

統計物理学における確率過程の基礎とその応用

金澤輝代士

Contents

I 確率過程の基礎数理	8
1 拡散現象概論	9
1.1 粒子の拡散現象：拡散方程式	9
1.2 拡散現象とブラウン運動	10
1.2.1 分子の揺らぎ	10
1.2.2 金融市場での拡散現象	12
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	13
1.4 数学の準備～このノートで使うテクニック～	13
1.4.1 テイラー展開	13
1.4.2 部分積分	13
1.4.3 δ 関数	14
1.4.4 確率変数・期待値の記号	15
1.4.5 確率分布の変換則（ヤコビアン関係式）	15
1.4.6 積分恒等式	15
1.5 練習問題	16
1.5.1 拡散方程式の解	16
1.5.2 確率分布の変数変換	17
2 マルコフ過程の数理：発見論的な入門	18
2.1 マスター方程式	18
2.2 決定論的常微分方程式（ジャンプなし）	19
2.3 決定論的常微分方程式（ジャンプあり）	20
2.4 ポアソンノイズ	22
2.4.1 ポアソンノイズの定義	22
2.4.2 イベント間の時間間隔は指数分布に従う	24
2.4.3 イベント時刻の数値計算方法	24
2.4.4 ポアソンノイズに駆動される確率過程	25
2.4.5 ポアソン過程	26
2.4.6 ポアソン過程の微小変化量について	27
2.5 対称ポアソンノイズ	27
2.5.1 対称ポアソンノイズに駆動される確率過程	29
2.5.2 対称ポアソン過程とその微小変化量の統計則	29
2.5.3 数値計算上の工夫：撃力発生の有無だけを先に決定する	29
2.6 複合ポアソンノイズ	30
2.6.1 離散個の組み合わせ	30
2.6.2 複合ポアソンノイズ（離散）に駆動される確率過程	30
2.6.3 連続個の組み合わせ	32

2.6.4	複合ポアソンノイズ（連続）に駆動される確率過程	33
2.7	ガウスノイズ	34
2.7.1	ガウスノイズに駆動される確率過程	35
2.7.2	ウィーナー過程	35
2.7.3	数値計算での工夫：正規乱数を用いたシミュレーション	36
2.7.4	補足：形式的なウィーナー過程の定義	37
2.8	ホワイトノイズ	37
2.8.1	離散時間でのホワイトノイズ	37
2.8.2	連続時間でのホワイトノイズ	38
2.8.3	ホワイトノイズの標準形：伊藤・レヴィ分解	38
2.8.4	レヴィ過程	39
2.9	一般のマスター方程式	39
2.9.1	一般のマスター方程式の導出： $b(v) = 0$ の特殊例	40
2.9.2	数値計算上の工夫：条件付き総強度とジャンプ幅分布の分離	40
2.10	クラマース・モヤル展開	45
2.11	マスター方程式と確率微分方程式の一対一対応（マルコフジャンプ過程）	45
2.12	次に学ぶべき項目は何か？	46
2.13	練習問題	48
2.13.1	ポアソン過程の解析解	48
2.13.2	対称ポアソンノイズのマスター方程式	48
2.13.3	複合ポアソンノイズのマスター方程式	48
2.13.4	拡散過程の時間発展	48
2.13.5	オルンシュタイン・ウーレンベック過程の定常分布	48
3	確率積分の定義	49
3.1	乗法的ノイズへの入門	49
3.2	伊藤型確率微分方程式	50
3.2.1	伊藤積分の性質	51
3.2.2	伊藤型確率微分方程式の数値計算	51
3.3	ポアソンノイズに対する微分ルール	53
3.4	ガウスノイズに対する微分ルール	54
3.4.1	ガウスノイズの特別な性質（伊藤ルール）	54
3.4.2	伊藤の公式	55
3.4.3	フォッカー・プランク方程式	56
3.5	フォッカー・プランク方程式と確率微分方程式の一対一対応	56
3.6	経路積分表示（オンサガー・マハループ関数）	57
3.7	練習問題	61
3.7.1	伊藤の公式の一般化	61
3.7.2	幾何ブラウン運動	61
II	確率過程の発展的数理 1	62
4	標準形と形式論	63
4.1	1変数マルコフ過程におけるマスター方程式の標準形	63
4.1.1	結合確率分布を用いたマルコフ過程の定義	64
4.1.2	チャップマン・コルモゴロフ方程式	65
4.1.3	パスの連続性	65

4.1.4	導出の仮定	67
4.1.5	導出	68
4.1.6	標準形の枠に入らないマスター方程式は作れないのか？	70
4.2	1変数確率微分方程式の標準形	71
4.2.1	導出	71
4.2.2	標準形の枠に入らない確率微分方程式は作れないのか？	72
4.3	ホワイトノイズのレヴィ・伊藤分解	74
4.3.1	レヴィ過程の特性関数	75
4.3.2	無限分解可能性	75
4.3.3	総強度 λ_{tot} が無限大になるレヴィ過程	75
4.3.4	非対称な主値積分について	76
4.3.5	レヴィ・ヒンチン公式	77
4.4	マスター方程式の形式論	77
4.4.1	固有値問題への帰着	77
4.4.2	定常分布	78
4.4.3	相関関数	78
5	状態空間の拡張	79
5.1	導入としての具体例：計数統計	79
5.2	形式論	80
5.3	様々な具体例	81
6	境界条件と条件分岐	83
6.1	様々な境界条件の天下りの紹介	83
6.1.1	確率流の定義	83
6.1.2	反射境界条件	84
6.1.3	自然境界条件	85
6.1.4	周期境界条件	85
6.1.5	吸収境界条件	86
6.2	境界条件の演繹的導出	86
6.2.1	指示関数	86
6.2.2	反射境界条件	87
6.2.3	周期境界条件	90
III	統計物理における確率過程	93
7	確率現象のモデリング：分子運動論の数理	94
7.1	動機	94
7.2	あらすじ	95
7.3	玩具モデルの擬リウビル方程式	95
7.4	多体剛体球系の擬リウビル方程式	97
7.4.1	設定	97
7.4.2	剛体球ポテンシャルと衝突ルール	98
7.4.3	擬リウビル方程式	99
7.5	BBGKY 階層構造とボルツマン方程式	102
7.5.1	BBGKY 階層構造	102
7.5.2	ボルツマン方程式	104

7.5.3	線形ボルツマン方程式	105
7.6	具体例で遊ぶ	107
7.6.1	例1: レイリーピストン	107
7.6.2	例2: ブラウンラチェット	107
7.6.3	例3: 粉体ローター	108
7.7	ランジュバン方程式はどう出てくるか?	110
7.8	進んだ注記	110
8	ランジュバン方程式の統計力学的導出	111
8.1	ランジュバン方程式	111
8.1.1	フォッカー・プランク方程式	112
8.1.2	ランジュバン方程式の良いところ	112
8.2	ランジュバンの漸近的導出	112
8.2.1	システムサイズ展開のアイデア	113
8.2.2	システムサイズ展開	114
8.2.3	具体例: レイリーピストンでのランジュバン	116
8.2.4	システムサイズ展開の摂動補正	117
8.2.5	揺動散逸関係との関わり	118
8.3	非線形ランジュバン方程式 (乗法的ノイズ) の導出	119
8.3.1	乗法的ノイズ (摩擦がないとき)	119
8.3.2	より一般の場合	120
8.3.3	解析的性質	120
8.4	非ガウスランジュバン方程式の導出	120
A	省略した計算・証明など	124
A.1	3次以上の次数での伊藤ルール (3.24) の証明	124
A.2	パウラの定理の証明	124
A.3	積分型のコーシー・シュワルツの不等式 (A.3) の証明	125

記号の定義・本書の約束事 1：一般

本ノートでは以下のような規則に従って記号を導入する：

1. 実数を $\mathbf{R} := (-\infty, \infty)$ と書く.
2. 正の実数を $\mathbf{R}^+ := (0, \infty)$ と書く.
3. 自然数を $\mathbf{N} := \{i \mid i = 0, 1, \dots\}$ と書く.
4. $a, b \in \mathbf{R}$ が $a < b$ を満たすとき、指示関数 $\mathbf{1}$ を

$$\mathbf{1}_{(a,b)}(y) = -\mathbf{1}_{(b,a)}(y) = \begin{cases} 1 & (y \in (a, b)) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (1)$$

として定義する. より一般の区間 A に対して $\mathbf{1}_A(y)$ に対しても同様に,

$$\mathbf{1}_A(y) = \begin{cases} 1 & (y \in A) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (2)$$

とする. 但し, A に『向き』の概念がある場合, 上の関係式は A が正の向きだと仮定した.

5. 『滑らかな関数』という概念がこのノートではたびたび現れる. 滑らかな関数というのは曖昧な概念であるが, 十分解析的な性質が良い関数を意味するとする. 典型的には C^∞ 関数として, テイラー展開などのような数式操作が自由にでき, 関連する数列の収束・積分の収束・極限の交換などの問題が最終的に起こらないクラスを指すとする.
6. 本ノートでは極限の順序を断りなく交換することが多い. δ 関数に関わる計算過程では, 極限の交換は本来様々な問題を起こしかねない¹. しかし, 本ノートでは最終的な結果に影響しない範囲で自由に交換する.

¹実際, δ 関数はルベグの優収束定理の条件を明らかに満たさない. 例えば, $\delta_\varepsilon(x) := (1/\varepsilon)\mathbf{1}_{(0,\varepsilon)}(x)$ を考えると, 普通の意味では $\lim_{\varepsilon \downarrow 0} \delta_\varepsilon(x) = 0$ が $x \neq 0$ で成り立つ. よって, $\int_0^\infty dx \lim_{\varepsilon \downarrow 0} \delta_\varepsilon(x) = \int_0^\infty 0 dx = 0$ と計算するのが普通である. 一方, $\lim_{\varepsilon \downarrow 0} \int_0^\infty dx \delta_\varepsilon(x) = 1$ であり, 極限の交換が成り立たない. これはまさにルベグの優収束定理の文脈だと有名な例題だが, この本では $\lim_{\varepsilon \downarrow 0} \delta_\varepsilon(x) = \delta(x)$ と解釈してこの問題に取り組むため, まさにデリケートな問題を扱っている.

記号の定義・本書の約束事 2 : 確率論

本ノートでは以下のような規則に従って記号を導入する：

1. 確率変数にはハット記号を付ける．例えば， \hat{x} は確率変数を表し，ハットがついていない変数 X は単なる実数を表す．確率変数 \hat{x} の期待値は $\langle \hat{x} \rangle$ と記述する．
2. 確率密度関数 (probability density function, PDF) は

$$P(\hat{x} = x) := \langle \delta(\hat{x} - x) \rangle \quad (3)$$

で定義される．この確率分布 $P(x) := P(\hat{x} = x)$ と略記することが多い． $\hat{x} \in [x, x + dx)$ を充たす確率は $P(x)dx$ で与えられる．

3. 確率変数 \hat{x} が確率分布 $P(x)$ に従うことを次の記号で記述する：

$$\hat{x} \sim P(x). \quad (4)$$

4. 累積分布関数 (cumulative distribution function, CDF) は次のように定義される：

$$P_{\leq}(x) := P(\hat{x} \leq x) = \int_{-\infty}^x P(y)dy. \quad (5)$$

5. 相補累積分布関数 (complementary cumulative distribution function, CCDF) は次のように定義される：

$$P_{>}(x) := P(\hat{x} > x) = \int_x^{\infty} P(y)dy. \quad (6)$$

6. 累積分布関数や相補累積分布関数は，確率密度関数と次の関係にある：

$$P(x) = \frac{d}{dx}P_{\leq}(x) = -\frac{d}{dx}P_{>}(x) \quad (7)$$

プログラミングコードについて

本ノートでは以下のような規則に従って記号を導入する：

1. 本書では Python コードを添付している。各自で実行されたし。
2. numpy と matplotlib に関する初期設定として、以下のコードは省略している：

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 plt.rcParams["font.size"] = 18
```

3. Jupyter notebook を利用する場合は次のコードを加えた方が良いかもしれない。

```
1 %matplotlib inline
```


Part I

確率過程の基礎数理

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 $P_t(x)$ と書く。粒子数を N と書くと、今は

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

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 $J_t(x)$ と書こう¹。この時の粒子数の保存則は

$$\frac{d}{dt} \int_x^{x+\Delta x} dy P_t(y) = -J_t(x+\Delta x) + J_t(x) \quad (1.2)$$

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

$$\frac{\partial P_t(x)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} J_t(x) \quad (1.3)$$

が得られる。この式を連続の式という。

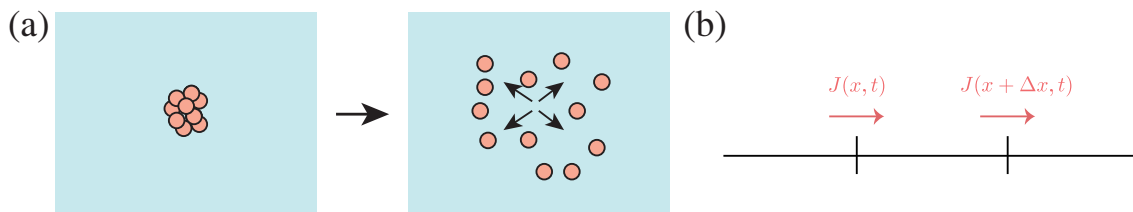


図 1.1: (a) 多数の粒子が拡散する。(b) 連続の式のイメージ。

¹ $J > 0$ は、粒子が正の方向に移動することを表す。

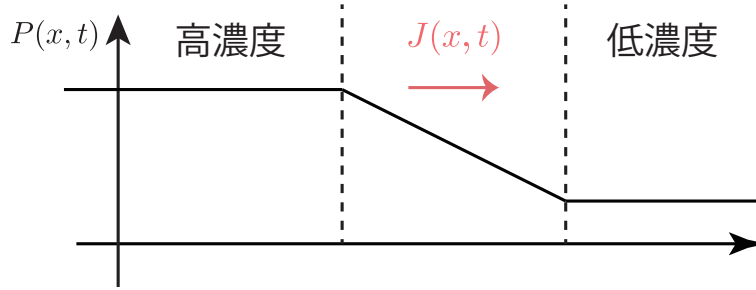


図 1.2: フィックの法則. 経験的に, 拡散は高濃度から低濃度方向に粒子は流れることが知られている. これを踏まえると, $J(x, t) \propto -\partial P(x, t)/\partial x$ となることを見込まれ, また実験的にもこの式が正しいことが知られている.

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):

$$J_t(x) = -D \frac{\partial P_t(x)}{\partial x}, \quad (1.4)$$

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:

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

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:

$$P_0(x) = N\delta(x - x_0). \quad (1.6)$$

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:

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

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²と金融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.

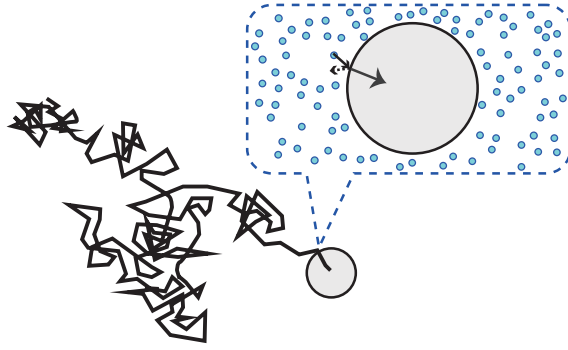


図 1.3: ブラウン粒子（1粒子）が拡散する。

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。

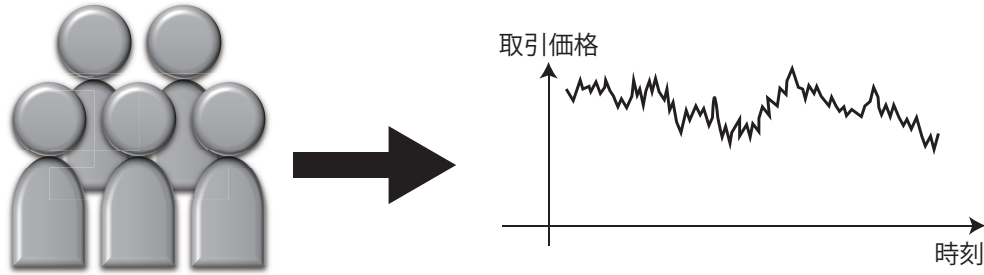


図 1.4: 株価市場・外国為替市場における価格の動き.

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 $P_t(x)$ として、

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

が成り立つ。

1.2.2 金融市場での拡散現象

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、金融商品の価格の動きである (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：

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

これが幾何ブラウン運動と言われるモデルであり、ブラック・ショールズ理論 [4] での基礎方程式として利用されている。ただし、 $a(t)$ はトレンドを表すためのドリフト項である⁸。金融工学では幾何ブラウン運動を出発点に、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・そのマイ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 テイラー展開

ここでテイラー展開の復習を行う。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¹¹。

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。

¹¹ メモ: 金澤が 2023 年に京都大学で授業した時 (講義名「統計力学特論」) は, 1 回目ここまでに進んだ。

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¹²。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¹³

(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。

¹²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。

¹³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：

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

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：

$$P_0(x) = \delta(x - x_0). \quad (1.37)$$

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¹⁴：

$$\tilde{P}_0(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx P_0(x) e^{-ikx} \quad (1.38)$$

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

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

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：

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

(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：

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

¹⁴ 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.

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

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¹⁵:

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

(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¹⁶:

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

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: $a > 0$ 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):

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

¹⁶ 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：発見論的な入門

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（またはチャップマン-コルモゴロフ方程式）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。特に本章は発見論的にマルコフ過程を理解していく事を目指す。具体的には、ポアソンノイズがマルコフ過程における基本的なパーツだという立場から、種々のノイズを順に構成していく。最終的には、発見的に構成された確率過程が、1変数マルコフ過程を完全にカバーしていることを説明して行く。

また Python に基づく数値計算を記載するので、定義された確率過程がどのように実装されるのか、コードを読むことで具体的なイメージを持つことができると考えている。読者が Python のコードを書くことが出来る場合は、実際にコードを書いて色々弄って見て欲しい¹。

ここでの議論は簡単な為に、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、種々の境界条件（周期境界条件や、閉じ込め境界条件）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。また本ノートは、著者が Springer から出版した博士論文 [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。

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：

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(v) = \mathcal{L} P_t(v). \quad (2.1)$$

但し、 $P(\hat{v}(t) = v) := P_t(v)$ は確率分布関数であり、 \mathcal{L} は線形演算子である。式 (2.1) はマスター方程式、またはチャップマン-コルモゴロフ方程式と呼ぶ。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 \mathcal{L} になっている：

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

¹ここでのコードは基本的に最も素朴なオイラー法に基づく数値計算である。収束速度は非常に遅いため、実用上強く薦められるわけではない。しかし、学習上は最も素朴な手法が理解しやすいと考えているため、オイラー法での数値計算コードを記載した。

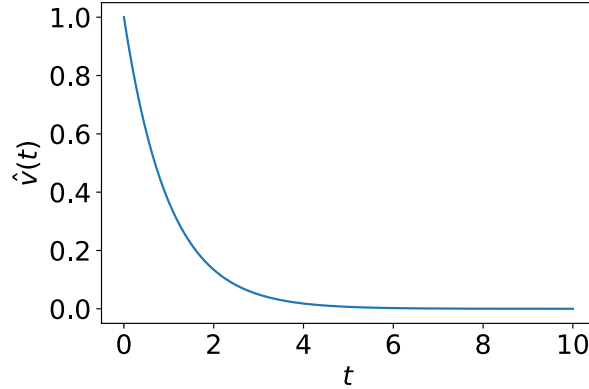


図 2.1: ジャンプがない常微分方程式の典型的なパス.

