}}{dt} \simeq \sqrt{2\gamma k_B T} \xi^G. \quad (4.5)$$

この式を過減衰ランジュバン方程式という。歴史的にも実用的にも、この式が代替的に使用される。この式の拡散係数は、今まで習った確率解析を使用すると

$$D = \frac{k_B T}{\gamma} = \frac{RT}{6\pi a \eta N_A} \quad (4.6)$$

となる。拡散係数 D は、平均二乗変位 (Mean Squared Displacement) の関係式

$$\text{MSD}(t) \equiv \langle (\hat{x}(t) - x_0)^2 \rangle = 2Dt \quad (4.7)$$

から測定が可能である⁶。ここからアボガドロ定数が見積もることが出来る：

$$N_A = \frac{RT}{6\pi a \eta D}. \quad (4.8)$$

4.2 ランジュバン方程式の簡易的な導出

では、このランジュバン方程式 (4.1) はどのようにして導出されるのであろうか？ここでは、簡易的な手法によってランジュバン方程式の係数を導出していく。具体的には、ランジュバン方程式 (4.1) の方程式の形状を物理的な直観から仮定して、その係数を分子運動論の観点から導出する。

4.2.1 状態方程式

分子運動論によれば、気体とは自由に運動する分子の集合である。状態方程式が成立する。即ち、体積 V の空間に封入された気体に対して、次の関係式が成り立つ：

$$pV = nRT, \quad (4.9)$$

但し、 p は圧力、 V は体積、 n は粒子の mol 数、 R は気体定数、 T は気体の温度である。今、気体の粒子数を N 、アボガドロ数を N_A 、気体の数密度を ρ とすると

$$p = \rho k_B T, \quad k_B \equiv \frac{R}{N_A}, \quad \rho \equiv \frac{N}{V} \quad (4.10)$$

ここで k_B をボルツマン定数と呼ぶ。気体定数 R は実験的に観測可能な量なので、ボルツマン定数 k_B を測定できれば、アボガドロ定数 N_A を測定できることになる。

⁴半径 $2.8\mu\text{m}$ の水中のビーズのブラウン運動の場合 [14]。稀薄気体中のブラウン運動の場合 $\tau_p \simeq 50 - 150\mu\text{s}$ 程度 [13]。

⁵ここらへんの議論の正当化には煩雑な計算が必要となる。例えば文献 [5] の Adiabatic elimination の章を参照。

⁶MSD の関係式の良いところは、 t が大きくなるにつれてどんどん移動距離が広がり、粗い精度を持つ測定機器でも測定可能な点である。

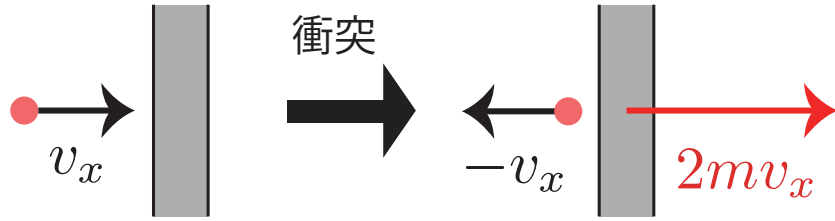


Figure 4.1: 壁に衝突した時の力積

4.2.2 ボルツマン分布

ここで、気体粒子の速度分布を求めよう。気体の速度 $\vec{v} \equiv (v_x, v_y, v_z)$ を考える。気体の速度分布 $f(v_x, v_y, v_z)$ は次のボルツマン分布で与えられる：

$$f(v_x, v_y, v_z) = \phi(v_x)\phi(v_y)\phi(v_z), \quad \phi(v) \equiv \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \exp\left[-\frac{mv^2}{2k_B T}\right] \quad (4.11)$$

ここでは簡易的な導出を行う（もう少しまともな導出を演習で行う）。まず、速度分布がガウス分布（正規分布）であり、 v_x, v_y, v_z が全て独立だと仮定する。更に、各成分の分布が正規分布していると仮定して、

$$f(v_x, v_y, v_z) = \phi(v_x)\phi(v_y)\phi(v_z), \quad \phi(v) \equiv \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{mv^2}{2\sigma^2}\right] \quad (4.12)$$

と置く。ここで、フィッティングパラメータ σ^2 を見積もろう。気体分子運動論によれば、圧力 p を速度分布から次の様に見積もることが出来る：粒子が一回壁にぶつかった時に与える力積は

$$2mv_x \quad (4.13)$$

である（図 4.1）。ここで Δt の時間間隔に、速度 v_x を持つ粒子が面積 S の壁にぶつかる量は

$$\rho S v_x \Delta t \phi(v_x) \quad (4.14)$$

である。よって圧力によって駆動される平均的な力積 $pS\Delta t$ とのつり合いを考えると、

$$pS\Delta t = \int_0^\infty (2mv_x) \times (\rho S v_x \Delta t \phi(v_x)) dv_x = m\rho S \sigma^2 \iff \sigma^2 = \frac{k_B T}{m} \quad (4.15)$$

を得る。これはボルツマン分布を意味する。

4.2.3 ランジュバン方程式の係数決定

上記のボルツマン分布を基に、ランジュバン方程式の係数を決定しよう。今、質量 M のブラウン粒子の運動方程式が

$$M \frac{d\hat{V}}{dt} = -\gamma \hat{V} + \beta \hat{\xi}^G \quad (4.16)$$

と書けるとする。今 β は熱揺らぎの大きさを決めるフィッティングパラメータである。このフィッティングパラメータ β を決めることを考える。確率過程 (4.16) の定常分布がボルツマン分布であると仮定する⁷：

$$P_{SS}(V) = \sqrt{\frac{M}{2\pi k_B T}} \exp\left[-\frac{Mv^2}{2k_B T}\right]. \quad (4.17)$$

⁷質量が m から M に変化した点が気になるかもしれない。気になる人は、より正確な導出であるレイリー・ピストンのボルツマン方程式 (4.26) の定常解がボルツマン分布になることを確かめればよい。

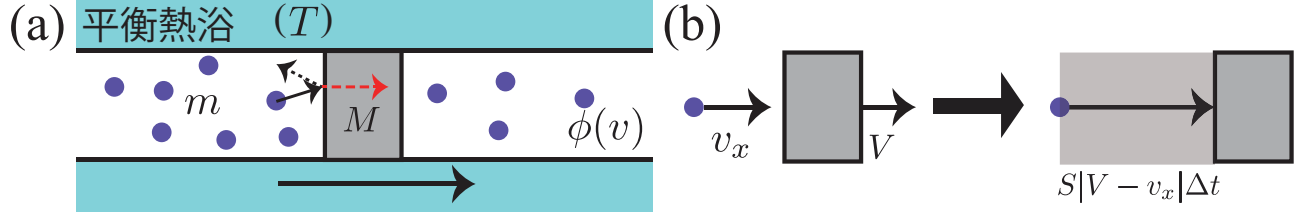


Figure 4.2: (a) 稀薄ガス中のレイリーピストン．稀薄ガスは平衡化し，マクスウェル分布 $\phi(v)$ に従う物とする．(b) 速度 v_x の粒子が衝突する確率を見積もる．単位時間あたりに衝突可能な体積を見積もると体積 $= S|V - v_x|\Delta t$ であり，その中に粒子が存在する平均個数は $\rho\phi(v_x)dv_x \times$ 体積．

この関係を仮定すると，

$$\beta = \sqrt{2\gamma k_B T} \quad (4.18)$$

が導出される．

4.3 ランジュバン方程式の微視的導出

前の章ではランジュバン方程式の形状を仮定した上で，係数を観測可能量から見積もることに専念した．これはモデリングをするうえでの first step というべき姿勢である．そして実際，得られたランジュバン方程式は，幅広い実験の設定のもとで正常に機能している．そこで，より精緻なマイクロモデルを作り，それを近似していくことでランジュバン方程式を体系的に導出する方法論の入門部分を紹介する．ここで導入されるモデルは，より高度な数学を使うと更に体系的に導出することが出来ることを強調しておく⁸．

4.3.1 レイリーピストン

次に，分子運動論をもとにレイリーピストン [12, 17, 18] という 1 次元ブラウン運動の系を考えよう．レイリーピストンは理想気体中の 1 次元ブラウン運動の例であり，図 4.2 の様な設定である．シリンダーの周りに温度 T の熱浴があり，そのために稀薄ガスは平衡化し，マクスウェル分布 $\phi(v)$ している．である．ピストンの質量とガスの質量をそれぞれ M と m とする．ピストンは 1 次元 (図の x 方向) にのみ動き，その速度 V はガス粒子との衝突によって動く物とする．もし速度 v_x の粒子がピストンに衝突すると，運動量保存・反発係数 $e = 1$ の関係から

$$mv_x + MV = mv'_x + MV', \quad e = -\frac{V' - v'_x}{V - v_x} = 1 \quad (4.19)$$

を得る．但し v'_x と V' は衝突後の分子・壁の速度である．この式を解くと，

$$V' \equiv V - \frac{2m}{m+M}(V - v_x), \quad v'_x \equiv v_x + \frac{2M}{m+M}(V - v_x). \quad (4.20)$$

を得る．今，速度のジャンプ幅を $y \equiv V' - V$ と書くと，

$$y = -\frac{2m}{m+M}(V - v_x) \quad (4.21)$$

である．今，壁の速度 V を固定する．この条件の下で，時間間隔 Δt の間に速度 v_x の粒子が入射する確率は

$$\tilde{p}(v_x|V)\Delta t dv_x = \rho S|V - v_x|\Delta t \phi(v_x) dv_x \quad (4.22)$$