```

1 def path_gen():
2     ts = np.linspace(0,10.0,1000)
3     vs, v, dt = [], 1.0, ts[1]-ts[0]
4     for t in ts:
5         vs.append(v)
6         v += -v*dt
7     return vs, ts
8 vs, ts = path_gen()
9 plt.plot(ts, vs)

```

コード 2.1: ジャンプがない常微分方程式 (2.3) の数値計算コード. 最も素朴なオイラー法による数値計算. 計算精度は $O(dt)$ 程度.

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 $P(\hat{v}(0) = v_0) = P_0(v_0)$ とする. 典型的なパス (path) の挙動を図 2.1 に示す. 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. この微分方程式を数値計算するにはコード 2.1 のようなプログラムを書けばよい².

確率分布の時間発展は局所的なリウビル方程式 (Liouville equation) によって与えられる:

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

これは決定論的常微分方程式のマスター方程式である.

導出. 局所的なリウビル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.

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

²常微分方程式の数値計算では, 普通は最低でも 4 次ルンゲクッタ法のように, 収束が少しでも早くする工夫を行うのが普通である. ここではルンゲクッタ法については省略する.

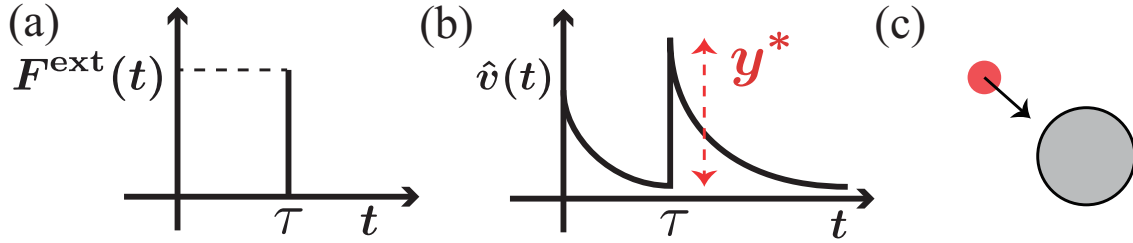


図 2.2: (a) 決定的な撃力 $F^{\text{ext}}(t) = y^* \delta(t - \tau)$. (b) その撃力に駆動される系の動力学 (2.8). (c) 具体的な例：時刻 τ に粒子が衝突する現象. この図は文献 [9] から引用している.

```

1 def path_gen():
2     ts = np.linspace(0,10.0,1000)
3     vs, v, dt, tau, y = [], 1.0, ts[1]-ts[0], 5.0, 1.0
4     for t in ts:
5         vs.append(v)
6         F = y if tau <= t < tau+dt else 0.0
7         v += -v*dt + F
8     return vs, ts
9 vs, ts = path_gen()
10 plt.plot(ts, vs)

```

コード 2.2: ジャンプがある常微分方程式 (2.8) の数値計算コード

両辺の初期条件に関する期待値を取ると,

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

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

$$\begin{aligned}
 \langle df(\hat{v}) \rangle &:= \langle f(\hat{v}(t + dt)) \rangle - \langle f(\hat{v}(t)) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) P_{t+dt}(v) - \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) P_t(v) \\
 &= dt \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \frac{\partial P_t(v)}{\partial t} \tag{2.7}
 \end{aligned}$$

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:

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

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 2.2）。数値計算をするならコード 2.2 の様になるだろう。

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リュウビル方程式によって与えられる：

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

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。

導出. ジャンプを伴うリュウビル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：

$$df(\hat{v}(t)) \equiv f(\hat{v}(t + dt)) - f(\hat{v}(t)) = \begin{cases} -a(\hat{v}(t)) \frac{df(\hat{v}(t))}{d\hat{v}} dt + O(dt^2) & (\tau \notin [t, t + dt)) \\ f(\hat{v}(t) + y^*) - f(\hat{v}(t)) + O(dt) & (\tau \in [t, t + dt)) \end{cases}. \quad (2.10)$$

但し、場合分けにおいては最も支配的なオーダーの項だけ取り出している。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、

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

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：

$$- \int_{-\infty}^{\infty} dv a(v) \frac{df(v)}{dv} = \int_{-\infty}^{\infty} dv \frac{\partial}{\partial v} a(v) P_t(v). \quad (2.14)$$

また、 $f(v + y^*)$ については、積分ダミー変数を変換し ($v' = v + y^*$)、その後でダミー変数 v' を v に書き直すことで、 $f(v)$ を括りだした：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dv P_t(v) f(v + y^*) \delta(t - \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} dv' P_t(v' - y^*) f(v') \delta(t - \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} dv P_t(v - y^*) f(v) \delta(t - \tau) \quad (2.15)$$

等式 (2.13) は任意の $f(v)$ に対して成立するので、ジャンプを伴うリュウビル方程式 (2.9) を得る。

コラム：【ダミー変数の変数変換】と【部分積分】は本質的に同じ

ところで上の計算では【部分積分】を用いるか、【ダミー変数の変数変換】 $v + y^* \rightarrow v$ によって、 $f(v)$ を積分上で括り出すための式変形を行ったが、これらは本質的に同じであることを付記しておく。何故なら部分積分は、離散和で書くとダミー変数の変数変換として理解できるからだ。実際、

$$\sum_{i=1}^K f_i(g_{i+1} - g_i) = \sum_{i=1}^K f_i g_{i+1} - \sum_{i=1}^K f_i g_i \quad (2.16)$$

である。ここで

$$\sum_{i=1}^K f_i g_{i+1} = \sum_{j=2}^{K+1} f_{j-1} g_j = \sum_{i=1}^K f_{i-1} g_i + f_K g_{K+1} - f_0 g_1 \quad (2.17)$$

である。但し、 $j = i + 1$ とダミー変数を変数変換した後に、 j を i と書き直した。つまり、

$$\sum_{i=1}^K f_i(g_{i+1} - g_i) = f_K g_{K+1} - f_0 g_1 - \sum_{i=1}^K (f_i - f_{i-1}) g_i \quad (2.18)$$

であり、これは“部分積分”を離散和で書いていることに対応する。

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。

2.4.1 ポアソンノイズの定義

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 (Poisson noise) 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強度 (intensity)³ λ と、ジャンプの距離 y^* によって特徴付けられる。

まずは強度について説明する。強度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：

$$\lambda dt + O(dt^2). \quad (2.19)$$

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、ポアソンノイズのパスを特徴付ける (図 2.3)。

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：

$$\hat{\xi}_{y^*, \lambda}^P(t) = \sum_{i=1}^{\infty} y^* \delta(t - \hat{t}_i). \quad (2.20)$$

図 2.4(a) はポアソンノイズのパスを記述したものであり、デルタ関数の特異性が際立ったパスをしている。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。

³もしくは遷移率 (transition rate) や、ジャンプレート (jump rate) と呼ぶこともある。物理だと遷移率・ジャンプレートと呼ぶケースが多い印象があるが、数学では強度と呼ぶケースが多い印象がある。

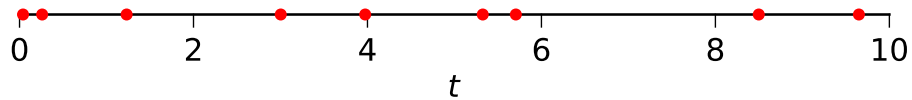


図 2.3: イベント発生時刻（ノイズの発生時刻）を赤丸で記述した。コード 2.3 に基づいて作成。

```

1 def path_gen(seed):
2     np.random.seed(seed)
3     ts = np.linspace(0,10.0,1000)
4     events, dt, lmd = [], ts[1]-ts[0], 1.0
5     for t in ts:
6         if lmd*dt >= np.random.rand():
7             events.append(t)
8     return events
9 events = path_gen(seed=100)
10 y = np.zeros(len(events))
11 plt.scatter(events,y,marker='o',color='red')

```

コード 2.3: ポアソンノイズ (2.20) の発生時刻の数値計算コード。定義に基づく最もシンプルな手法。

```

1 def path_gen(seed):
2     np.random.seed(seed)
3     t, events, lmd = 0.0, [], 1.0
4     while t < 10.0:
5         t += np.random.exponential(1.0/lmd)
6         if t < 10.0:
7             events.append(t)
8     return events
9 events = path_gen(seed=10)
10 y = np.zeros(len(events))
11 plt.scatter(events,y,marker='o',color='red')

```

コード 2.4: 指数分布の理論解 (2.21) を用いたポアソンノイズ (2.20) の数値計算コード。この手法では有限の時間刻み幅 Δt を設定する必要がない。

2.4.2 イベント間の時間間隔は指数分布に従う

イベント間の時間間隔 (inter-event time interval) は $\hat{\tau}_i := \hat{t}_{i+1} - \hat{t}_i$ と定義される。この時間間隔は指数分布に従う：

$$P(\tau) = \lambda e^{-\lambda\tau}. \quad (2.21)$$

つまり、平均時間間隔 $\langle \hat{\tau} \rangle$ は次の式で与えられる：

$$\langle \hat{\tau} \rangle = \int_0^{\infty} \tau P(\tau) d\tau = \frac{1}{\lambda}. \quad (2.22)$$

導出。 離散時間系からの連続極限を考えればよい。時間の刻み幅を Δt とする。時刻 $t = 0$ に初回のイベントが発生したと仮定し、次のイベント発生時刻を $\hat{t} = \hat{K}\Delta t$ とする。ここで、 K ステップ連続でノイズが1度も発生しない確率（つまり、 $\hat{K} > K$ の確率）は

$$P_{>}(K) := P(\hat{K} > K) = (1 - \lambda\Delta t)^K \quad (2.23)$$

で与えられる。 $\tau := K\Delta t$ とした上で、連続極限を取ろう。この時、

$$P_{>}(\tau) := P(\hat{\tau} > K\Delta t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} (1 - \lambda\Delta t)^{\frac{\tau}{\Delta t}} = e^{-\lambda\tau} \quad (2.24)$$

が成り立つ。よって、 $P(\tau) = -(d/d\tau)P_{>}(\tau)$ から式 (2.21) が導出される。

2.4.3 イベント時刻の数値計算方法

ポアソンノイズの撃力発生時刻を数値計算する最もシンプルなプログラムの例をコード 2.3 に示す。毎時間ステップに、 $[0, 1)$ の範囲の一樣乱数を発生させるだけのコードであり、非常に簡単だと思う。注意点として、時間刻み幅 Δt は

$$\lambda\Delta t \ll 1 \quad (2.25)$$

を充たすように十分小さく設定する必要がある。特に、 λ が大きく時間変化する場合は、時間刻み幅を時間変化させる⁴必要がある。

ところで、強度 λ が時間変化しない時のポアソン過程に関しては、イベント間の時間間隔は指数分布 (2.21) に従うことを示した。この結果を利用することで、数値計算を高速化することが出来る。具体的には、ポアソンノイズの撃力が発生する時刻を、指数分布に従って先に決定することが出来る：

$$\hat{t}_{i+1} = \hat{t}_i + \hat{\tau}_i, \quad \hat{\tau}_i \sim P(\tau_i) = \lambda e^{-\lambda\tau_i}. \quad (2.26)$$

但し、 $\hat{x} \sim P(x)$ とは、確率変数 \hat{x} が確率分布 $P(x)$ に従うことを意味する。この方法に基づいてイベント時刻の決定する数値計算プログラムの例を、コード 2.4 として提示する。

この数値計算手法の良いところは、時間刻み幅 Δt が有限であることを仮定せずに計算できることである。マルコフジャンプ過程のように、系の状態変数 $\hat{v}(t)$ と強度 λ が次のジャンプ発生まで一切変化しない場合は、こちらの手法の方が数値計算は早く、計算精度も良い。しかし、系の状態 $\hat{v}(t)$ や強度 λ が時間依存する場合はこの手法が使えない。その場合は愚直に有限の時間刻み幅 Δt を仮定して、毎ステップ、撃力が発生するかどうかを決定する必要がある。

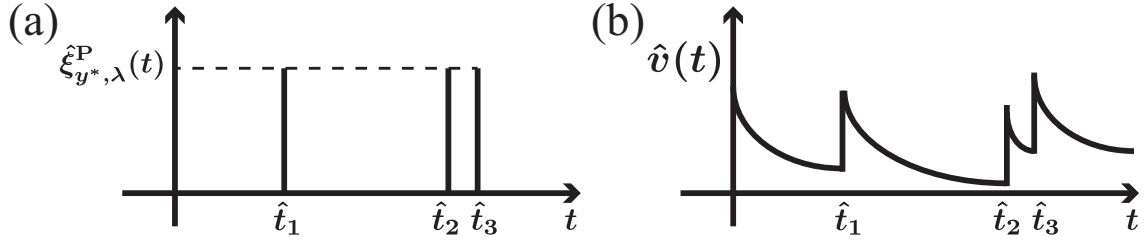


図 2.4: (a) ポアソンノイズの典型的な経路. (b) ポアソンノイズに駆動される系の典型的な経路 (但し, $a(\hat{v}) = \hat{v}$ の場合). この図は文献 [9] の図を改変して作成した.

```

1 def path_gen(seed):
2     ts = np.linspace(0,10.0,1000)
3     v, vs, dt, lmd, y = 0.0, [], ts[1]-ts[0], 0.5, 1.0
4     np.random.seed(seed)
5     for t in ts:
6         vs.append(v)
7         if lmd*dt >= np.random.rand():
8             v += y
9             v += -v*dt
10    return vs, ts
11 vs, ts = path_gen(2)
12 plt.plot(ts, vs)

```

コード 2.5: ポアソンノイズに駆動される確率過程 (2.27) の数値計算コード

2.4.4 ポアソンノイズに駆動される確率過程

次に, ポアソンノイズに駆動される確率過程を考える:

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + \xi_{y^*,\lambda}^P, \quad (2.27)$$

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パスを図 2.4(b) に示す (特に $a(\hat{v}) = \hat{v}$ の場合). 図 2.4(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的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:

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} a(v) P_t(v) + \lambda [P_t(v - y^*) - P_t(v)]. \quad (2.28)$$

但し, 右辺第 1 項 $(\partial/\partial v)a(v)P_t(v)$ は決定論的時間発展を表し, 第 2 項 $\lambda P_t(v - y^*)$ は確率の流入を表し, 第 3 項 $-\lambda P_t(v)$ は確率の流出を表す.

導出. 式 (2.28) 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:

$$df(\hat{v}(t)) = \begin{cases} -a(\hat{v}) \frac{df(\hat{v}(t))}{d\hat{v}} dt + O(dt^2) & (\hat{t}_i \notin [t, t + dt): \text{確率} = 1 - \lambda dt) \\ f(\hat{v}(t) + y^*) - f(\hat{v}(t)) + O(dt) & (\hat{t}_i \in [t, t + dt): \text{確率} = \lambda dt) \end{cases}. \quad (2.29)$$

⁴適応数値積分 (adaptive numerical integration) と呼ぶ.

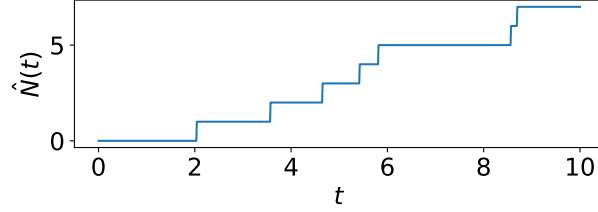


図 2.5: ポアソン過程の典型的なパス.

```

1 def path_gen(seed):
2     ts = np.linspace(0,10.0,1000)
3     vs, v, dt, lmd = [], 0, ts[1]-ts[0], 0.7
4     np.random.seed(seed)
5     for t in ts:
6         vs.append(v)
7         if lmd*dt >= np.random.rand():
8             v += 1
9     return vs, ts
10 vs, ts = path_gen(2)
11 plt.plot(ts, vs)

```

コード 2.6: ポアソン過程 (2.32) の数値計算コード

但し、ジャンプが発生しない時は $O(dt)$ の寄与まで記述し、ジャンプが発生する時は $O(1)$ の寄与まで記述した⁵。以下、類似する計算が現れるが、主要項のみを記述することにする。ここで、両辺の期待値を取ると、

$$\begin{aligned}
 \langle f(\hat{v}(t+dt)) - f(\hat{v}(t)) \rangle &= \left\langle -a(\hat{v}(t)) \frac{df(\hat{v}(t))}{d\hat{v}} dt \right\rangle + \langle [f(\hat{v}(t) + y^*) - f(\hat{v}(t))] \rangle \lambda dt + O(dt^2) \\
 \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) [P_{t+dt}(v) - P_t(v)] &= \int_{-\infty}^{\infty} dv \left\{ -a(v) \frac{df(v)}{dv} dt + \lambda [f(v + y^*) - f(v)] dt \right\} P_t(v) + O(dt^2) \\
 \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \frac{\partial}{\partial t} P_t(v) dt &= \int_{-\infty}^{\infty} dv \left\{ \frac{\partial}{\partial v} a(v) P_t(v) + \lambda [P_t(v - y^*) - P_t(v)] \right\} f(v) dt + O(dt^2).
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

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：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \frac{\partial}{\partial t} P_t(v) = \int_{-\infty}^{\infty} dv \left\{ \frac{\partial}{\partial v} a(v) P_t(v) + \lambda [P_t(v - y^*) - P_t(v)] \right\} f(v) \tag{2.31}$$

この等式は任意の $f(v)$ に対して成立するので、ジャンプを伴うリュウビル方程式 (2.28) を得る⁶。

2.4.5 ポアソン過程

ポアソンノイズに駆動される確率微分方程式 (2.27) において、 $a(\hat{v}) = 0$ 、 $y^* = 1$ のケースを考える。この時の $\hat{v}(t)$ をポアソン過程 (Poisson process)、もしくはポアソン計測過程 (Poisson counting process) と呼んで、 $\hat{N}(t)$ と書く。即ち、

$$\frac{d\hat{N}(t)}{dt} = \hat{\zeta}_{y^*=1, \lambda}^P \tag{2.32}$$

⁵それぞれのイベントの発生確率は $O(1)$ 、 $O(dt)$ であり、期待値を取る時はそれぞれからの寄与がちょうど釣り合う。

⁶メモ：金澤が2023年に京都大学で授業した時（講義名「統計力学特論」）は、2回目にここまで進んだ。

である．典型的なパスを図 2.5 として示す．この図はコード 2.6 に基づいて作成した．

ポアソン過程 $\hat{N}(t)$ はノイズ発生イベント回数を計測している．この $\hat{N}(t)$ を使うと，ポアソンノイズの定義式における和の上限を

$$\hat{\xi}_{y^*,\lambda}^P(t) = \sum_{i=1}^{\hat{N}(t)} y^* \delta(t - \hat{t}_i). \quad (2.33)$$

と書き直しても良い．実際，多くの論文・書籍ではこの記法を用いている．

ポアソン過程において，区間 $[0, t)$ でのイベント発生回数の確率分布 $P(\hat{N}(t) = N)$ はポアソン分布によって与えられる（練習問題で導出）：

$$P(\hat{N}(t) = N) = \frac{(\lambda t)^N}{N!} e^{-\lambda t}, \quad (2.34)$$

但し， N は正の整数である．

2.4.6 ポアソン過程の微小変化量について

次にポアソン過程について，形式的に“微小”変化量の性質を考えよう（実際には変化量は“微小”ではないのだが）．ここでの微小変化量の性質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小変化量の性質扱う．時間区間 $[t, t + dt)$ 中での差分 $d\hat{N}(t) \equiv \hat{N}(t + dt) - \hat{N}(t)$ の取り得る値は次の値になる：

$$d\hat{N} = \begin{cases} 1 & (\hat{t}_i \in [t, t + dt) : \text{確率} = \lambda dt) \\ 0 & (\hat{t}_i \notin [t, t + dt) : \text{確率} = 1 - \lambda dt) \end{cases}. \quad (2.35)$$

この式は次の式とも等価である：

$$(d\hat{N})^n = \begin{cases} 1 & (\hat{t}_i \in [t, t + dt) : \text{確率} = \lambda dt) \\ 0 & (\hat{t}_i \notin [t, t + dt) : \text{確率} = 1 - \lambda dt) \end{cases}. \quad (2.36)$$

よって，モーメントの式は次の式で与えられる：

$$\langle (d\hat{N})^n \rangle = \lambda dt. \quad (2.37)$$

ここで特徴的な性質として，全次数の変化量に関わるモーメントが $O(dt)$ となっていることが挙げられる．これはパスに特異的なジャンプがあるからである．この特異性に起因して，確率過程における変化量は，一般に全次数のモーメントを考慮する必要がある．

2.5 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：

$$\hat{\xi}_{y^*,\lambda}^{SP}(t) \equiv \hat{\xi}_{y^*,\lambda/2}^P(t) + \hat{\xi}_{-y^*,\lambda/2}^P(t). \quad (2.38)$$

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パスを図 2.6(a) に示す．

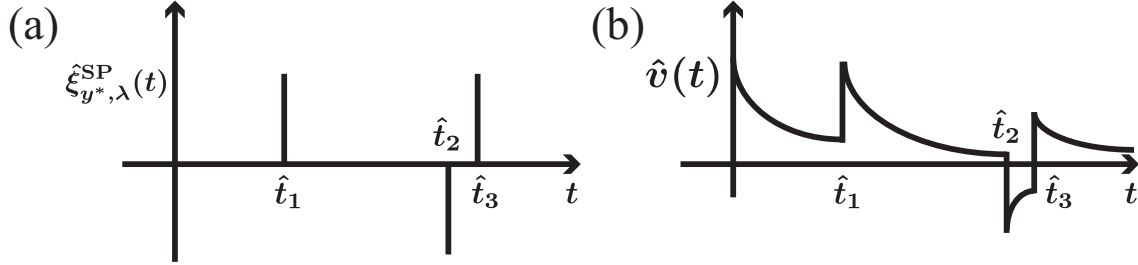


図 2.6: (a) 対称ポアソンノイズの典型的なパス. (b) 対称ポアソンノイズに駆動される系の典型的なパス ($a(\hat{v}) = \hat{v}$ の場合). この図は文献 [9] の図を改変して作成した.

```

1 def path_gen(seed):
2     ts = np.linspace(0,10.0,1000)
3     vs, v, dt, lmd, y = [], 0.0, ts[1]-ts[0], 0.4, 1.0
4     np.random.seed(seed)
5     for t in ts:
6         vs.append(v)
7         if (lmd/2.0)*dt >= np.random.rand(): # +y のポアソンジャンプの判定
8             v += y
9         if (lmd/2.0)*dt >= np.random.rand(): # -y のポアソンジャンプの判定
10            v += -y
11            v += -v*dt
12    return vs, ts
13 vs, ts = path_gen(5)
14 plt.plot(ts, vs)

```

コード 2.7: 対称ポアソンノイズに駆動される確率過程 (2.39) の数値計算コード. まずは定義通りに組んでみた. ジャンプ幅が 2 種類 ($\pm y^*$) のポアソンノイズを独立に 2 回判定している.

```

1 def path_gen(seed):
2     ts = np.linspace(0,10.0,1000)
3     vs, v, dt, lmd, y = [], 0.0, ts[1]-ts[0], 0.4, 1.0
4     np.random.seed(seed)
5     for t in ts:
6         vs.append(v)
7         if lmd*dt >= np.random.rand(): # 先にジャンプイベントの有無を決定
8             if 0.5 > np.random.rand(): # ジャンプサイズの符号を決定
9                 v += y
10            else:
11                v -= y
12            v += -v*dt
13    return vs, ts
14 vs, ts = path_gen(16)
15 plt.plot(ts, vs)

```

コード 2.8: すこし工夫した対称ポアソンノイズに駆動される確率過程 (2.39) の数値計算コード. 先に撃力イベントの有無を決め, その後にジャンプ幅を決めている. この数値計算方法の方が複合ポアソンノイズの構成の際に役立つこともある.

2.5.1 対称ポアソンノイズに駆動される確率過程

次に、対称ポアソンノイズに駆動される系を考える：

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + \hat{\xi}_{y^*,\lambda}^{\text{SP}}(t). \quad (2.39)$$

この系の典型的なパスを図 2.6(a) に示す。定義通りの数値計算例としてコード 2.7 も示す。この式 (2.39) のマスター方程式は次の様に与えられる。

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} a(v) P_t(v) + \frac{\lambda}{2} [P_t(v - y^*) - P_t(v)] + \frac{\lambda}{2} [P_t(v + y^*) - P_t(v)]. \quad (2.40)$$

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. (2.28) の導出と同様の方法で導出される（練習問題で導出）。

2.5.2 対称ポアソン過程とその微小変化量の統計則

対称ポアソン過程 $\hat{N}^{\text{SP}}(t)$ を次の式で定義しよう：

$$\frac{d\hat{N}^{\text{SP}}}{dt} = \hat{\xi}_{y^*,\lambda}^{\text{SP}}(t). \quad (2.41)$$

この対称ポアソン過程に対する微小時間の変化量 $d\hat{N}^{\text{SP}}(t) := \hat{N}^{\text{SP}}(t + dt) - \hat{N}^{\text{SP}}(t)$ のモーメントは、次の様に与えられる点に注意。

$$\langle (d\hat{N}^{\text{SP}})^n \rangle = \begin{cases} 0 & (\text{for odd } n) \\ \lambda y^{*n} dt & (\text{for even } n) \end{cases}. \quad (2.42)$$

2.5.3 数値計算上の工夫：撃力発生の有無だけを先に決定する

次に対称ポアソンノイズの数値計算で少し工夫することについて議論する。対称ポアソンノイズでは、2種類のジャンプ幅 $\pm y^*$ が独立に存在し、それぞれの強度が $\lambda/2$ で与えられている。

ここで、 $\pm y^*$ のどちらか一方で良いから、ジャンプが発生する強度は $\lambda/2 + \lambda/2 = \lambda$ で与えられるだろう。そこで、対称ポアソン過程は

$$\hat{\xi}_{y^*,\lambda}^{\text{SP}}(t) = \sum_{i=1}^{\hat{N}(t)} \hat{y}_i \delta(t - \hat{t}_i), \quad \hat{y}_i \sim \rho(y) = \frac{1}{2} [\delta(y - y^*) + \delta(y + y^*)] \quad (2.43)$$

と書き直すことが出来る。ここで $\{\hat{t}_i\}_i$ は強度 λ で発生するイベント時刻列であり、 $\hat{N}(t)$ は区間 $[0, t)$ で発生する総イベント回数である。また、 \hat{y}_i は i 番目のジャンプ幅であり、 $\pm y^*$ の値を確率 $1/2$ で取る（つまり、 $\rho(y)$ は、ジャンプが発生するという条件付の元での、ジャンプ幅の確率分布）⁷。

この発想で書き直したサンプルプログラムがコード 2.8 である。つまり、 $\pm y^*$ のどちらか一方のジャンプが発生するかどうかを、強度 λ でまず決めて、その後ジャンプ幅 \hat{y}_i を確率 $1/2$ で決めている。この書き直しはより一般の複合ポアソンノイズを構成する時に役立つことがある。

⁷ 厳密に言うと、独立な 2 つのノイズで構成すると $[t, t + dt)$ に 2 回のノイズが発生可能性があり、この書き換えだとそういう同時発生を無視していることになる。しかし、同時発生の確率は $O(dt^2)$ であり、連続極限を取ると無視できる。つまり、連続極限を取る場合は両者のアプローチを区別する必要がない。

2.6 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て構成できた。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。

2.6.1 離散個の組み合わせ

K 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：

$$\hat{\xi}_{\mathbf{y}^*, \boldsymbol{\lambda}}^{\text{CP}}(t) \equiv \sum_{k=1}^K \hat{\xi}_{y_k^*, \lambda_k}^{\text{P}}(t). \quad (2.44)$$

但し、 $\mathbf{y}^* \equiv (y_1^*, \dots, y_K^*)$ であり、 $\boldsymbol{\lambda} \equiv (\lambda_1, \dots, \lambda_K)$ である。

この複合ポアソン過程の構成に関しても、先に「何らかのジャンプが発生するかどうか？」に関する強度を先に計算し、「ジャンプが発生することが決まった条件下で、そのジャンプ幅は何か？」という順序で考えることができる。具体的には

$$\hat{\xi}_{\mathbf{y}^*, \boldsymbol{\lambda}}^{\text{CP}}(t) = \sum_{i=1}^{\hat{N}(t)} \hat{y}_i \delta(t - \hat{t}_i), \quad \hat{y}_i \sim \rho(y) = \frac{1}{\lambda_{\text{tot}}} \sum_{k=1}^K \lambda_k \delta(y - y_k^*), \quad (2.45)$$

と書き直すことが出来る。但し、何らかのジャンプが発生する総強度 λ_{tot} は

$$\lambda_{\text{tot}} := \sum_{k=1}^K \lambda_k \quad (2.46)$$

で定義され、 $\rho(y)$ は（ジャンプが発生することが既に決まった条件下での）ジャンプ幅 \hat{y}_i の確率分布である。

2.6.2 複合ポアソンノイズ（離散）に駆動される確率過程

離散系の複合ポアソンノイズ (2.44) に駆動される系を考える

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + \hat{\xi}_{\mathbf{y}^*, \boldsymbol{\lambda}}^{\text{CP}}. \quad (2.47)$$

但し、 $a(\hat{v})$ は任意の滑らかな関数である。式 (2.47) のマスター方程式は

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} a(v) P_t(v) + \sum_{k=1}^K \lambda_k [P_t(v - y_k^*) - P_t(v)] \quad (2.48)$$

である。この式は、式 (2.28) の導出と同様の方法で導出される。

数値計算を行うためのサンプルコードは 2.9 である。ここではまず、何らかのジャンプが発生するかどうかを強度 λ_{tot} に基づいて判定し、その後にジャンプサイズ \hat{y}_i を乱数に基づいて決定している。

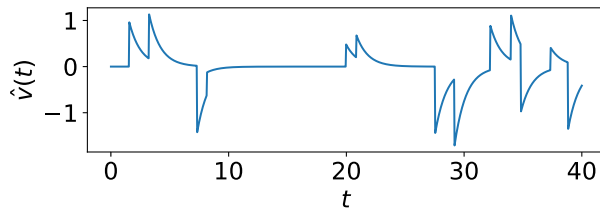


図 2.7: 複合ポアソンノイズに駆動される確率過程 (2.47) の典型的なパス. パラメタとして $\lambda = (0.1, 0.1, 0.2)$, $\mathbf{y}^* = (1.0, 0.5, -1.5)$ を採用している. この数値計算結果はコード 2.9 に基づく.

```

1 def path_gen(seed):
2     ts = np.linspace(0,40.0,1000)
3     vs, v, dt = [], 0.0, ts[1]-ts[0]
4     lmds, ys = np.array([0.1, 0.1, 0.2]), np.array([1.0,0.5,-1.5])
5     lmd_tot = lmds.sum() # 総強度(何らかのジャンプが発生する単位時間確率)
6     probs = lmds/lmd_tot # ジャンプ確率の離散分布
7     np.random.seed(seed)
8     for t in ts:
9         vs.append(v)
10        if lmd_tot*dt >= np.random.rand(): # ジャンプ発生判定
11            y = np.random.choice(a=ys, p=probs) # ジャンプ幅決定
12            v += y
13            v += -v*dt
14    return vs, ts
15 vs, ts = path_gen(10)
16 plt.plot(ts, vs)

```

コード 2.9: 複合ポアソンノイズに駆動される確率過程 (2.47) の数値計算コード.

2.6.3 連続個の組み合わせ

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 に対する強度密度 (intensity density) $\lambda(y)$ を導入する: 時間区間 $[t, t+dt)$ の間に $\hat{y} \in [y, y+dy)$ を充たすジャンプ幅 \hat{y} のポアソンジャンプが発生する確率を

$$\lambda(y)dydt \quad (2.49)$$

と書くことにする。以下簡約化のため、誤解を生まない範囲で強度密度を強度と呼ぶことにする。これを用いて、強度が $\lambda(y)$ の複合ポアソンノイズを次の様に定義する:

$$\hat{\xi}_{\lambda(y)}^{\text{CP}}(t) \equiv \sum_{-\infty \leq y \leq \infty} \hat{\xi}_{y, dy\lambda(y)}^{\text{P}}(t). \quad (2.50)$$

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]:

$$\hat{\xi}_{\lambda(y)}^{\text{CP}}(t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\xi}_{y, dy\lambda(y)}^{\text{P}}(t). \quad (2.51)$$

離散の複合ポアソン過程と同様に、ノイズを少し書き換えてみよう。今、総ジャンプ強度が有限だと仮定する:

$$\lambda_{\text{tot}} := \int_{-\infty}^{\infty} \lambda(y)dy < \infty. \quad (2.52)$$

この時は離散の複合ポアソン過程のように、

$$\hat{\xi}_{\lambda(y)}^{\text{CP}}(t) = \sum_{i=1}^{\hat{N}(t)} \hat{y}_i \delta(t - \hat{t}_i), \quad \hat{y}_i \sim \rho(y) := \frac{1}{\lambda_{\text{tot}}} \lambda(y) \quad (2.53)$$

と再定式化できる。但し、イベント発生時刻列 $\{\hat{t}_i\}_i$ は総強度 λ_{tot} によって決まり、 i 番目のジャンプ幅 \hat{y}_i は確率分布 $\rho(y)$ で決定される。

注: 総ジャンプ強度が無限の時

通常は総強度 λ_{tot} は有限だと想定されるが、総強度が発散する特殊ケースを数理モデルとして定義できる⁸。例えば、ジャンプ幅がベキ分布に従う安定レヴィ過程 (stable Lévy process) などでは、総強度が発散していてもモデルを数学的に定義することが出来る。具体例として、 $y \simeq 0$ 近傍で

$$\lambda(y) \propto |y|^{-\alpha-1}, \quad \alpha \in (1, 2) \quad (2.54)$$

が成立するケースを考えよう (安定レヴィ過程の一例)。この時、総強度は発散する ($\lambda_{\text{tot}} = \infty$) が、モデルは数学的にちゃんと定義できることが知られている。

安定レヴィ過程の様な特殊ケースは、確率過程が数学的に特異性を持つときに現れ、異常拡散過程 (anomalous diffusion process) と呼ばれている。異常拡散過程については本書ではあまり詳細に触れない。異常拡散過程に興味がある読者はKlafterの教科書 [11] などを読むのが良いと思う。Klafterの書籍は非常に初学者向けで読みやすい。

⁸厳密にはこの場合は単純な「複合ポアソン過程」とは呼ばず、通常の複合ポアソン過程と補正複合ポアソン過程 (compensated compound Poisson process) の和と看做するのがより正確である。つまり、総強度が有限の複合ポアソン過程の部分と、総強度が発散する補正複合ポアソン過程に分解する。しかし、ここでは特に区別せず単に「複合ポアソン過程」と呼ぶことにする。数学系の本を読む機会がある読者は注意されたし。

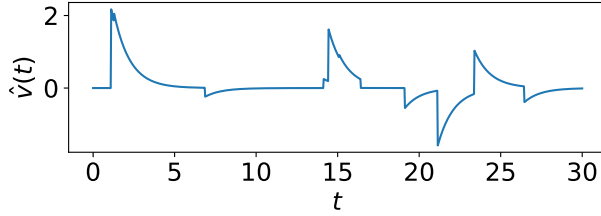


図 2.8: 連続ジャンプ幅を持つ複合ポアソンノイズに駆動される確率過程 (2.55) の典型的なパス. ここではジャンプ幅がガウス分布 (正規分布) に従うケース (式 (2.57)) を扱っている. この数値計算結果はコード 2.10 に基づく.