⁸ その内容については本講義の内容を大幅に超えるため紹介しない．興味がある人は「運動論・液体論」をキーワードに調べてみると良い．例えば，文献 [15, 16] などが有名．

である。但し、 $\tilde{p}(v_x|V)$ は単位時間当たりの入射確率密度。ここから、単位時間当たりのジャンプサイズ y の分布 $\lambda(y|V)$ は、ヤコビアン関係から

$$\lambda(y|V)dy = \tilde{p}(v_x|V)dv_x \quad (4.23)$$

$$\iff \lambda(y|V) = \frac{\rho S(m+M)^2}{4m^2} |y| \phi\left(V + \frac{m+M}{2m}y\right) \quad (4.24)$$

となる。この単位時間当たりジャンプサイズ分布 $\lambda(y|V)$ を一般のマスター方程式に代入すると、次のボルツマン方程式を得る⁹¹⁰：

$$\frac{\partial P(V,t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} dy [\lambda(y|V-y)P(V-y,t) - \lambda(y|V)P(V,t)] \quad (4.25)$$

$$\iff \frac{\partial P(V,t)}{\partial t} = \rho S \int_{-\infty}^{\infty} dv_x |v_x - V| \{P(V',t)\phi(v'_x) - P(V,t)\phi(v_x)\}. \quad (4.26)$$

この系を確率微分方程式表示すると、次の様になる：

$$\frac{d\hat{V}}{dt} = \hat{\xi}_{\lambda(y|\hat{V})}^{\text{CP}}. \quad (4.27)$$

これがレイリーピストンを記述するマイクロモデルである。また、ボルツマン方程式 (4.26) の定常解として

$$P_{\text{SS}}(V) = \lim_{t \rightarrow \infty} P(V,t) = \sqrt{\frac{M}{2\pi k_B T}} \exp\left[-\frac{Mv^2}{2k_B T}\right] \quad (4.28)$$

を充たすことが示せ、簡易的導出の仮定と整合することがわかる。

見て分かる通り、ピストンの運動はマイクロな動力学からモデル化するとランジュバン方程式に従っておらず、熱揺らぎと系の状態変数 \hat{V} には強い相関がある。事実、線形ボルツマン方程式 (4.27) には、ホワイトノイズの項も線形摩擦項も存在しない。歴史的にはこの様なマイクロ複雑なモデルに従うはずのブラウン運動が、なぜランジュバン方程式のような単純なモデルで近似的に記述できてしまうかが問題になっていた。この様なランジュバン方程式を導出するには、多数の近似が必要となるだろう。例えば、次の様な条件・近似が必要となる：

条件 (1) ノイズのガウス化：

ランジュバン方程式中に現れるノイズ項はガウス型である。ところが、線形ボルツマン方程式 (4.27) 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。ガウスノイズとは、非常にジャンプサイズの小さなポアソンノイズの極限であり、ジャンプサイズがどんどん小さくなる極限を取る必要がある。

条件 (2) 線形摩擦の出現：

ランジュバン方程式には線形摩擦の項が存在する。これは、定常速度周りの揺らぎの十分小さいことを表す。何故なら一般的に速度 \hat{V} が小さければ、摩擦についてテイラー展開することが出来、

$$F_{\text{friction}}(\hat{V}) \simeq -\gamma\hat{V} + O(\hat{V}^2) \quad (4.29)$$

のように近似できると期待できるからだ。

つまりいずれにせよ、ノイズの影響が十分小さな極限を考える必要があるように思われる。そして実際、ノイズが十分小さな極限では上記の近似計算が正しいことが示される。

⁹正確には線形ボルツマン方程式、ボルツマン・ローレンツ方程式と呼ぶ [19–23]。

¹⁰実はこの手のボルツマン方程式は、ニュートン力学から厳密な数学を通じて導出出来る。例えば、数学者 Carlo Cercignani がボルツマン方程式の厳密証明をしている [24]。

4.3.2 漸近展開～ランジュバン方程式の導出～

次に、レイリーピストンがある極限では上記のような近似計算が正当化され、ランジュバン方程式に帰着していくことを示す。ここで考える極限としては、ピストンの質量 M が分子の質量 m に比べてずっと大きい場合である：

$$M \gg m \implies \varepsilon \equiv \frac{2m}{m+M} \rightarrow 0. \quad (4.30)$$

この時、熱揺らぎによる速度のジャンプ幅がどんどん小さくなるのが期待できる。まずマスター方程式をクラマース・モヤル展開する：

$$\frac{\partial P(V,t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial V^n} [\alpha_n(V)P(V,t)], \quad \alpha_n(V) = \int_{-\infty}^{\infty} dy y^n \lambda(y|V). \quad (4.31)$$

今、クラマース・モヤル係数 $\alpha_n(V)$ について計算を進める：

$$\alpha_n(V) = \frac{\rho S}{\varepsilon^2} \int_{-\infty}^{\infty} dy y^n |y| \phi\left(V + \frac{y}{\varepsilon}\right) = \varepsilon^n \rho S \int_{-\infty}^{\infty} dY Y^n |Y| \phi(V + Y). \quad (4.32)$$