```

1 def path_gen(seed):
2     ts = np.linspace(0,30.0,1000)
3     vs, v, dt, lmd = [], 0.0, ts[1]-ts[0], 0.2
4     np.random.seed(seed)
5     for t in ts:
6         vs.append(v)
7         if lmd*dt >= np.random.rand(): # 撃力の発生を判定
8             v += np.random.normal() # ジャンプ幅が正規乱数に従う
9             v += -v*dt
10    return vs, ts
11 vs, ts = path_gen(5)
12 plt.plot(ts, vs)

```

コード 2.10: 連続ジャンプ幅を持つ複合ポアソンノイズに駆動される確率過程 (2.55) の数値計算コード. ここではジャンプ幅がガウス分布に従うケースを扱っている.

2.6.4 複合ポアソンノイズ (連続) に駆動される確率過程

では, 複合ポアソンノイズ (連続) に駆動される系を考えよう.

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + \hat{\xi}_{\lambda(y)}^{\text{CP}}(t). \quad (2.55)$$

この系に対応するマスター方程式は

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} a(v) P_t(v) + \int_{-\infty}^{\infty} dy \lambda(y) [P_t(v-y) - P_t(v)] \quad (2.56)$$

で与えられる. マスター方程式 (2.56) 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.

例 2.6.1 例えば, 次のような確率過程を考えることもできる:

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -\hat{v} + \hat{\xi}_{\lambda(y)}^{\text{CP}}, \quad \lambda(y) = \frac{\lambda_{\text{tot}}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-y^2/(2\sigma^2)}, \quad \rho(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-y^2/(2\sigma^2)} \quad (2.57)$$

ここで, 総強度は $\lambda_{\text{tot}} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda(y) dy$ で与えられ, ジャンプ幅の分布は $\rho(y)$ で与えられる. この時, ジャンプ幅はガウス分布 (正規分布) に従うことに注意. つまり, ジャンプ幅がガウス分布に従う複合ポアソンノイズをここでは考えている. 例えば数値計算はコード 2.8 の様に行えば良い.

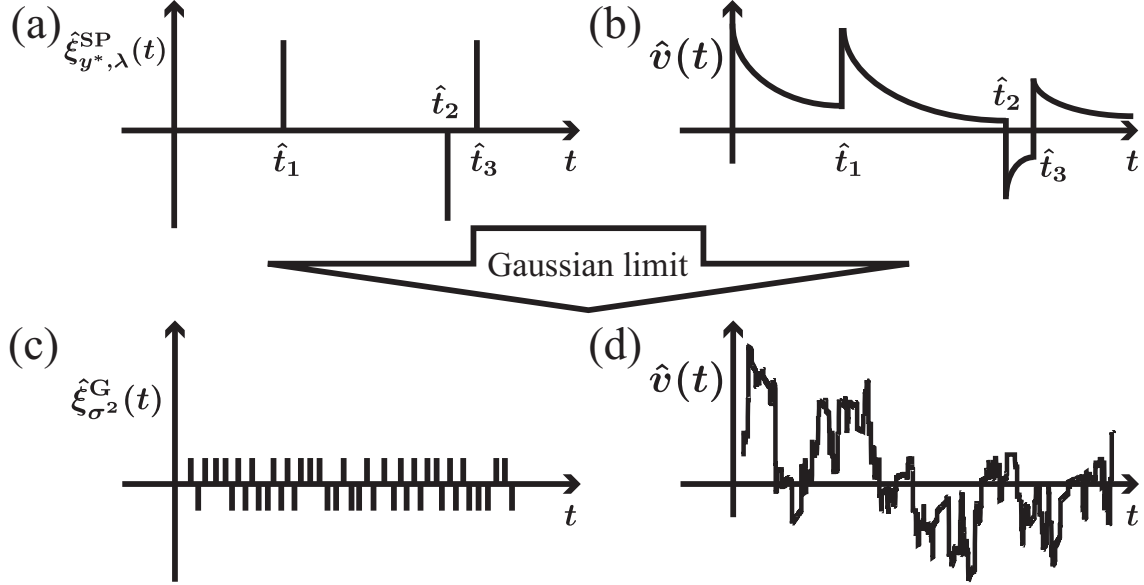


図 2.9: (a-b) 対称ポアソンノイズに駆動される系の典型的なパス (特に $a(\hat{v}) = \hat{v}$ の場合). (c-d) 対称ポアソンノイズからのガウス極限 ($y^* \rightarrow 0, \lambda y^{*2} = \sigma^2(\text{const.})$). (c) はガウスノイズの典型的なパス, (d) はガウスノイズに駆動される系の典型的なパス. この図は文献 [9] の図を改変して作成した.

2.7 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、パスにジャンプを含んでいた。次に、パス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⁹を固定する極限 $\sigma^2 := \lambda y^{*2} = \text{const.}$ (図 2.9(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¹⁰：

$$\hat{\xi}_{\sigma^2}^G(t) := \lim_{\substack{\lambda y^{*2} = \sigma^2 \\ y^* \rightarrow 0}} \hat{\xi}_{y^*, \lambda}^{SP}(t). \quad (2.58)$$

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¹¹。

⁹ 厳密には対称ポアソンノイズの分散は $\langle d\hat{N}^{SP} \rangle = \lambda (y^*)^2 dt = \sigma^2 dt$ なので、 σ^2 は単位時間当たりの分散 (つまり拡散係数) を表す。

¹⁰ 厳密には【この極限操作の収束先をどう定義するか?】が問題となると思う。普通の数学的定式化ではこういった問題を避けるためにガウスノイズ自体を定義せず、ウィーナー過程のみを定義し、【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」である】と看做することが普通だと思う。(但し金澤は詳しくないが、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いう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殆どの場合生じない。

¹¹ この教科書でのガウスノイズの構成はあまり標準的ではないかもしれないが、このガウスノイズの定義は、物理的に自然な摂動展開である【システムサイズ展開】を簡略化して構成した。その意味では、本構成方法は統計物理学における確率過程の理解として歴史的に正当な方向に寄せていると思う。

2.7.1 ガウスノイズに駆動される確率過程

次に、ガウスノイズに駆動される系 (図 2.9(d)) を考える：

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + \hat{\xi}_{\sigma^2}^G(t). \quad (2.59)$$

但し、 $a(\hat{v})$ は任意の滑らかな関数である。この確率微分方程式に対応して、フォッカー・プランク方程式が導出される：

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial v} a(v) + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] P_t(v). \quad (2.60)$$

フォッカー・プランク方程式 (2.60) 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。

導出. この系 (2.59) のマスター方程式は次の手順によって得られる。まず、対称ポアソンノイズのマスター方程式 (2.40) を展開する¹²：

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_t(v)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial v} a(v) P_t(v) + \frac{\lambda}{2} [P_t(v - y^*) + P_t(v + y^*) - 2P_t(v)] \\ &= \frac{\partial}{\partial v} a(v) P_t(v) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda y^{*2n}}{(2n)!} \frac{\partial^{2n}}{\partial v^{2n}} P_t(v). \end{aligned} \quad (2.61)$$

次に分散を固定したまま ($\lambda y^{*2} = \sigma^2$ (const.)), ガウス極限 $y^* \rightarrow 0$ を取ると式 (2.60) が得られる¹³。

2.7.2 ウィーナー過程

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：

$$\frac{d\hat{W}}{dt} = \hat{\xi}^G \iff \hat{W}(t) := \int_{t_i}^t ds \hat{\xi}^G(s). \quad (2.62)$$

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 $d\hat{W} := \hat{\xi}^G dt$ 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形として理解できる。

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：

$$\langle (d\hat{W})^n \rangle = \begin{cases} dt & (n = 2) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}. \quad (2.63)$$

この性質はパスレベルで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)。

¹² この式変形は後述のシステムサイズ展開と本質的に同じである。システムサイズ展開は物理的に自然な摂動展開であり、この教科書でのガウスノイズの定式化は物理的に自然な摂動展開を念頭に置いて構成している。

¹³ メモ：金澤が2023年に京都大学で授業した時 (講義名「統計力学特論」) は、3回目にここまで進んだ。

この性質はキュムラントの形で書くことが出来る¹⁴。例えば、1次から4次までのキュムラントは

$$\langle d\hat{W}^1 \rangle_c = 0, \quad \langle d\hat{W}^2 \rangle_c = dt, \quad \langle d\hat{W}^3 \rangle_c = 0 + o(dt), \quad \langle d\hat{W}^4 \rangle_c = 0 + o(dt) \quad (2.67)$$

となる。一般に4次のキュムラントが0であることは、その確率変数がガウス分布に従う事と等価である。即ち、 $dt \rightarrow 0$ では、 $d\hat{W}$ は分散が dt のガウス分布に従う：

$$d\hat{W} \sim P(dW) = \frac{1}{\sqrt{2\pi dt}} e^{-(dW)^2/(2dt)}. \quad (2.68)$$

この性質は直観的には中心極限定理で説明できる。今、 Δt を有限に取ったうえで、区間 $[t, t + \Delta t)$ における対称ポアソンノイズ $\hat{\xi}_{y^*, \lambda}^{\text{SP}}$ による撃力発生回数 \hat{N}^{SP} は典型的には $\lambda \Delta t$ 回だと見積もることが出来る。ここで対称ポアソン過程 $\Delta \hat{N}^{\text{SP}}(t) := \hat{N}^{\text{SP}}(t + \Delta t) - \hat{N}^{\text{SP}}(t)$ は

$$\Delta \hat{N}^{\text{SP}} = \int_t^{t+\Delta t} \hat{\xi}_{y^*, \lambda}^{\text{SP}} ds \simeq \sum_{i=1}^{\lambda \Delta t} \hat{y}_i \quad (2.69)$$

と見積もることが出来る。ここでガウス極限($y^* \rightarrow 0, \lambda y^{*2} = 1$)を取ると、対称ポアソン過程 \hat{N}^{SP} はウィーナー過程 \hat{W} に漸近する。ここで $\lambda \rightarrow \infty$ となるため、独立同分布に従う確率変数の和を取る回数が十分増え、中心極限定理が使えるだろう。ここで

$$\langle \Delta \hat{N}^{\text{SP}} \rangle = 0, \quad \langle (\Delta \hat{N}^{\text{SP}})^2 \rangle \simeq \lambda y^{*2} \Delta t = \Delta t \quad (2.70)$$

であり、ガウス極限では $\Delta \hat{W} \simeq \Delta \hat{N}^{\text{SP}}$ だから、 $\Delta \hat{W}$ は平均値0、分散 Δt のガウス分布に従うと期待できる。つまり、式(2.68)と整合している。

2.7.3 数値計算での工夫：正規乱数を用いたシミュレーション

ウィーナー過程が正規分布(2.68)に従うことを用いると、ガウスノイズに駆動される確率過程は正規乱数を用いてシミュレーションすることが出来る。つまり、離散時間の確率差分方程式で記述すると

$$\hat{v}_{i+1} - \hat{v}_i = -a(\hat{v}_i)\Delta t + \hat{\eta}_i \sqrt{\Delta t}, \quad P(\eta_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\eta_i^2/2} \quad (2.71)$$

と記述することが出来る。但し、 $\hat{v}_i := \hat{v}(i\Delta t)$ であり、 $\hat{\eta}_i$ は独立な正規乱数である。

数値計算上は正規乱数に基づく式(2.71)を用いる方が標準である。このノートでは対称ポアソンノイズの極限としてガウスノイズを導入したが、これは後述の伊藤の公式を直観的に理解する上で良いが、数値計算を行う際は $\lambda \rightarrow 0$ を取るため、時間刻み幅 Δt を非常に小さく取る必要があり、数値計算上は効率が非常に悪い($\lambda \Delta t \ll 1$ を充たすように Δt を取る必要があることに注意)。一方で、式(2.71)に基づく数値計算はその様な問題がないため、こちらの方が実用的である。

¹⁴キュムラントについて補足する。確率分布 $P(x)$ に対して、特性関数 $\phi(s)$ とキュムラント母関数 $\Phi(s)$ を

$$\phi(s) := \langle e^{isX} \rangle, \quad \Phi(s) := \log \phi(s) \quad (2.64)$$

によって定義する。 n 次モーメントは $\langle x^n \rangle = (1/i^n)(\partial^n / \partial s^n)\phi(s)$ によって与えられ(簡単に示せる)、 n 次のキュムラントは

$$\langle x^n \rangle_c := \frac{1}{i^n} \frac{\partial^n}{\partial s^n} \Phi(s) \quad (2.65)$$

で定義される。確率密度関数 $P(x)$ がガウス分布に従う事は $\Phi(s)$ が2次の多項式 $\Phi(s) = ism - \sigma^2 s^2/2$ で与えられることと同値であり、 $\langle x^n \rangle_c = 0$ が $n \geq 3$ で成立することを示せば $P(x)$ がガウス分布に従うことを証明できる。また、モーメントとキュムラントは

$$\langle x \rangle = \langle x \rangle_c, \quad \langle x^2 \rangle = \langle x^2 \rangle_c + \langle x \rangle^2, \quad \langle x^3 \rangle = \langle x^3 \rangle_c + 3\langle x \rangle \langle x^2 \rangle_c + \langle x \rangle^3, \dots \quad (2.66)$$

のような関係がある。

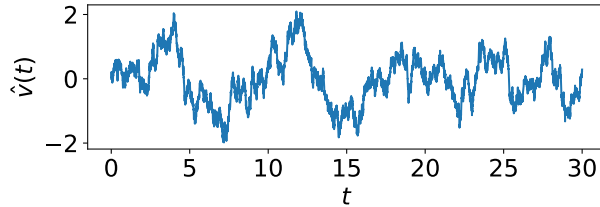


図 2.10: ガウスノイズに駆動される確率過程 (2.59) の典型的なパス. この数値計算結果はコード 2.11 に基づく.