但し、 $Y = y/\varepsilon$. よって、マスター方程式は ε について次の形に変形できる：

$$\frac{\partial P(V,t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\varepsilon)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial V^n} [A_n(V)P(V,t)], \quad A_n(V) = \rho S \int_{-\infty}^{\infty} dY Y^n |Y| \phi(V + Y). \quad (4.33)$$

ここで、クラマース・モヤル係数を V についてテイラー展開する：

$$A_1(V) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{V^k}{k!} A_1^{(k)}(0), \quad A_l(V) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{V^k}{k!} A_l^{(k)}(0). \quad (l \geq 2) \quad (4.34)$$

但し、 $A_1(0) = 0$ を使った。更に次の変数変換を行う：

$$\tau \equiv \varepsilon t, \quad Z \equiv \frac{V}{\sqrt{\varepsilon}}. \quad (4.35)$$

この変数変換の意味は次のようなものである： $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限を取ると、ピストンの質量が大きくなり、ジャンプ幅がどんどん小さくなるはずである (図 ??(a)). そこで、ジャンプ幅が小さくなるに合わせて、観測する速度の尺度を拡大していく ($Z \equiv V/\sqrt{\varepsilon}$). 更に、 $\varepsilon \rightarrow 0$ ではジャンプ幅が小さくなるせいで、緩和にかかる時間がどんどん伸びていくはずである (図 ??(b)). そこで、時間スケールについては縮小する ($\tau \equiv \varepsilon t$). 以上を行うのが結果、確率分布 $p(Z, \tau) \equiv \sqrt{\varepsilon} P(\sqrt{\varepsilon} Z, t/\varepsilon)$ について

$$\frac{\partial p(Z, \tau)}{\partial \tau} = \left[\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\varepsilon^{(k-1)/2}}{k!} A_1^{(k)}(0) \frac{\partial}{\partial Z} Z^k + \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \varepsilon^{(n+k)/2-1}}{k! n!} A_n^{(k)}(0) \frac{\partial^n}{\partial Z^n} Z^k \right] p(Z, \tau) \quad (4.36)$$

ここで、

$$A_1^{(1)}(0) = -4\rho S \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi m}} \equiv -\frac{\gamma}{2m} < 0, \quad A_2^{(0)}(0) = \frac{\gamma k_B T}{2m^2} > 0, \quad \gamma \equiv 8m\rho S \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi m}} > 0 \quad (4.37)$$

に着目して $\varepsilon \rightarrow 0$ を取ると

$$\frac{\partial p(Z, \tau)}{\partial \tau} = \left[\frac{\gamma}{2m} \frac{\partial}{\partial Z} Z + \frac{\gamma k_B T}{4m^2} \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right] p(Z, \tau) \quad (4.38)$$

となる。この式は ε について主要項を取ると、次の式と等価である：

$$\frac{\partial P(V, t)}{\partial t} = \left[\frac{\gamma}{M} \frac{\partial}{\partial V} V + \frac{\gamma k_B T}{M^2} \frac{\partial^2}{\partial V^2} \right] P(V, t). \quad (4.39)$$

この式はランジュバン方程式を意味する：

$$\frac{d\hat{V}}{dt} = -\frac{\gamma}{M} \hat{V} + \frac{\sqrt{2\gamma k_B T}}{M} \xi^G. \quad (4.40)$$

4.4 一般論：ファン・カンペンのシステムサイズ展開

上記の計算方法は更に一般化出来、ファン・カンペンのシステムサイズ展開と呼ばれている。システムサイズ展開はマスター方程式の解法として最もスタンダードな手法であり、物理だけではなく化学・生態学などでも多用される。システムサイズ展開の主要なアイデアとは次のようなものである：今、 \hat{v} 依存性を持つマルコフジャンプノイズ $\hat{\xi}_{\lambda(y|\hat{v})}^{\text{CP}}$ を用意して、次の形の確率微分方程式を考える：

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = \varepsilon \hat{\xi}_{\lambda(y|\hat{v})}^{\text{CP}}. \quad (4.41)$$

但し、 ε は微小パラメータである。つまり、マルコフジャンプノイズに駆動されていて且つ、ノイズが小さい極限を取る。この時ノイズが一定の安定性を持っていれば、ランジュバン方程式が一般的に導出されることが示せる。事実、式 (4.41) でのジャンプ幅 $\hat{Y} = \hat{v}(t+dt) - \hat{v}(t)$ と、ポアソンノイズの高さ \hat{y} の関係を調べると

$$\hat{Y} = \varepsilon \hat{y} \quad (4.42)$$

となるが、式 (4.41) を

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = \hat{\xi}_{\lambda'_\varepsilon(Y|\hat{v})}^{\text{CP}}, \quad \hat{\xi}_{\lambda'_\varepsilon(Y|\hat{v})}^{\text{CP}} \equiv \varepsilon \hat{\xi}_{\lambda(y|\hat{v})}^{\text{CP}} \quad (4.43)$$

と書き直すと、ヤコビアン関係から

$$\lambda'_\varepsilon(Y|V) dY = \lambda(y|V) dy \iff \lambda'_\varepsilon(Y|V) = \frac{1}{\varepsilon} \lambda\left(\frac{Y}{\varepsilon} \middle| V\right) \quad (4.44)$$

の関係が成り立つ。この関係式を仮定してマスター方程式を立てると

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(V, t)}{\partial t} &= \int_{-\infty}^{\infty} dY [\lambda'_\varepsilon(Y|V - Y) P(V - Y, t) - \lambda'_\varepsilon(Y|V) P(V, t)] \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\varepsilon)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial V^n} [A_n(V) P(V, t)], \quad \left(A_n(V) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dY Y^n \lambda(Y|V) \right) \end{aligned} \quad (4.45)$$

となり、式 (4.33) と同じスケールリングになる。最後に、変数変換 (4.35) を導入し、安定化条件

$$A_1^{(0)}(0) = 0, \quad A_1^{(1)}(0) < 0, \quad A_n^{(0)}(0) > 0 \quad (\text{for } n \neq 2) \quad (4.46)$$

を仮定すると、レイリーピストンの具体例と同様の計算によって、 $\varepsilon \rightarrow 0$ 極限でランジュバン方程式が導出される。つまりノイズの安定性 (4.46) があるとき、ノイズが小さい極限ではランジュバン方程式が常に現れることがわかる。以上の一般化に興味があれば、ファン・カンペンの教科書 [6] を読むことを薦める。

4.5 練習問題

4.5.1 ボルツマン分布の導出

ここでは、ボルツマン分布の導出をもう少し丁寧に行う。

(1) 分布の満たす方程式の導出

分布関数 $f(v_x, v_y, v_z)$ を考え、次の2つの仮定を置く：

- 分布関数 $f(v_x, v_y, v_z)$ は特別な方向に依らない。つまり、 $v \equiv |v|$ だけで記述できる：

$$f(v_x, v_y, v_z) = F(v^2) \quad (4.47)$$

- 各成分が独立だと仮定する：

$$f(v_x, v_y, v_z) = \psi(v_x^2)\psi(v_y^2)\psi(v_z^2). \quad (4.48)$$

以上の仮定から、次の微分方程式導出せよ：

$$x \equiv v_x^2, \quad \frac{d\psi(x)}{dx} = -A\psi(x), \quad A \equiv -\frac{1}{\psi(0)} \left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{x=0} \quad (4.49)$$

(2) 正規分布の導出

以上の仮定から、各成分の分布 $\phi(v_x)$ が正規分布に従うことを示せ：

$$\phi(v_x) = \psi(v_x^2) = C \exp[-Av_x^2], \quad (4.50)$$

但し C と規格化定数。

4.5.2 エネルギー等分配則

次の関係式（エネルギー等分配則）を証明せよ：

$$\frac{m}{2} \langle \bar{v}^2 \rangle = \frac{m}{2} \langle v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T. \quad (4.51)$$

これは、温度とはミクロには分子の速度揺らぎの尺度を表すことを意味している。

Chapter 5

演習問題の略解

第1章の解答

問 1.5.1：拡散方程式の解

(1) δ 関数のフーリエ変換

δ 関数の定義式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-y)f(x) = f(y) \quad (5.1)$$

をフーリエ変換に代入する

$$\tilde{P}_0(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x-x_0) e^{-ikx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0}. \quad (5.2)$$

(2) 拡散方程式のフーリエ変換

拡散方程式の両辺をフーリエ変換すると

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} \frac{\partial P(x,t)}{\partial t} &= \frac{D}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} \frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} P(x,t) \right] &= -\frac{D}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx (-ik) e^{-ikx} \frac{\partial P(x,t)}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial t} \tilde{P}(k,t) &= +\frac{D}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx (-ik)^2 e^{-ikx} P(x,t) \\ \frac{\partial}{\partial t} \tilde{P}(k,t) &= -Dk^2 \tilde{P}(k,t). \end{aligned} \quad (5.3)$$

但し、途中で部分積分と

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} P(x,t) = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial P(x,t)}{\partial x} = 0 \quad (5.4)$$

を用いた。

(3) 拡散方程式の解（フーリエ空間）

次の様に変形すると解が出る：

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \tilde{P}(k, t) &= -Dk^2 \tilde{P}(k, t) \\ \frac{\partial}{\partial t} \log \tilde{P}(k, t) &= -Dk^2 \\ \log \tilde{P}(k, t) &= -Dk^2 t + C(k),\end{aligned}\tag{5.5}$$