```

1 def path_gen(seed):
2     ts = np.linspace(0,30.0,10000)
3     vs, v, dt = [], 0.0, ts[1]-ts[0]
4     np.random.seed(seed)
5     for t in ts:
6         vs.append(v)
7         v += -v*dt + np.sqrt(dt)*np.random.normal()
8     return vs, ts
9 vs, ts = path_gen(5)
10 plt.plot(ts, vs)

```

コード 2.11: ガウスノイズに駆動される確率過程 (2.59) の数値計算コード. ここでは正規乱数を用いた確率差分方程式 (2.71) に基づいた数値計算を扱っている.

2.7.4 補足：形式的なウィーナー過程の定義

ここまで発見論的にガウスノイズを定義し、その時間積分としてウィーナー過程とレヴィ過程を定義した. 本書は理論物理における実用計算に主眼があり、数学的な厳密性には主眼はないが、より形式的に整理された定義をメモとして与えておく. ウィーナー過程 $\{\hat{W}(t), 0 \leq t \leq T\}$ は次の性質を持つ:

- 初期条件: $\hat{W}(0) = 0$.
- 独立増分: 任意の有限個の時刻 $0 \leq t_1 < t_2 < \dots < t_n \leq T$ を取って来る. ここで $\hat{W}(t_2) - \hat{W}(t_1)$, $\hat{W}(t_3) - \hat{W}(t_2)$, \dots , $\hat{W}(t_n) - \hat{W}(t_{n-1})$ が独立である.
- 時間一様なガウス分布: $\hat{W}_{t+s} - \hat{W}_t$ は平均 0 で分散 s のガウス分布に従う.
- 連続性: パスはほとんど確実に連続である.

2.8 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ホワイトノイズを得る. ホワイトノイズとは、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.

2.8.1 離散時間でのホワイトノイズ

直観的な定式化のために、まずは離散時間系で考えよう. 整数時間 $t = 1, 2, \dots$ で定義される確率過程において、毎ステップで独立同分布に従ってノイズ $\hat{\xi}_t$ を発生させるとする. また系の状態変数 \hat{v}_t とも独立だと暗に仮定する. これを数式で書くと

$$P(\xi_{t_1}, \xi_{t_2}) = P(\xi_{t_1})P(\xi_{t_2}) \quad (2.72)$$

である．今 $\langle \hat{\xi}_t \rangle = 0$ を仮定しよう．毎ステップの乱数生成が独立であるため，乱数同士は無相関になる．つまり，

$$\langle \hat{\xi}_{t_1} \hat{\xi}_{t_2} \rangle = \langle \hat{\xi}_{t_1} \rangle \langle \hat{\xi}_{t_2} \rangle = C \delta_{t_1, t_2} \quad (2.73)$$

が成立する．但し C は定数である．これが離散時間系のホワイトノイズの持つ性質である．

厳密に言うと，式 (2.73) は無相関であることを表現していて，独立であることを保証していない¹⁵ が，この性質を以てホワイトノイズの定義として記載する本が多い．加えて， $\hat{\xi}_t$ は系の状態変数 \hat{v}_t とも独立であるべきである．そこまでの正確な性質は式 (2.73) には反映していない．また，本によっては独立性までは仮定せず，無相関であればホワイトノイズであると定義する流儀のものもある¹⁶．

2.8.2 連続時間でのホワイトノイズ

連続時間でのホワイトノイズとは，上のホワイトノイズの構成の自然な連続極限として定式化される．つまり，クロネッカーデルタ δ_{t_1, t_2} をディラック δ 関数に置き換えればよい．即ち，もし $\hat{\xi}$ がホワイトノイズならば，次の関係式が任意の時刻 t_1, t_2 について成立する：

$$\langle \hat{\xi}(t_1) \hat{\xi}(t_2) \rangle = C \delta(t_1 - t_2). \quad (2.74)$$

但し， C は t_1, t_2 と独立な定数であり， $\langle \hat{\xi} \rangle = 0$ の場合に話を限った．この「定義」は少々曖昧だが，直観的には理解可能だと思う．より正確な定義としては節 2.8.4 を参照する事．

2.8.3 ホワイトノイズの標準形：伊藤・レヴィ分解

ホワイトノイズには標準形がある．それを保証するのが伊藤・レヴィ分解である．伊藤・レヴィ分解 [5, 18] によると，任意のホワイトノイズ $\hat{\xi}^W$ は定数ドリフト m ，複合ポアソンノイズ $\hat{\xi}_{\lambda(y)}^{CP}$ ，ガウスノイズ $\hat{\xi}^G$ の3種類の項に分解できる：

$$\hat{\xi}^W(t) = m + \hat{\xi}_{\sigma^2}^G(t) + \hat{\xi}_{\lambda(y)}^{CP}(t) = m + \sigma \hat{\xi}^G(t) + \sum_y \hat{\xi}_{y, dy \lambda(y)}^P(t). \quad (2.75)$$

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，ホワイト非ガウスノイズとは複合ポアソン過程であり，それはポアソンノイズの和に分解できる．ガウスノイズが対称ポアソンノイズの極限として構成できることを考えると，ポアソンノイズがホワイトノイズの本質的な構成要素であることがわかる．

以上を踏まえると，ホワイト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：

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial v} \{a(v) - m\} + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] P_t(v) + \int_{-\infty}^{\infty} dy \lambda(y) [P_t(v-y) - P_t(v)]. \quad (2.76)$$

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：

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + \hat{\xi}^W = -a(\hat{v}) + m + \hat{\xi}_{\sigma^2}^G + \hat{\xi}_{\lambda(y)}^{CP}. \quad (2.77)$$

¹⁵独立であれば無相関だが，無相関であっても独立だとは言えない

¹⁶例えば計量時系列解析の分野では，無相関であることをホワイトノイズの定義としていることもある [12].

2.8.4 レヴィ過程

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 $\hat{\xi}^W$ への一般化であり，直観的には次の式で定義される：

$$\hat{L}(t) := \int_0^t ds \hat{\xi}^W(s). \quad (2.78)$$

但し， $\hat{\xi}^W$ はホワイトノイズである．形式的に微分形式 $d\hat{L} = \hat{\xi}^W dt$ と書かれる．

補足として，レヴィ過程についてもより形式的な定義をメモしておく．レヴィ過程 $\{\hat{L}(t), 0 \leq t \leq T\}$ は次の性質を持つ．

- 初期条件： $\hat{L}(0) = 0$.
- 独立増分：任意の有限個の時刻 $0 \leq t_1 < t_2 < \dots < t_n \leq T$ を取って来る．ここで $\hat{L}(t_2) - \hat{L}(t_1)$, $\hat{L}(t_3) - \hat{L}(t_2)$, \dots , $\hat{L}(t_n) - \hat{L}(t_{n-1})$ が独立である．
- 時間一様性： $\hat{L}_{t+s} - \hat{L}_t$ は t に依存しない．
- 不連続点での極限の定義：パスは右連続左極限を持つ (càdlàg process) .
- 確率連続：任意の $t \in [0, T]$, $\varepsilon > 0$ に対して， $\lim_{s \rightarrow 0} P(|\hat{L}(t+s) - \hat{L}(t)| > \varepsilon) = 0$.

この定義からホワイトノイズを $\hat{\xi}^W(t) = d\hat{L}(t)/dt$ と形式的に定式化するのは，直観的に定義されたホワイトノイズの定義 (2.74) より形式的にはクリアだと思われる．

2.9 一般のマスター方程式

今までホワイト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ホワイトノイズではなく，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，更には t 依存性を持つケースである：

$$\sigma^2 \rightarrow b_t^2(\hat{v}), \quad \lambda \rightarrow \lambda_t(y|\hat{v}) \quad (2.79)$$

もしくは

$$\hat{\xi}_{\sigma^2}^G(t) \rightarrow \hat{\xi}_{b_t^2(\hat{v})}^G(t), \quad \hat{\xi}_{\lambda(y)}^{\text{CP}}(t) \rightarrow \hat{\xi}_{\lambda_t(y|\hat{v})}^{\text{CP}}(t). \quad (2.80)$$

即ち，一般のマスター方程式は次の形で記述される¹⁷：

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial v} a_t(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b_t^2(v) \right] P_t(v) + \int_{-\infty}^{\infty} dy [\lambda_t(y|v-y) P_t(v-y) - \lambda_t(y|v) P_t(v)]. \quad (2.81)$$

但し， $b_t^2(v)$ は $\hat{v}(t) = v$ の条件下でのガウスノイズの分散であり， $\lambda_t(y|v)$ 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．つまり，確率分布の非負性と確率の保存則

$$P_t(v) \geq 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} P_t(v) dv = 1 \quad (2.82)$$

¹⁷導出に必要な仮定はかなり緩い．正確には自然境界条件を仮定し，また， $a_t(v)$, $b_t(v)$, $\lambda_t(y|v)$ がまともな関数で構成できる普通の確率過程であることを仮定している．仮定の詳細に興味がある読者は章 4.1 を参照せよ．

を充たす時間発展はこの形で書かれる¹⁸。

マスター方程式 (2.81) 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

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a_t(\hat{v}) + b_t(\hat{v}) \cdot \hat{\xi}^G + \hat{\xi}_{\lambda_t(y|\hat{v})}^{\text{CP}}. \quad (2.83)$$

ここで、確率微分方程式 (2.83) 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¹⁹、伊藤積分の詳細については第3章を参照すること。

2.9.1 一般のマスター方程式の導出： $b(v) = 0$ の特殊例

確率微分方程式 (2.83) に対応するマスター方程式が式 (2.81) であることを、 $b(\hat{v}) = 0$ のケースに関してのみ示しておく。 $b(\hat{v}) \neq 0$ のケースは、伊藤の公式を導出した後で行う。

任意の関数 $f(\hat{v})$ についての時間発展を微小時間区間 $[t, t + dt)$ で考える。 $df(\hat{v}) := f(\hat{v}(t + dt)) - f(\hat{v}(t))$ は

$$df(\hat{v}) = \begin{cases} -\frac{\partial f(\hat{v})}{\partial \hat{v}} a_t(\hat{v}) dt & (\text{ジャンプ無：確率} = 1 - \lambda_{t;\text{tot}}(\hat{v}) dt) \\ f(\hat{v} + \hat{y}) - f(\hat{v}) & (\text{ジャンプ幅 } \hat{y} \in [y, y + dy) : \text{確率} = \lambda_t(y|\hat{v}) dy dt) \end{cases}. \quad (2.84)$$

但し、 $\lambda_{t;\text{tot}}(\hat{v}) := \int_{-\infty}^{\infty} \lambda_t(y|\hat{v}) dy$ である。よって、両辺の期待値を取ると

$$\langle df(\hat{v}) \rangle = dt \int_{-\infty}^{\infty} dv P_t(v) \left[-\frac{df(v)}{dv} a_t(v) + \int_{-\infty}^{\infty} \{f(v+y) - f(v)\} \lambda_t(y|v) dy \right] + O(dt^2) \quad (2.85)$$

である。両辺 dt で割って、部分積分や変数変換 $v + y \rightarrow v$ を用いて積分内で $f(v)$ を括りだすと

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial P_t(v)}{\partial t} f(v) dv = \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \left[\frac{\partial}{\partial v} a_t(v) P_t(v) + \int_{-\infty}^{\infty} dy \{ \lambda_t(y|v-y) P_t(v-y) - \lambda_t(y|v) P_t(v) \} \right] \quad (2.86)$$

となる。この等式は任意の $f(v)$ に対して成立するので、 $b_t(v) = 0$ の時は式 (2.81) が成立する。

2.9.2 数値計算上の工夫：条件付き総強度とジャンプ幅分布の分離

以下、時間的に一様な時間発展を示すとき（つまり、 $a_t(\hat{v}), b_t(\hat{v}), \lambda_t(y|\hat{v})$ が t 依存性を持たない時）を扱うとしよう。数値計算を行う上で、条件付き総強度 $\lambda_{\text{tot}}(v)$ と、条件付きジャンプ幅分布 $\rho(y|v)$ を導入することもできる。具体的には、

$$\lambda_{\text{tot}}(v) := \int_{-\infty}^{\infty} \lambda(y|v) dy, \quad \rho(y|v) := \frac{\lambda(y|v)}{\lambda_{\text{tot}}(v)} \quad (2.87)$$

と定義する。この時、 $\hat{v}(t) = v$ の条件下での総強度は $\lambda_{\text{tot}}(v)$ で与えられ、 $[t, t + dt)$ に何らかのジャンプが発生する確率は $\lambda_{\text{tot}}(v) dt$ である。また、ジャンプの発生が決まった時、そのジャンプ幅分布は $\rho(y)$ で与えられる。

¹⁸ 量子開放系でも類似する議論が存在する。具体的には、CPTP 性（completely-positive and trace-preserving）を保つ連続時間量子マルコフ過程のマスター方程式はリンドブラッド型マスター方程式（master equation in Lindblad form）しか存在しない。CPTP とは「確率の非負性、確率の保存」を量子系に拡張した概念であることを考えると、量子マスター方程式の標準形に対応して、古典マスター方程式にも標準形が存在していると私は解釈している。

¹⁹ ここでの記号 “.” は伊藤型の積（伊藤積分）を意味する記号である。

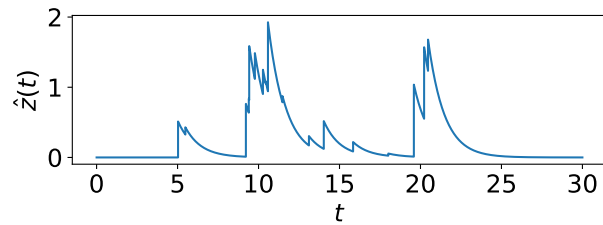


図 2.11: ホークス過程 (2.88) は状態依存性を持つ複合ポアソンノイズに駆動される確率過程 (2.83) の一種である. ホークス過程 (2.88) の典型的パスを示す. このプログラムはコード 2.12 に基づいて, パラメタを $\lambda_0 = 0.3$, $n = 0.5$ に取った.

```

1 def lmd_tot(z):
2     return 0.3 + z
3 def path_gen(seed):
4     ts = np.linspace(0,30.0,100000)
5     zs, z, dt = [], 0.0, ts[1]-ts[0]
6     np.random.seed(seed)
7     for t in ts:
8         zs.append(z)
9         if lmd_tot(z)*dt >= np.random.rand():
10            z += 0.5*np.random.exponential()
11            z += -z*dt
12     return zs, ts
13 zs, ts = path_gen(10)
14 fig = plt.figure(figsize=(7,2))
15 plt.plot(ts, zs)

```

コード 2.12: ホークス過程 (2.88) の数値計算コード. ここでは条件付き総強度 $\lambda_{\text{tot}}(v)$ とジャンプ幅分布 $\rho(y|v)$ を式 (2.87) に従って導入した上で数値計算している.

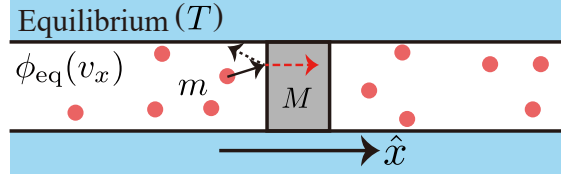


図 2.12: レイリーピストン (2.92) の概念図. 1次元上を動ける壁 (ピストン粒子, 質量 M) が, 希薄気体 (平衡状態, 粒子質量 m) によって駆動されて, 1次元ブラウン運動を示す. ジャンプレートは式 (2.93) で与えられる. レイリーピストンは, 状態依存性を持つ複合ポアソンノイズに駆動される確率過程 (2.83) の一例である.

例 2.9.1 (ホークス過程) 例題として次の確率微分方程式を考えよう ($\tau > 0$, $\lambda_0 > 0$, $n > 0$):

$$\frac{d\hat{z}}{dt} = -\frac{\hat{z}}{\tau} + \frac{1}{\tau} \hat{\xi}_{\lambda(y|\hat{z})}^{\text{CP}}, \quad \lambda(y|z) := \lambda_{\text{tot}}(z)\rho(y), \quad (2.88)$$

$$\lambda_{\text{tot}}(z) := \lambda_0 + z, \quad \rho(y) := \begin{cases} \frac{1}{n} e^{-y/n} & (y \geq 0) \\ 0 & (y < 0) \end{cases}. \quad (2.89)$$

このモデルはホークス過程と呼ばれており, 自己励起性 (self-excitation, イベントの連鎖反応) を持つ確率現象のモデルである. 社会現象 (金融・人間行動), 神経科学系, 地震予測のモデルとして使われている. 典型的なパスを図 2.13 に示す. また, 数値計算のコードは 2.12 である. この系の強度 $\hat{\lambda}_{\text{tot}}(t)$ は次の確率積分方程式に従う:

$$\hat{\lambda}_{\text{tot}}(t) = \lambda_0 + \int_0^t h(s) \hat{\xi}_{\lambda(y|\hat{z})}^{\text{CP}}(s) ds = \lambda_0 + \sum_{i=1}^{\hat{N}(t)} \hat{y}_i h(t - \hat{t}_i), \quad \hat{y}_i \sim \rho(y), \quad h(t) := \frac{1}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (2.90)$$

また, マスター方程式は次に式で与えられる:

$$\frac{\partial P_t(z)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \frac{z}{\tau} P_t(z) \right\} + \int_0^\infty dy \rho(y) [(\lambda_0 + z - y/\tau) P_t(z - y/\tau) - (\lambda_0 + z) P_t(z)]. \quad (2.91)$$

但し, $h(t)$ は 1 回のイベントが引き起こす記憶項を表す. 今回は, 指数関数型の減衰に限ってモデル化している.

このマスター方程式は厳密解を得ることが出来る [13, 14]. 特に $n = 1$ が臨界点になっており, $n < 1$ では定常解が存在するが, $n > 1$ では定常解が存在しない. また, $h(t)$ が指数減衰しない一般のケース (非マルコフ過程になる [14, 15]) や, 総強度に非線形性を入れた場合 [16, 17] でも, マスター方程式の漸近解を求めることが出来る²⁰.

例 2.9.2 (レイリーピストン) 次の確率モデルとして, 少し複雑だが物理的にわかりやすい 1次元ブラウン運動のモデル (レイリーピストンと呼ばれる) を考えよう. 物理的な設定を図 2.12 に示す. つまり, 1次元上を動く壁 (ピストン粒子, 質量 M) が希薄ガス (粒子の質量は m) に囲まれ, 分子衝突によって 1次元ブラウン運動する設定である.

この系は次のポアソンジャンプ過程としてモデル化できる:

$$\frac{d\hat{V}}{dt} = \hat{\xi}_{\lambda(Y|\hat{V})}^{\text{CP}}. \quad (2.92)$$

²⁰ メモ: 金澤が 2023 年に京都大学で授業した時 (講義名「統計力学特論」) は, 4 回目にここまで進んだ.

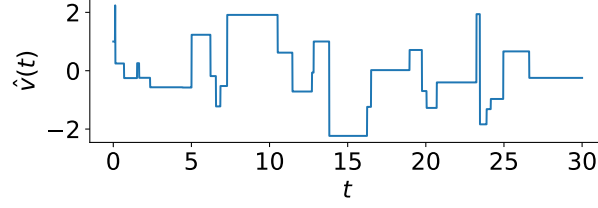


図 2.13: BGK モデル (2.97) の典型的なパス. このプログラムはコード 2.13 に基づいて, パラメタを $M = 1$, $k_B T = 1$, $\lambda_0 = 1$ に取った.

```

1 def path_gen(seed):
2     ts = np.linspace(0,30.0,10000)
3     vs, v, dt, lmd = [], 1.0, ts[1]-ts[0], 1.0
4     np.random.seed(seed)
5     for t in ts:
6         vs.append(v)
7         if lmd*dt >= np.random.rand():
8             v = np.random.normal()
9     return vs, ts
10 vs, ts = path_gen(5)
11 plt.plot(ts, vs)

```

コード 2.13: BGK モデル (2.97) の数値計算コード.

但し, \hat{V} は壁 (ピストン粒子) の速度であり, ジャンプ幅 (速度変化の幅) Y についての条件付きジャンプレート $\lambda(Y|V)$ は次の式で定義される:

$$\lambda(Y|V) = \rho S \frac{(1+\varepsilon)^2}{4\varepsilon^2} |Y| \phi_{\text{eq}} \left(V + \frac{1+\varepsilon}{2\varepsilon} Y \right), \quad \phi_{\text{eq}}(v_x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} e^{-\frac{mv_x^2}{2k_B T}}. \quad (2.93)$$

ここで ρ はガスの数密度, S は壁の面積, 質量比は $\varepsilon := m/M$ である. このモデルは希薄ガスの極限を取ると, 統計物理学的に正当化できるモデルである.

ここで数値計算を意識して, 総強度とジャンプ幅分布を分離すると次のようになる:

$$\begin{aligned} \lambda_{\text{tot}}(V) &:= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda(Y|V) dY = \rho S \left[\frac{2k_B T}{m} \phi_{\text{eq}}(V) + V \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{m}{2k_B T}} V \right) \right] \\ \rho(Y|V) &:= \frac{\lambda(Y|V)}{\lambda_{\text{tot}}(V)} = \frac{(1+\varepsilon)^2}{4\varepsilon^2} \frac{|Y|}{\frac{2k_B T}{m} \phi_{\text{eq}}(V) - V \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{m}{2k_B T}} V \right)} \phi_{\text{eq}} \left(V + \frac{1+\varepsilon}{2\varepsilon} Y \right) \end{aligned} \quad (2.94)$$

また, この系のマスター方程式は次の式 (線型ボルツマン方程式) で与えられる:

$$\frac{\partial P_t(V)}{\partial t} = \rho S \int_{-\infty}^{\infty} dv_x |v_x - V| \{ P_t(V') \phi_{\text{eq}}(v'_x) - P_t(V) \phi_{\text{eq}}(v_x) \}, \quad (2.95)$$

但し, 衝突後の速度 V' , v'_x は次の式で与えられる:

$$V' := V - \frac{2m}{m+M} (V - v_x), \quad v'_x := v_x + \frac{2M}{m+M} (V - v_x). \quad (2.96)$$

例 2.9.3 (Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) モデル) レイリーピストンは比較的分かりやすいモデルだが, それでも少し複雑である. そこでより簡単なブラウン運動のモデルとして BGK モデルを

紹介しよう。BGK モデルの特徴は、「衝突」後は粒子の速度分布が無条件で平衡速度分布になると仮定することである。即ち、

$$\hat{V}(t+dt) = \begin{cases} \hat{V}(t) & (\text{ジャンプ無：確率} = 1 - \lambda_0 dt) \\ \hat{V}' & (\text{ジャンプ有：確率} = \lambda_0 dt, \text{ジャンプ先：}\hat{V}' \sim \phi_{\text{eq}}(V')) \end{cases} \quad (2.97)$$

但し、平衡速度分布は次の式で与えられる：

$$\phi_{\text{eq}}(V') = \sqrt{\frac{M}{2\pi k_B T}} e^{-\frac{MV'^2}{2k_B T}} \quad (2.98)$$

この式は次の確率微分方程式に書き直すことが出来る：

$$\frac{d\hat{V}}{dt} = \sum_{i=1}^{\hat{N}(t)} (\hat{V}'_i - \hat{V}) \delta(t - \hat{t}_i), \quad \hat{V}'_i \sim \phi_{\text{eq}}(V'). \quad (2.99)$$

但し、 \hat{t}_i は強度 λ_0 のポアソン過程に従う。この系のマスター方程式 (BGK 方程式) は次の式で与えられる²¹：

$$\frac{\partial P_t(V)}{\partial t} = \lambda_0 [\phi(V) - P_t(V)]. \quad (2.100)$$

平均衝突時間は $1/\lambda_0$ で与えられる。数値計算のコード例を 2.13 に提示する。このモデルは少し設定を複雑に変更しても、解析解 (固有値・固有関数など) が詳しく調べられている [7]

BGK 方程式はマスター方程式の標準形 (2.81) を充たしている。具体的には、

$$a_t(V) = 0, \quad b_t(V) = 0, \quad \lambda_t(y|V) = \lambda_0 \phi_{\text{eq}}(y + V) \quad (2.101)$$

と置けばよい。

導出。 任意の $f(\hat{V})$ に対して、その時間発展を考えると、

$$df(\hat{V}) = \begin{cases} 0 & (\text{ジャンプ無：確率} = 1 - \lambda_0 dt) \\ f(\hat{V}') - f(\hat{V}) & (\text{ジャンプ有：確率} = \lambda_0 dt, \text{ジャンプ先：}\hat{V}' \sim \phi_{\text{eq}}(V')) \end{cases} \quad (2.102)$$

である。ここで両辺の期待値を取ると、

$$\langle df(\hat{V}) \rangle = \lambda_0 dt \int_{-\infty}^{\infty} dV' \phi_{\text{eq}}(V') \langle [f(V') - f(\hat{V})] \rangle. \quad (2.103)$$

整理すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} dV f(V) \frac{\partial P_t(V)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} dV dV' \phi_{\text{eq}}(V') [f(V') - f(V)] P_t(V) \quad (2.104)$$

ここで右辺の第 1 項についてだが、積分変数 V' と V はダミー変数なので、表記は自由に入れ替えても良い (つまり $V \rightarrow V', V' \rightarrow V$) ので

$$\int_{-\infty}^{\infty} dV dV' \phi_{\text{eq}}(V') f(V') P_t(V) = \int_{-\infty}^{\infty} dV dV' \phi_{\text{eq}}(V) f(V) P_t(V') \quad (2.105)$$

である。以上を踏まえると

$$\int_{-\infty}^{\infty} dV f(V) \frac{\partial P_t(V)}{\partial t} = \lambda_0 \int_{-\infty}^{\infty} dV dV' f(V) [\phi_{\text{eq}}(V) P_t(V') - \phi_{\text{eq}}(V') P_t(V)] \quad (2.106)$$

である。この等式は任意の $f(V)$ について成立するので、BGK 方程式 (2.100) を得る。

²¹ この式は一見 $P_t(V)$ について線型ではないように見えるが、 $\phi(V) = \phi(V) \int_{-\infty}^{\infty} P_t(V') dV'$ を利用して簡約化したので、元々は $P_t(V)$ について線型方程式である。

別導出. もうすこし簡易的に実行可能な別の導出方法について触れる. 式 (2.105) でダミー変数の入れ替えを行うことで $f(V)$ を括り出すことを行ったが, このような工夫をせずに機械的に計算する方法として $f(V)$ に δ 関数を代入する方法がある.

具体的には式 (2.104) にたいして, $f(V) = \delta(V - V'')$ を代入しよう. ここで V'' は任意の実数である. 結果, 式 (2.104) は

$$\frac{\partial P_t(V'')}{\partial t} = \phi_{\text{eq}}(V'') \int_{-\infty}^{\infty} dV P_t(V) - P_t(V'') \quad (2.107)$$

になる. 更に, 積分のダミー変数を $V \rightarrow V'$ と書き換え, 関数の引数のラベルを置き換える $V'' \rightarrow V$ ことで BGK 方程式 (2.100) を得る.

2.10 クラマース・モヤル展開

マスター方程式の一般形 (2.81) 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 (2.81) 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

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy \lambda(y|v-y) P_t(v-y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dy y^n \frac{\partial^n}{\partial v^n} \lambda(y|v) P_t(v), \quad (2.108)$$

マスター方程式 (2.81) は次の形に変形でき,

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial v} a(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b^2(v) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial v^n} \alpha_n(v) \right] P_t(v), \quad (2.109)$$

この式は形式的に無限階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:

$$\alpha_n(v) := \int_{-\infty}^{\infty} dy y^n \lambda(y|v). \quad (2.110)$$

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, 後述するファン・カンペンのシステムサイズ展開 [6,37] 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.

2.11 マスター方程式と確率微分方程式の一対一対応 (マルコフジャンプ過程)

ここまで, 確率微分方程式からマスター方程式を導出することを行った. では, マスター方程式から確率微分方程式を復元することができるだろうか? これが可能なら, 両者は一対一対応するといって構わないだろう. この答えは Yes である. この節では, この一対一対応性をジャンプ過程に限って説明する. より一般の場合については後の章 (章 3.5) で扱うことにする.

まず設定としてマルコフジャンプ過程を考える. マルコフジャンプ過程とは, 状態依存性を持つ複合ポアソンノイズのみに駆動される確率過程である:

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = \hat{\xi}_{\lambda(y|\hat{v})}^{\text{CP}}. \quad (2.111)$$

この系のマスター方程式は

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} dy [\lambda(y|v-y)P_t(v-y) - \lambda(y|v)P_t(v)] \quad (2.112)$$

である。ここでの目標はマスター方程式 (2.112) を式変形して、元の確率微分方程式 (2.111) を導出することである。

導出. ここで、マスター方程式は任意の初期条件から出発して成立することに着目する。今、時刻 t における確率分布を $P_t(v) = \delta(v-u)$ で与えるとする (u は任意の実数)。つまり、初期条件として $\hat{v}(t) = u$ を選択したことを意味する。この時、時刻 $t+dt$ での確率分布は、式 (2.112) の両辺を区間 $[t, t+dt]$ で積分することで得られ、

$$\begin{aligned} P_{t+dt}(v) &= P_t(v) + \int_{-\infty}^{\infty} dy [\lambda(y|v-y)P_t(v-y) - \lambda(y|v)P_t(v)]dt + O(dt^2) \\ &= \delta(v-u) + \int_{-\infty}^{\infty} dy [\lambda(y|v-y)\delta(v-y-u) - \lambda(y|v)\delta(v-u)]dt + O(dt^2) \\ &= [1 - \lambda_{\text{tot}}(u)dt] \delta(v-u) + \lambda(v-u|u)dt + O(dt^2) \end{aligned} \quad (2.113)$$

となる。但し、 $\lambda_{\text{tot}}(u) := \int_{-\infty}^{\infty} \lambda(y|u)dy$ である。つまり、この式の意味することは、

$$\begin{aligned} P(\hat{v}(t+dt) \in (v, v+dv)) &= \int_v^{v+dv} P_{t+dt}(v')dv' \\ &= \begin{cases} 1 - \lambda_{\text{tot}}(u)dt + o(dt) & (u \in (v, v+dv)) \\ \lambda(v-u|u)dvdt + o(dt dv) & (u \notin (v, v+dv)) \end{cases} \end{aligned} \quad (2.114)$$

であり (式 (2.113) を代入した)、パスレベルの動力学では

$$\hat{v}(t+dt) = \begin{cases} u & (\text{ジャンプ無: 確率} = 1 - \lambda_{\text{tot}}(u)dt) \\ \hat{y} + u & (\text{ジャンプ幅 } \hat{y} \in [y, y+dy): \text{確率} = \lambda(y|u)dydt) \end{cases} \quad (2.115)$$

となる。これはまさにマルコフジャンプ過程 (2.111) の、微小時間 dt での動力学と等価である。

パスの時間発展を考えると、毎ステップここでの考察を繰り返し適用することが出来る。つまり、時刻 t_i での $\hat{v}(t_i) = u_i$ を所与としたうえで、 $P_{t_i}(v) = \delta(v-u_i)$ であり、上の考察を用いると t_{i+1} での $\hat{v}(t_{i+1}) = u_{i+1}$ が決まる。この考察を繰り返すと、確率微分方程式と等価なダイナミクスが得られる。よって、マルコフジャンプ過程については、マスター方程式から確率微分方程式を復元することが出来た。

2.12 次に学ぶべき項目は何か？

ここまで、マルコフ過程における SDE とマスター方程式の外観を理解した。しかし残っている項目がある。それはガウスノイズ $\hat{\xi}^G$ とその係数 $b(\hat{v})$ における「積の定義」である。これは伊藤積分の問題と知られており、第3章で伊藤の公式と共に説明される。これで形式的な残りの「穴」が埋まることになる。

第2章のまとめ

本章をまとめると次のようになる。

1. マルコフ過程とは過去の履歴に依存しない時間発展を示す系である。
2. マルコフ過程において、パスを記述する確率微分方程式 (SDE) と、確率密度関数の時間発展を記述するマスター方程式は、互いに一対一対応する。前者の方が動力学に関する直観が得られるが、後者の方が解析的に都合が良い。
3. マスター方程式の導出は次の手順である。

- (a) パスを記述する SDE ($d\hat{v}/dt = \dots$) が与えられているとする。まずは任意の関数 $f(\hat{v})$ の時間発展を考える。ジャンプがあるときは場合分けする：

$$df(\hat{v}) = \dots$$

(注：ここでは1次元系マルコフ過程を考えたが、 K 次元 $\hat{\Gamma} := (\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_K)$ のマルコフ過程を考える時は、任意の K 変数関数 $f(\hat{\Gamma})$ の時間発展 $df(\hat{\Gamma})$ を考えればよい。)

- (b) 両辺の期待値を取る：

$$\langle df(\hat{v}) \rangle = \langle \dots \rangle.$$

- (c) 積分形として $f(v)$ を括り出す変形を行う (部分積分や積分変数の変換)：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \mathcal{L}P_t(v).$$

- (d) 積分の恒等性から積分を外し、マスター方程式を得る：

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \mathcal{L}P_t(v).$$

4. ホワイトノイズには標準形があり、ガウスノイズと複合ポアソンノイズの和に分解可 (レヴィ・伊藤分解)：

$$\hat{\xi}^W = m + \sigma \hat{\xi}^G + \hat{\xi}_{\lambda(y)}^{\text{CP}}.$$

5. ガウスノイズは対称ポアソンノイズの微小ジャンプ極限として構成できる (つまり全てのホワイトノイズはポアソンノイズから構成可)

6. 1次元マルコフ過程では、確率微分方程式にも標準形がある：

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

7. 1次元マルコフ過程では、マスター方程式に標準形がある：

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial v} a_t(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b_t^2(v) \right] P_t(v) + \int_{-\infty}^{\infty} dy [\lambda_t(y|v-y) P_t(v-y) - \lambda_t(y|v) P_t(v)].$$

2.13 練習問題

2.13.1 ポアソン過程の解析解

(1) ポアソン過程において、区間 $[0, t)$ におけるイベント発生回数の分布がポアソン分布 (2.34) に従うことを示せ.

(2) プログラミングコードを書き、数値的に関係式 (2.21) を確認せよ.

2.13.2 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 (2.40) を導出せよ.

2.13.3 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 (2.48) を導出せよ.

2.13.4 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：

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = \hat{\xi}_{\sigma^2}^G. \quad (2.116)$$

この系の拡散係数が次で与えられることを示せ：

$$D = \frac{\sigma^2}{2}. \quad (2.117)$$

2.13.5 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：

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -\gamma\hat{v} + \hat{\xi}_{\sigma^2}^G. \quad (2.118)$$

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：

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \left[\gamma \frac{\partial}{\partial v} v + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] P_t(v). \quad (2.119)$$

(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：

$$P_{\text{SS}}(v) := \lim_{t \rightarrow \infty} P(v, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma^2/\gamma}} e^{-\gamma v^2/\sigma^2} \quad (2.120)$$

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)

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

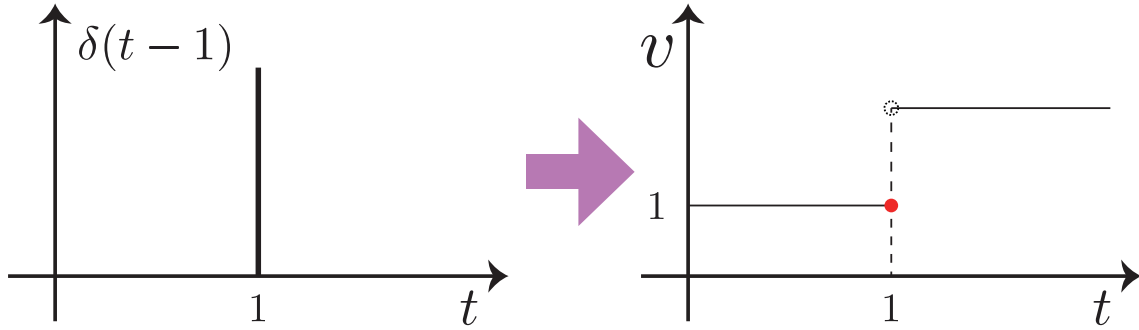


図 3.1: δ 関数型の撃力 (a) と, それに対応する $v(t)$ の動き (b). 図 (b) の赤丸での v の値 $v(t) = 1$ を採用するのが伊藤積分のアイデア.

- 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 ($0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T$, 図 3.2(a)). 任意のホワイトノイズ $\hat{\xi}^W(t)$ に対して, 次の積分を $N \rightarrow \infty$ の極限として導入する:

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

但し, $f(x)$ は任意の滑らかな関数, $\hat{L}(t) \equiv \int_0^t ds \hat{\xi}^W(s)$ はレヴィ過程, $\Delta \hat{L}(t_i) \equiv \hat{L}(t_{i+1}) - \hat{L}(t_i) = \hat{\xi}(t_i) \Delta t_i$ 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 “ \cdot ” を導入したが, これは $f(\hat{v})$ と $\hat{\xi}^W$ 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

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

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.

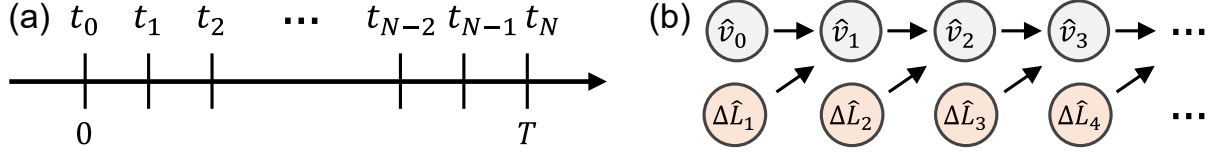


図 3.2: (a) 離散時間の導入. $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T$ として時間軸を分割する. (b) 伊藤型確率微分方程式における時間発展の因果構造. \hat{v}_{i+1} は \hat{v}_i と $\Delta \hat{L}_i$ の影響を受けている. 一方で $\Delta \hat{L}_i$ は \hat{v}_i と独立に構成される.

を, 次の確率積分方程式の形式的な表現として定義する:

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

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

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

と記述する方がする方が普通である.

3.2.1 伊藤積分の性質

今, ホワイトノイズの期待値を 0 に設定する. つまり $\langle \hat{\xi}^W \rangle = 0$ であり, $\langle d\hat{L} \rangle = \langle \hat{\xi}^W ds \rangle = 0$ とする. この時, 伊藤積分に関する期待値は 0 になる:

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

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 (図 3.2(b)). 確率差分方程式は

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

である. 但し, 時間刻み幅を Δt と書いたとき, $\hat{v}_i := \hat{v}(t_i)$, $t_i := i\Delta t$ と置いた. ここで因果構造として, $\Delta \hat{L}_i$ 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.

3.2.2 伊藤型確率微分方程式の数値計算

伊藤型の確率微分方程式の数値計算は差分化すれば非常に簡単である. 具体例を 2 つ程見てみよう.

例 3.2.1 次の様に, ガウスノイズに駆動される伊藤型確率微分方程式 (幾何ブラウン運動) を考える:

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + b(\hat{v}) \cdot \hat{\xi}^G, \quad a(\hat{v}) = m\hat{v}, \quad b(\hat{v}) = \sigma\hat{v}. \quad (3.13)$$

この幾何ブラウン運動は, 次の離散化ルールで数値計算すればよい:

$$\hat{v}_{i+1} = \hat{v}_i - a(\hat{v}_i)\Delta t + b(\hat{v}_i)\hat{\eta}_i\sqrt{\Delta t}. \quad (3.14)$$

但し, 時間刻み幅を Δt と書いたとき, $\hat{v}_i := \hat{v}(i\Delta t)$ と置いた. また, $\hat{\eta}_i$ は毎ステップで独立な正規乱数 (分散は 1) である. 計算結果は図は 3.3 であり, コードは 3.1 である. パラメタは $m = 0.1$, $\sigma = 1$.

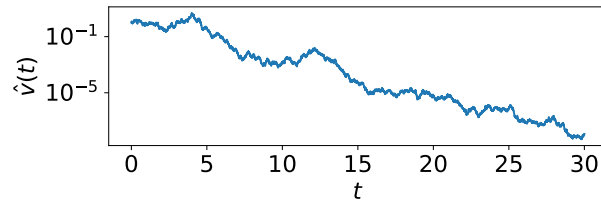


図 3.3: ガウスノイズに駆動される伊藤型確率微分方程式 (3.13) の典型的なパス。この数値計算結果はコード 3.1 に基づく。