但し $C(k)$ は k についての任意関数．ここで初期条件から

$$\log \tilde{P}(k, t=0) = \log \tilde{P}_0(k) = -ikx_0 - \frac{1}{2} \log(2\pi) = C(k)\tag{5.6}$$

よって，次の解が得られる：

$$\tilde{P}(k, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0 - Dtk^2}.\tag{5.7}$$

(4) 拡散方程式の解（実空間）

恒等式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{a}{2}x^2 + bx} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{2a}}\tag{5.8}$$

に着目する ($a > 0$ で b は任意の複素数)．逆フーリエ変換より

$$\begin{aligned}P(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{P}(k, t) e^{ikx} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-Dtk^2 + ik(x-x_0)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}}\end{aligned}\tag{5.9}$$

(5) 分散の性質

ここから分散を計算すると

$$\begin{aligned}\langle (\hat{x}(t) - x_0)^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{(x-x_0)^2}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}} \\ &= \frac{2Dt}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy y^2 e^{-\frac{y^2}{2}} \\ &= 2Dt.\end{aligned}\tag{5.10}$$

但し，変数変換 $y = (x-x_0)/\sqrt{2Dt}$ を導入し，

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy y^2 e^{-\frac{y^2}{2}} = 1\tag{5.11}$$

を用いた．

問 1.5.2：確率分布の変数変換

(1) 線形変換

ヤコビアン関係から

$$P(x)dx = Q(y)dy, \quad \frac{dx}{dy} = \frac{1}{\sigma} \quad (5.12)$$

であり,

$$Q(y) = \frac{dx}{dy}P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}e^{-(y-\mu)^2/2\sigma^2}. \quad (5.13)$$

(2) 非線形変換

ヤコビアン関係から

$$P(x)dx = Q(y)dy, \quad \frac{dx}{dy} = \frac{1}{2\sqrt{y}} \quad (5.14)$$

であり,

$$Q(y) = \frac{dx}{dy}P(x) = \frac{1}{2\sqrt{y}}e^{-\sqrt{y}} \quad (5.15)$$

第 2 章の解答

問 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 $\hat{\xi}_{y^*,\lambda}^{\text{SP}}$ に駆動される確率微分方程式

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + \hat{\xi}_{y^*,\lambda}^{\text{SP}} \quad (5.16)$$

を考える. 任意の関数 $f(\hat{v})$ に対して, その時間差分 $df(\hat{v}(t)) \equiv f(\hat{v}(t+dt)) - f(\hat{v}(t))$ は次の 3 種類の値を取りうる:

$$df(\hat{v}) = \begin{cases} f(\hat{v} + y^*) - f(\hat{v}) & (\text{確率: } \lambda dt/2) \\ f(\hat{v} - y^*) - f(\hat{v}) & (\text{確率: } \lambda dt/2) \\ -a(\hat{v}) \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} & (\text{確率: } 1 - \lambda dt) \end{cases}. \quad (5.17)$$

よって, 両辺の期待値を取ると

$$\begin{aligned} \langle df(\hat{v}) \rangle &= \frac{\lambda dt}{2} \langle [f(\hat{v} + y^*) - f(\hat{v})] \rangle + \frac{\lambda dt}{2} \langle [f(\hat{v} - y^*) - f(\hat{v})] \rangle - (1 - \lambda dt) \left\langle a(\hat{v}) \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} dt \right\rangle \\ \left\langle \frac{df(\hat{v})}{dt} \right\rangle &= \frac{\lambda}{2} \langle [f(\hat{v} + y^*) - f(\hat{v})] \rangle + \frac{\lambda}{2} \langle [f(\hat{v} - y^*) - f(\hat{v})] \rangle - \left\langle a(\hat{v}) \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} \right\rangle + o(dt). \end{aligned} \quad (5.18)$$

dt の一次項だけ取ると,

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \frac{\partial P(v,t)}{\partial t} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dv P(v,t) \left[\frac{\lambda}{2} [f(v+y^*) - f(v)] + \frac{\lambda}{2} [f(v-y^*) - f(v)] - a(v) \frac{df(v)}{dv} \right] + o(dt) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v,t) \left[\frac{\lambda}{2} [P(v-y^*,t) - P(v,t)] + \frac{\lambda}{2} [P(v+y^*,t) - P(v,t)] + \frac{\partial}{\partial v} a(v) P(v,t) \right] + o(dt). \end{aligned} \quad (5.19)$$

任意の $f(v)$ に対して上記の恒等式が成り立つので, マスター方程式 (2.26) を得る.