```

1 def path_gen(seed):
2     ts = np.linspace(0,30.0,10000)
3     vs, v, dt = [], 0.0, ts[1]-ts[0]
4     np.random.seed(seed)
5     for t in ts:
6         vs.append(v)
7         v += -v*dt + np.sqrt(dt)*np.random.normal()
8     return vs, ts
9 vs, ts = path_gen(5)
10 plt.plot(ts, vs)

```

コード 3.1: ガウスノイズに駆動される伊藤型確率微分方程式 (3.13) の数値計算コード。ここでは差分方程式 (3.14) に基づいた数値計算を扱っている。

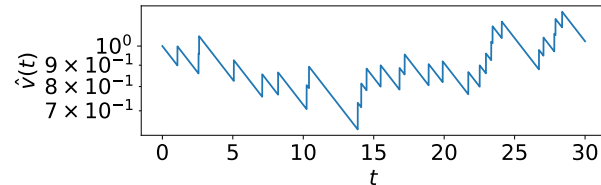


図 3.4: ポアソンノイズに駆動される伊藤型確率微分方程式 (3.15) の典型的なパス。この数値計算結果はコード 3.2 に基づく。

```

1 def path_gen(seed):
2     ts = np.linspace(0,30.0,10000)
3     vs, v, dt, lmd, y = [], 1.0, ts[1]-ts[0], 1.0, +0.1
4     np.random.seed(seed)
5     for t in ts:
6         vs.append(v)
7         if lmd*dt >= np.random.rand():
8             v += y
9             v += -0.1*v*dt
10    return vs, ts
11 vs, ts = path_gen(2)
12 fig = plt.figure(figsize=(7,2))
13 plt.plot(ts, vs)
14 plt.yscale('log')

```

コード 3.2: ガウスノイズに駆動される伊藤型確率微分方程式 (3.15) の数値計算コード。ここでは差分方程式 (3.16) に基づいた数値計算を扱っている。

例 3.2.2 次の様に，ポアソンノイズに駆動される伊藤型確率微分方程式を考える：

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + b(\hat{v}) \cdot \hat{\xi}_{\lambda, y^*}^{\text{P}}, \quad a(\hat{v}) = m\hat{v}, \quad b(\hat{v}) = \hat{v}. \quad (3.15)$$

この確率過程は，次の離散化ルールで数値計算すればよい：

$$\hat{v}_{i+1} = \begin{cases} \hat{v}_i - a(\hat{v}_i)\Delta t & (\text{確率} = 1 - \lambda\Delta t) \\ \hat{v}_i + b(\hat{v}_i)y^* & (\text{確率} = \lambda\Delta t) \end{cases}. \quad (3.16)$$

但し，時間刻み幅を Δt と書いたとき， $\hat{v}_i := \hat{v}(i\Delta t)$ と置いた．計算結果は図は 3.4 であり，コードは 3.2 である．パラメタは $m = 0.1$, $\lambda = 1$, $y^* = 0.1$.

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：

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + b(\hat{v}) \cdot \hat{\xi}_{y^*, \lambda}^{\text{P}}. \quad (3.17)$$

但し，ポアソンノイズはデルタ関数列を用いて

$$\hat{\xi}_{y^*, \lambda}^{\text{P}}(t) = \sum_{i=1}^{\infty} y^* \delta(t - \hat{t}_i). \quad (3.18)$$

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．

$$d\hat{v}(t) = \begin{cases} b(\hat{v})y^* & (\hat{t}_i \in [t, t + dt)) \\ -a(\hat{v})dt & (\hat{t}_i \notin [t, t + dt)) \end{cases}. \quad (3.19)$$

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：

$$df(\hat{v}(t)) = f(\hat{v}(t + dt)) - f(\hat{v}(t)) = \begin{cases} f(\hat{v} + b(\hat{v})y^*) - f(\hat{v}) & (\hat{t}_i \in [t, t + dt)) \\ -f'(\hat{v})a(\hat{v})dt & (\hat{t}_i \notin [t, t + dt)) \end{cases}. \quad (3.20)$$

ここで時刻 $t = \hat{t}_i$ において，式 (3.20) 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 (3.20) をテイラー展開すると打ち切ることが出来ず，

$$df(\hat{v}) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(d\hat{v})^n}{n!} \cdot \frac{d^n f(\hat{v})}{d\hat{v}^n}, \quad (3.21)$$

または

$$\frac{df(\hat{v})}{dt} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{(d\hat{v})^n}{dt} \cdot \frac{d^n f(\hat{v})}{d\hat{v}^n} \quad (3.22)$$

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 (3.20) 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 (3.20) 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 (2.63) 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の特徴である。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の形に拡張することが出来る³：

$$(d\hat{W})^n = \begin{cases} dt & (n=2) \\ 0 & (n \geq 3) \end{cases}, \quad d\hat{W}dt = 0 \quad (3.23)$$

アンサンブル平均がない微分形式 (3.23) 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

$$\int_0^t (d\hat{W})^n f(\hat{v}) = \begin{cases} \int_0^t dt f(\hat{v}) & (n=2) \\ 0 & (n \geq 3) \end{cases}, \quad \int_0^t dt d\hat{W}^n f(\hat{v}) = 0. \quad (3.24)$$

この関係式 (3.24) は平均二乗収束 (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次の式が成立することを指す：

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \langle (\hat{A} - \hat{B})^2 \rangle = 0 \quad (3.25)$$

³より一般には $(d\hat{W})^n(dt)^m = 0$, $n, m \geq 1$ として計算して良い。

導出. この意味で関係式 (3.24) を示す. まずは離散化された状態で計算を開始する:

$$\begin{aligned}
& \left\langle \left[\sum_{i=0}^{N-1} f(\hat{v}_i) \Delta \hat{W}_i^2 - \sum_{i=0}^{N-1} f(\hat{v}_i) \Delta t_i \right]^2 \right\rangle \\
&= \left\langle \left[\sum_{i=0}^{N-1} f(\hat{v}_i) (\Delta \hat{W}_i^2 - \Delta t_i) \right]^2 \right\rangle \\
&= \left\langle \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} f(\hat{v}_i) f(\hat{v}_j) (\Delta \hat{W}_i^2 - \Delta t_i) (\Delta \hat{W}_j^2 - \Delta t_j) \right\rangle \\
&= \left\langle \sum_{i=0}^{N-1} \underbrace{f^2(\hat{v}_i) (\Delta \hat{W}_i^2 - \Delta t_i)^2}_{\text{過去}} \right\rangle + 2 \left\langle \sum_{i>j}^{N-1} \underbrace{f(\hat{v}_i) f(\hat{v}_j) (\Delta \hat{W}_j^2 - \Delta t_j) (\Delta \hat{W}_i^2 - \Delta t_i)}_{\text{過去}} \right\rangle \\
&= \sum_{i=0}^{N-1} \langle f^2(\hat{v}_i) \rangle \underbrace{\langle (\Delta \hat{W}_i^2 - \Delta t_i)^2 \rangle}_{=o(\Delta t_i)} + 2 \sum_{i>j}^{N-1} \langle f(\hat{v}_i) f(\hat{v}_j) \rangle \underbrace{\langle (\Delta \hat{W}_i^2 - \Delta t_i) \rangle}_{=o(\Delta t_i)} = o(|\Delta t|) \quad (3.26)
\end{aligned}$$

但し, $\langle \Delta \hat{W}_i^2 \rangle = \Delta t_i + o(\Delta t_i)$ と $\langle \Delta \hat{W}_i^4 \rangle = 0 + o(\Delta t_i)$ を用いた. 結果,

$$\lim_{\substack{|\Delta t| \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \left\langle \left[\sum_{i=0}^{N-1} f(\hat{v}_i) \Delta \hat{W}_i^2 - \sum_{i=0}^{N-1} f(\hat{v}_i) \Delta t_i \right]^2 \right\rangle = 0 \quad (3.27)$$

であり, 関係式 (3.24) が $n = 2$ の場合に示された. $n \geq 3$ の場合も同様に示すことができるが, その詳細は付録 A.1 を参照する事⁴.

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:

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + b(\hat{v}) \cdot \hat{\xi}^G. \quad (3.28)$$

ポアソンモデルの微分公式 (3.22) はパス上のジャンプに由来して単純ではない. 一方でガウス型確率過程 (3.28) の微分ルールは極めて綺麗になる事が期待できる. 何故なら, ガウスノイズではジャンプ幅ゼロの極限 (2.58) を取るため, テイラー展開の打ち切りが可能になることが期待できるからだ. 実際, 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:

$$df(\hat{v}) = \left[-\frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} a(\hat{v}) + \frac{1}{2} b^2(\hat{v}) \frac{d^2 f(\hat{v})}{d\hat{v}^2} \right] dt + b(\hat{v}) \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} \cdot d\hat{W}, \quad (3.29)$$

または

$$\frac{df(\hat{v})}{dt} = \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} \cdot \frac{d\hat{v}}{dt} + \frac{1}{2} b^2(\hat{v}) \frac{d^2 f(\hat{v})}{d\hat{v}^2}. \quad (3.30)$$

⁴メモ: 金澤が 2023 年に京都大学で授業した時 (講義名「統計力学特論」) は, 5 回目にここまで進んだ.

導出. 公式 (3.29) と (3.29) の導出は以下の通りである：まず式 (3.28) をウィーナー過程を用いて $d\hat{v} = -a(\hat{v})dt + b(\hat{v}) \cdot d\hat{W}$ と書き直す。すると、式 (3.22) は次の形に変形できる：

$$\begin{aligned} df(\hat{v}) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n f(\hat{v})}{d\hat{v}^n} \cdot \left(-a(\hat{v})dt + b(\hat{v}) \cdot d\hat{W} \right)^n \\ &= \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} \cdot (-a(\hat{v})dt + b(\hat{v}) \cdot d\hat{W}) + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n f(\hat{v})}{d\hat{v}^n} b^n(\hat{v}) \cdot (d\hat{W})^n. \end{aligned} \quad (3.31)$$

但し、 $dt d\hat{W} = 0$ を用いた。次に伊藤ルール (3.23) を用いることで公式 (3.29) と (3.30) が得られる。つまり、公式 (3.29) と (3.30) は平均値に対してのみ成立するのではなく、パスレベルで成立する。つまり、雑な見積もり方としては、

$$|d\hat{W}| = O(\sqrt{dt}), \quad \langle d\hat{W} \rangle = 0 \quad (3.32)$$

と置いてオーダー評価し、最終的に $O(dt)$ まで残せば、結果的に最終結果が合う。

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 (3.28) に対して導出しよう。SDE (3.28) 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：

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial v} a(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b^2(v) \right] P_t(v). \quad (3.33)$$

導出. 任意の滑らかな関数 $f(\hat{v})$ に対して伊藤の公式を適用すると

$$\left\langle \frac{df(\hat{v})}{dt} \right\rangle = \left\langle -\frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} a(\hat{v}) + \frac{1}{2} b^2(\hat{v}) \frac{d^2 f(\hat{v})}{d\hat{v}^2} \right\rangle + \left\langle \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} b(\hat{v}) \cdot \hat{\xi}^G \right\rangle. \quad (3.34)$$

が得られる。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、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} dv P_t(v) f(v) &= \int_{-\infty}^{\infty} dv P_t(v) \left[-\frac{df(v)}{dv} a(v) + \frac{1}{2} b^2(v) \frac{d^2 f(v)}{dv^2} \right] \\ \iff \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \frac{\partial}{\partial t} P(v, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \left[\frac{\partial}{\partial v} a(v) P_t(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b^2(v) P_t(v) \right]. \end{aligned} \quad (3.35)$$

を得る。但し、この計算過程で部分積分を用いた。ここで式 (3.35) 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 (3.33) が導出される。

3.5 フォッカー・プランク方程式と確率微分方程式の一対一対応

章 2.11 では、マルコフジャンプ過程に限って、マスター方程式と確率微分方程式の一対一対応関係を説明した。この章ではフォッカー・プランク方程式 (3.33) とガウス型確率微分方程式 (3.28) の一対一対応性を示す。

導出. まず初期条件として $P_t(v) = \delta(v - u)$ を取る (ここで u は任意の実数). つまり, 初期条件として $\hat{v}(t) = u$ を仮定する. この時の $P_{t+\Delta t}(v)$ を計算してみよう. 式 (3.33) の両辺を $[t, t + \Delta t]$ で積分すると,

$$\begin{aligned} P_{t+\Delta t}(v) &= P_t(v) + \Delta t \left[\frac{\partial}{\partial v} a(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b^2(v) \right] P_t(v) + O(\Delta t^2) \\ &= \delta(v - u) + \Delta t \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial v} a(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b^2(v) \right] \delta(v - u)}_{=\phi(v)} + O(\Delta t^2). \end{aligned} \quad (3.36)$$

ここで右辺は δ 関数のままだと意味がわからないため, 右辺を $\phi(v)$ と置きなおし, フーリエ変換を行ってみよう⁵. つまり,

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}(s) &:= \int_{-\infty}^{\infty} e^{isv} \phi(v) ds = e^{isu} + \Delta t \int_{-\infty}^{\infty} e^{isv} \left[\frac{\partial}{\partial v} a(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b^2(v) \right] \delta(v - u) dv \\ &= e^{isu} + \Delta t \int_{-\infty}^{\infty} \delta(v - u) \left[-a(v) \frac{\partial}{\partial v} e^{isv} + \frac{b^2(v)}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} e^{isv} \right] dv \\ &= e^{isu} \left[1 - \Delta t \left(isa(u) + \frac{s^2 b^2(u)}{2} \right) \right] \\ &= \exp \left[isu - \Delta t \left(isa(u) + \frac{s^2 b^2(u)}{2} \right) \right] + o(\Delta t) \end{aligned} \quad (3.37)$$

である. フーリエ逆変換を行うと