問 2.9.1 複合ポアソンノイズのマスター方程式

対称ポアソンノイズ $\hat{\xi}_{y^*, \lambda}^{\text{CP}}$ に駆動される確率微分方程式

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + \hat{\xi}_{y^*, \lambda}^{\text{CP}} \quad (5.20)$$

を考える．任意の関数 $f(\hat{v})$ に対して，その時間差分 $df(\hat{v}(t)) \equiv f(\hat{v}(t+dt)) - f(\hat{v}(t))$ は次の値を取りうる：

$$df(\hat{v}) = \begin{cases} f(\hat{v} + y_k^*) - f(\hat{v}) & (\text{確率: } \lambda_k dt, k = 1, 2, \dots, N) \\ -a(\hat{v}) \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} & (\text{確率: } 1 - \lambda dt) \end{cases} \quad (5.21)$$

但し， $\lambda \equiv \sum_{k=1}^N \lambda_k$ ．よって，両辺の期待値を取ると

$$\begin{aligned} \langle df(\hat{v}) \rangle &= \sum_{k=1}^N \lambda_k dt \langle [f(\hat{v} + y_k^*) - f(\hat{v})] \rangle - (1 - \lambda dt) \left\langle a(\hat{v}) \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} dt \right\rangle \\ \left\langle \frac{df(\hat{v})}{dt} \right\rangle &= \sum_{k=1}^N \lambda_k \langle [f(\hat{v} + y_k^*) - f(\hat{v})] \rangle - \left\langle a(\hat{v}) \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} \right\rangle + o(dt). \end{aligned} \quad (5.22)$$

dt の一次項だけ取ると，

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \frac{\partial P(v, t)}{\partial t} &= \int_{-\infty}^{\infty} dv P(v, t) \left[\sum_{k=1}^N \lambda_k [f(v + y_k^*) - f(v)] - a(v) \frac{df(v)}{dv} \right] + o(dt) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v, t) \left[\sum_{k=1}^N \lambda_k [P(v - y_k^*, t) - P(v, t)] + \frac{\partial}{\partial v} a(v) P(v, t) \right] + o(dt). \end{aligned} \quad (5.23)$$

任意の $f(v)$ に対して上記の恒等式が成り立つので，マスター方程式 (2.30) を得る．

問 2.9.3：拡散過程の時間発展

確率微分方程式とマスター方程式の対応関係

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + b(\hat{v}) \cdot \hat{\xi}^{\text{G}} + \hat{\xi}_{\lambda(y|\hat{v})}^{\text{CP}} \quad (5.24)$$

$$\iff \frac{\partial P(v, t)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial v} a(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b^2(v) \right] P(v, t) + \int_{-\infty}^{\infty} dy [\lambda(y|v-y) P(v-y, t) - \lambda(y|v) P(v, t)] \quad (5.25)$$

に着目すればよい．問の設定では

$$a(v) = 0, \quad b(v) = \sigma, \quad \lambda(y|v) = 0 \quad (5.26)$$

なので，対応するマスター方程式は

$$\frac{\partial P(v, t)}{\partial t} = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 P(v, t)}{\partial v^2} \quad (5.27)$$

となる．拡散方程式 (1.5) と比較すると次の関係式を得る：

$$D = \frac{\sigma^2}{2}. \quad (5.28)$$

問 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

(1) マスター方程式（フォッカー・プランク方程式）

この間の状況は、式 (5.24) に

$$a(v) = \gamma v, \quad b(v) = \sigma, \quad \lambda(y|v) = 0 \quad (5.29)$$

を設定した状況なので、対応するマスター方程式は次になる：

$$\frac{\partial P(v, t)}{\partial t} = \left[\gamma \frac{\partial}{\partial v} v + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] P(v, t). \quad (5.30)$$

(2) 定常解

定常解を求める。定常状態では分布が時間変化しないことに着目する：

$$P_{\text{SS}}(v) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} P(v, t) \implies \frac{\partial P_{\text{SS}}(v)}{\partial t} = 0. \quad (5.31)$$

よって、定常分布 $P_{\text{SS}}(v)$ は次の常微分方程式を充たす：

$$\left[\gamma \frac{d}{dv} v + \frac{\sigma^2}{2} \frac{d^2}{dv^2} \right] P_{\text{SS}}(v) = 0. \quad (5.32)$$

両辺積分すると、積分定数 C を導入して、

$$\left[\gamma v + \frac{\sigma^2}{2} \frac{d}{dv} \right] P_{\text{SS}}(v) = C_2 \quad (5.33)$$

となる。ここで、無限遠での境界条件として

$$\lim_{v \rightarrow \infty} P_{\text{SS}}(v) = 0 \quad (5.34)$$

を考えると、 $C_2 = 0$ となる。ここで式を

$$\frac{d}{dv} \log P_{\text{SS}}(v) = -\frac{2\gamma}{\sigma^2} v \quad (5.35)$$

と変形すると、

$$\log P_{\text{SS}}(v) = -\frac{\gamma}{\sigma^2} v^2 + \log C_1 \quad (5.36)$$

であり、最終的に

$$P_{\text{SS}}(v) = C_1 \exp \left[-\frac{\gamma}{\sigma^2} v^2 \right] \quad (5.37)$$

を得る。最後に規格化条件から定数 C_1 が決まる：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dv P_{\text{SS}}(v) = 1 \iff C_1 = \sqrt{\frac{\gamma}{\pi \sigma^2}}. \quad (5.38)$$

第3章の解答

問 3.5.1 伊藤の公式の一般化

(1) 関数 $f(\hat{W})$

ウィーナー過程 \hat{W} についての伊藤ルール

$$d\hat{W}^2 = dt, \quad d\hat{W}dt = 0, \quad d\hat{W}^n = 0, \quad (n \geq 3) \quad (5.39)$$

を活用する。テイラー展開を活用すると、証明が出来る：

$$df(\hat{W}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d\hat{W}^n}{n!} \frac{d^n f(\hat{W})}{d\hat{W}^n} = \frac{df(\hat{W})}{d\hat{W}} d\hat{W} + \frac{1}{2} \frac{d^2 f(\hat{W})}{d\hat{W}^2} d\hat{W}^2 = \frac{df(\hat{W})}{d\hat{W}} d\hat{W} + \frac{1}{2} \frac{d^2 f(\hat{W})}{d\hat{W}^2} dt. \quad (5.40)$$

(2) 関数 $f(\hat{W}, t)$

多変数関数へのテイラー展開を活用すると、証明が出来る：

$$df(\hat{W}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(d\hat{W} \frac{\partial}{\partial \hat{W}} + dt \frac{\partial}{\partial t} \right)^n f(\hat{W}, t) = \frac{\partial f(\hat{W}, t)}{\partial \hat{W}} d\hat{W} + \frac{\partial f(\hat{W}, t)}{\partial t} dt + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(\hat{W}, t)}{\partial \hat{W}^2} dt. \quad (5.41)$$

問 3.5.2 ブラック・ショールズ方程式

伊藤の公式を使うと、任意の $f(\hat{W}, t)$ に対して

$$df(\hat{W}, t) = \frac{\partial f(\hat{W})}{\partial \hat{W}} d\hat{W} + \frac{\partial f(\hat{W}, t)}{\partial t} dt + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial \hat{W}^2} dt \quad (5.42)$$

が成り立つ。ここで $f(\hat{W}, t) = S_0 \exp \left[\left(\mu - \frac{\sigma^2}{2} \right) t + \sigma \hat{W} \right]$ を代入すると、

$$\begin{aligned} df(\hat{W}, t) &= f(\hat{W}, t) \sigma d\hat{W} + \left(\mu - \frac{\sigma^2}{2} \right) f(\hat{W}, t) dt + \frac{\sigma^2}{2} f(\hat{W}, t) dt \\ &= f(\hat{W}, t) \left[\sigma d\hat{W} + \mu dt \right] \end{aligned} \quad (5.43)$$

よって、 $\hat{S}(t) = f(\hat{W}, t)$ がブラック・ショールズ方程式の1つの解になっている。解の一意性から、 $S(t) = f(\hat{W}, t)$ が一意解になる。

第4章の解答

問 4.5.1 ボルツマン分布の導出

(1) 分布の満たす方程式の導出

仮定をまとめると、

$$f(v_x, v_y, v_z) = F(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = \psi(v_x^2) \psi(v_y^2) \psi(v_z^2) \quad (5.44)$$

である。ここで $v_y = v_z = 0$ を代入すると、

$$F(v_x^2) = \psi(v_x^2) a^2, \quad a \equiv \psi(0) \neq 0. \quad (5.45)$$

ここで

$$x = v_x^2, \quad y = v_y^2, \quad z = v_z^2 \quad (5.46)$$

と置いて $z = 0$ を代入すると,

$$a\psi(x+y) = \psi(x)\psi(y). \quad (5.47)$$

ここで y が微小だと思って 1 次の項まで展開すると,

$$a \left[\psi(x) + y \frac{d\psi(x)}{dx} \right] = \psi(x) \left[a + y \frac{d\psi(0)}{dx} \right] + O(y^2). \quad (5.48)$$

結果,

$$a \frac{d\psi(x)}{dx} = \psi(x) \frac{d\psi(0)}{dx} \iff \frac{d}{dx} \phi(x) = \frac{1}{\psi(0)} \frac{d\psi(0)}{dx} \psi(x) = -A\psi(x). \quad (5.49)$$

を得る.

(2) 正規分布の導出

上記の常微分方程式の解は

$$\psi(x) = Ce^{-Ax}. \quad (5.50)$$

であり, 速度分布は正規分布型であることがわかる:

$$\phi(v_x) = \psi(v_x^2) = Ce^{-Av_x^2}. \quad (5.51)$$

問 4.5.2 エネルギー等分配則

ボツルマン分布を仮定すると

$$m\langle v_x^2 \rangle = m \int_{-\infty}^{\infty} dv_x v_x^2 \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} e^{-mv^2/2k_B T} = \frac{1}{2} k_B T \quad (5.52)$$

よって,

$$m\langle \vec{v}^2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T. \quad (5.53)$$

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, Springer-Nature, 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).