$$\begin{aligned} P_{t+\Delta t}(v) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-isv} \tilde{\phi}(s) ds + o(\Delta t) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[is(u - v) - \Delta t \left(isa(u) + \frac{s^2 b^2(u)}{2} \right) \right] ds + o(\Delta t) \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi b^2(u) \Delta t}} \exp \left[-\frac{(v - u + a(u) \Delta t)^2}{2b^2(u) \Delta t} \right] + o(\Delta t) \quad (3.39)$$

である. この確率分布が意味することは, $\hat{v}(t) = u$ を初期条件としたときの, 微小時間 Δt に対する動力学はパスレベルで

$$\hat{v}(t + \Delta t) = u - a(u) \Delta t + b(u) \hat{\eta} \sqrt{\Delta t}, \quad \hat{\eta} \sim P(\eta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\eta^2/2} \quad (3.40)$$

に従うことがわかる. これはガウス型確率微分方程式 (3.28) の離散時間バージョン (3.14) と等価であり, 連続時間極限 $\Delta t \rightarrow 0$ では式 (3.28) に一致する. 即ち, フォッカー・プランク方程式 (3.33) から元の確率微分方程式 (3.28) が復元できた.

3.6 経路積分表示 (オンサガー・マハループ関数)

ところで先ほどガウス型確率微分方程式 (3.28) に対して, 初期条件 $\hat{v}(t) = \delta(v - u)$ のもとでの微小時間 Δt 後の確率分布の時間発展を求めたが, この確率分布 $P_{t+\Delta t}(v)$ は時刻 t について条件付きを行った確率分布だと看做すことが出来る. 即ち,

$$P(\hat{v}(t + \Delta t) = v | \hat{v}(t) = u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi b^2(u) \Delta t}} \exp \left[-\frac{(v - u + a(u) \Delta t)^2}{2b^2(u) \Delta t} \right] \quad (3.41)$$

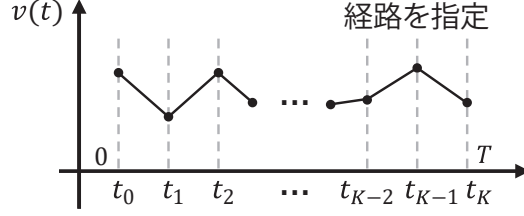


図 3.5: 経路積分の模式図. まず時間を離散化した状態で, $K + 1$ 点の異時刻 (t_K, \dots, t_0) における, 系の状態 $(\hat{v}_K, \dots, \hat{v}_0)$ を同時に指定する. これは系がどのようなパス (経路) を通るのかを指定していることになる. この経路確率密度 $P(v_K, \dots, v_0)$ を調べると, 式 (3.47) に従う. この連続極限を取ると, 経路確率密度汎関数が得られる. これは量子力学で現れる複素空間のファインマン経路積分の, 確率過程 (実空間) での対応物である.

である. この計算結果から, パスの確率密度汎関数を導出することが出来る.

まず, 離散時間 $t_i := i\Delta t$ を考え, 各時刻の状態を $\hat{v}_i := \hat{v}(t_i)$ と記述しよう. また, 最終時刻を $T = K\Delta t$ とする. 時刻 $[0, T]$ におけるパスは $\{\hat{v}_i\}_{i=0, \dots, K}$ で指定されるが, そのパスの確率密度関数は

$$P(\hat{v}_K = v_K, \dots, \hat{v}_0 = v_0) = P(v_K, \dots, v_0) \quad (3.42)$$

によって記述される. パスの確率密度関数は条件付き確率密度分布を使って分解できる. 具体的には

$$P(v_K, \dots, v_0) = P(v_K | v_{K-1}, \dots, v_0) P(v_{K-1}, \dots, v_0) \quad (3.43)$$

である. ここでガウス型確率過程はマルコフ過程なので,

$$P(v_K | v_{K-1}, \dots, v_0) = P(v_K | v_{K-1}) \quad (3.44)$$

が成立し,

$$P(v_K, \dots, v_0) = P(v_K | v_{K-1}) P(v_{K-1}, \dots, v_0) \quad (3.45)$$

である. 同様のマルコフ性を用いた関係式を何度も適用することで

$$P(v_K, \dots, v_0) = \prod_{k=0}^{K-1} P(v_{k+1} | v_k) P(v_0) = \prod_{k=0}^{K-1} \frac{1}{\sqrt{2\pi b^2(v_k) \Delta t}} \exp \left[-\frac{(v_{k+1} - v_k + a(v_k) \Delta t)^2}{2b^2(v_k) \Delta t} \right] P(v_0) \quad (3.46)$$

を得る. ここで, 初期時間 t_0 からの遷移確率密度 $P(v_K, \dots, v_1 | v_0) := P(v_K, \dots, v_0) / P(v_0)$ の部分に着目すると

$$P(v_K, \dots, v_1 | v_0) = \exp \left[-\sum_{k=0}^{K-1} \frac{\Delta t}{2b^2(v_k)} \left(\frac{\Delta v_k}{\Delta t} + a(v_k) \right)^2 \right] \left(\prod_{k=0}^{K-1} \frac{1}{\sqrt{2\pi b^2(v_k) \Delta t}} \right) \quad (3.47)$$

と書き直すことが出来る. 但し, $\Delta v_k := v_{k+1} - v_k$ である.

最後に連続極限 $K \rightarrow \infty, \Delta t \rightarrow 0$ を取ろう. この時, 形式的に

$$\sum_{k=0}^{K-1} \frac{\Delta t}{2b^2(v_k)} \left(\frac{\Delta v_k}{\Delta t} + a(v_k) \right)^2 = \int_0^T \frac{dt}{2b^2(v(t))} \left(\frac{dv(t)}{dt} + a(v(t)) \right)^2 \quad (3.48)$$

と書き直すことが出来る. この関数をオンサガー・マハループ (Onsager-Machlup) 関数という. また, 経路の関数 $A[\hat{v}]$ である物理量の, 全ての経路に関する期待値を取ると

⁵ δ 関数が生じてよくわからない時は, 積分操作を通して δ 関数を表面的に消すことがコツである.

$$\begin{aligned}
\langle A[\hat{v}]|\hat{v}(0) = v_0\rangle &:= \lim_{K \rightarrow \infty} \int dv_K \int dv_{K-1} \dots \int dv_1 A(v_K, \dots, v_0) P(v_K, \dots, v_1|v_0) \\
&= \int A[v] \exp \left[- \int_0^T \frac{dt}{2b^2(v(t))} \left(\frac{dv(t)}{dt} + a(v(t)) \right)^2 \right] \mathcal{D}[v(t)] \quad (3.49)
\end{aligned}$$

と書ける。但し，形式的に経路積分の微小体積要素 $\mathcal{D}[v(t)]$ を

$$\mathcal{D}[v(t)] := \prod_{k=0}^{K-1} \frac{dv_k}{\sqrt{2\pi b^2(v_k)\Delta t}} \quad (3.50)$$

と書いた。この式は，ガウス型確率過程のパス確率密度汎関数を用いた時の，期待値についての経路積分表示である。

但し，オンサガー・マハループ関数は，あくまで離散時間系からの形式的な連続表示だと考えた方が無難である。何故なら，連続で記述しようと結局どのような積から極限を取っているかを適切に考えなければ，正しく計算することが難しいからである。つまり，実際に計算する時は離散時間表示を意識して利用する必要がある。

第3章のまとめ

本章をまとめると次のようになる：

1. δ 関数に関わる微分方程式では、 δ 関数を他の関数に対してどういう【積】の取り方を指定するかに任意性がある。これは確率微分方程式 (SDE) だけではなく、常微分方程式でも同様である。SDE の場合は乗法的ノイズの場合にこの問題が自明に顕在化する。
2. 最も素朴な取り方は伊藤型であり、数値計算でいう前進オイラー型の離散化に対応する。
3. ウィーナー過程の微小変化分に対して、次の伊藤ルールが成立する。

$$(d\hat{W})^n = \begin{cases} dt & (n=2) \\ 0 & (n \geq 3) \end{cases}, \quad d\hat{W}dt = 0. \quad (3.51)$$

4. ガウスノイズに駆動される SDE について、綺麗な微分ルールが成立する。具体的には伊藤ルールを使い、テイラー展開の2階の項までを考えればよい (伊藤の公式)：

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{v}}{dt} &= -a(\hat{v}) + b(\hat{v}) \cdot \hat{\xi}^G \\ \Rightarrow df(\hat{v}) &= d\hat{v} \frac{\partial f(\hat{v})}{\partial \hat{v}} + \frac{1}{2} (d\hat{v})^2 \frac{\partial^2 f(\hat{v})}{\partial \hat{v}^2} + o(dt) \\ &= d\hat{v} \frac{\partial f(\hat{v})}{\partial \hat{v}} + \frac{1}{2} b^2(\hat{v}) dt \frac{\partial^2 f(\hat{v})}{\partial \hat{v}^2} + o(dt). \end{aligned} \quad (3.52)$$

5. 伊藤の公式を用いる事でフォッカー・プランク方程式を導出できる：

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial v} a(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b^2(v) \right] P_t(v). \quad (3.53)$$

6. ガウス型確率微分方程式では経路確率密度汎関数が求まり、オンサガー・マハループ関数を用いて形式的に書け、期待値を経路積分表示することが出来る：

$$\langle A[\hat{v}] | \hat{v}(0) = v_0 \rangle = \int A[v] \exp \left[- \int_0^T \frac{dt}{2b^2(v(t))} \left(\frac{dv(t)}{dt} + a(v(t)) \right)^2 \right] \mathcal{D}[v(t)]. \quad (3.54)$$

3.7 練習問題

3.7.1 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

$$df(\hat{W}) = \frac{df(\hat{W})}{d\hat{W}} d\hat{W} + \frac{1}{2} \frac{d^2f(\hat{W})}{d^2\hat{W}} dt \quad (3.55)$$

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

$$df(\hat{W}, t) = \frac{\partial f(\hat{W}, t)}{\partial \hat{W}} d\hat{W} + \frac{\partial f(\hat{W}, t)}{\partial t} dt + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(\hat{W}, t)}{\partial^2 \hat{W}} dt \quad (3.56)$$

であることを示せ.

3.7.2 幾何ブラウン運動

次の伊藤型の確率微分方程式を考える（伊藤積の記号“ \cdot ”は省略）：

$$d\hat{S} = \mu \hat{S} dt + \sigma \hat{S} d\hat{W}, \quad \hat{W}(0) = 0. \quad (3.57)$$

伊藤の公式 (3.56) 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：

$$\hat{S}(t) = S_0 \exp \left\{ \left(\mu - \frac{\sigma^2}{2} \right) t + \sigma \hat{W}(t) \right\}. \quad (3.58)$$

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：

$$\log S(t) = \log S_0 + \left(\mu - \frac{\sigma^2}{2} \right) t + \sigma \hat{W}(t). \quad (3.59)$$

Part II

確率過程の発展的数理 1

Chapter 4

標準形と形式論

ここまで、ポアソン過程をはじめとした各種ノイズの発見論的構成、更にはガウスノイズに対する伊藤の公式を学んできた。この章ではここまでの内容を形式的にまとめて整理していく。特にマスター方程式、並びに確率微分方程式を「標準形」という観点から整理することで、確率過程全体を見通すことが出来る体系的な枠組みを提供する¹。

4.1 1変数マルコフ過程におけるマスター方程式の標準形

今、初期条件 $\hat{v}(t') = u$ のもとで、1変数系 $\hat{v}(t)$ の確率的動力学を考えることにする ($t \geq t'$ を仮定)。この変数が連続時間のマルコフ過程に従う時、条件付き確率密度関数 $p(v, t|u, t') = P(\hat{v}(t) = v | \hat{v}(t') = u)$ は次のマスター方程式に従う：

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(v, t|u, t')}{\partial t} = & \left[\frac{\partial}{\partial v} a_t(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b_t^2(v) \right] p(v, t|u, t') \\ & + \int dy \left[\lambda_t(y|v-y) p(v-y, t|u, t') - \lambda_t(y|v) p(v, t|u, t') \right] \end{aligned} \quad (4.1)$$

但し、 $a_t(\hat{v})$ と $b_t(\hat{v})$ は任意の関数、 $\lambda_t(y|\hat{v})$ は非負関数である。1行目は移流拡散項であり、経路が連続（ジャンプがない）となる時間発展の寄与を表し、2行目は経路が不連続（ジャンプがある）になる時間発展の寄与を表す。但し、 $\int dy \dots$ は主値積分を表す。主値積分は後に定義されるが、初学者はその詳細をあまり気にしなくても良い。

今までのマスター方程式では、初期条件 $\hat{v}(t') = u$ についての条件付けを明記していなかった。つまり、マスター方程式は任意の初期条件に対して同一の形を取ることを暗に仮定して議論していたわけだが、本章では、特定の任意の初期条件から出発して同一のマスター方程式が成立することを明示的に書くことにする²。何故なら、マスター方程式の標準形がマルコフ過程の数学的仮定から導出されることを示すことが目標だからだ。

式 (4.1) には様々な名前が付いている。微分型チャップマン・コルモゴロフ方程式 (the differential Chapman-Kolmogorov equation) と呼ぶこともあるし [5]、コルモゴロフの前進方程式 (Kolmogorov's forward equation) と呼ぶこともある。特に確立した呼び方はないが、本書ではマスター方程式の標

¹ 「標準形」という用語は文献内でも合意が取れている単語ではないため、金澤が勝手にそう読んでいるだけである。ただ、専門家ならわざわざ名前を付けなくても知っている事実であり、教育的には名前を付けた方が読者の記憶に残りやすいと金澤は思うので、この本ではこう呼ぶ。

² 初期条件 $\hat{v}(t') = u$ (u は任意の実数) に対してマスター方程式 (4.1) が成立する場合、初期値 u が分布に従う場合も同様の式が成立することは自明である。何故ならマスター方程式 (4.1) の両辺に、 $P(u)$ をかけて積分すれば、初期値 u が任意の分布を取る場合でも成立することが分かるからだ。

準形と呼ぶことにする．何故なら1変数マルコフ過程に関しては緩い条件の下でこの形のマスター方程式が導出できるからだ³．

主値積分について

ここは技術的な補足であるため，初読では飛ばしても構わない．今までの章では明記しなかったが，マスター方程式 (4.1) に現れる積分項については，厳密に言うと主値積分として解釈する．具体的には，

$$\int dy(\dots) := \lim_{\varepsilon_+, \varepsilon_- \rightarrow +0} \int_A dy(\dots), \quad A := (-\infty, -\varepsilon_-) \cup (\varepsilon_+, \infty) \quad (4.2)$$

である．但し， ε_- は ε_+ の関数だとする．総強度が有限の時 $\lambda_{\text{tot};t}(v) := \int_{-\infty}^{\infty} \lambda_t(y|v)dy < \infty$ は特に主値積分について気にしなくても良いため，この問題については初学者はあまり深入りしなくて良い．この主値積分には多義性があり，最も単純な選び方は y について対称な物である ($\varepsilon_+ = \varepsilon_- = \varepsilon$) :

$$\int dy(\dots) := \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \int_{|y| > \varepsilon} dy(\dots) \quad (4.3)$$

簡単のため，この節ではまず対称な主値積分の定義を採用することにする．但し，非対称な主値積分を選択することが適切なノイズも存在するため，ノイズに応じて適切に主値積分を選択する必要がある．そういった特殊ケースについて興味がある読者は章 4.3 や，文献 [5] の第 10 章を読むこと．

4.1.1 結合確率分布を用いたマルコフ過程の定義

まずマスター方程式の標準形を導出するための準備を行う．そのために，「マルコフ過程」という単語を異時刻における結合確率分布 (joint-probability distribution) の単語で定義しよう．今 1 次元の確率過程 (確率変数は $\hat{v}(t)$) を考える．次に K 点での異時刻を $t_K > t_{K-1} > \dots > t_2 > t_1 \geq 0$ と設定する．これらの時刻に対する結合確率は

$$P(\hat{v}(t_K) = v_K, \dots, \hat{v}(t_2) = v_2, \hat{v}(t_1) = v_1) = P(v_K, \dots, v_2, v_1) \quad (4.4)$$

と書くことが出来る (但し， v_1, v_2, \dots, v_K は実数であり， K は正の整数)．また異時刻間の条件付き確率分布として次の量を考えることもできる (但し， L は非負整数)

$$P(v_K, \dots, v_L | v_{L-1}, v_{L-2}, \dots, v_1) := \frac{P(v_K, \dots, v_1)}{P(v_{L-1}, v_{L-2}, \dots, v_1)}. \quad (4.5)$$

この結合確率分布の言葉を用いると，マルコフ過程とは次のように言い換えられる：

定義 4.1.1 (マルコフ過程) マルコフ過程とは，任意の $t_K > t_{K-1} > \dots > t_1 \geq 0$ に対して次の等式が成り立つ事を指す：

$$P(v_K, v_{K-1}, \dots, v_L | v_{L-1}, v_{L-2}, \dots, v_1) = P(v_K, v_{K-1}, \dots, v_L | v_{L-1}). \quad (4.6)$$

つまり，過去の情報が将来の確率分布に全く影響を与えないことを意味する．今までマルコフ過程を直観的に定義して来たが，より形式的に整備された定義はこれである．では，ここからマルコフ過程の定義から出発して，マスター方程式の標準形を緩い仮定の下で導いていく．そのためにまず，チャップマン・コルモゴロフ方程式を紹介しよう．

³この導出は Gardiner の教科書 [5] をベースとしつつ，1 変数系に限って深掘りし，より発見論的な構成方法に変更した．多変数系などについてより理解を深めたい読者は Gardiner の教科書の第 3 章を読むこと．

4.1.2 チャップマン・コルモゴロフ方程式

結合確率密度関数について次の恒等式が成立する：

$$P(v_3|v_1) = \int_{-\infty}^{\infty} P(v_3, v_2|v_1)dv_2 = \int_{-\infty}^{\infty} P(v_3|v_2, v_1)P(v_2|v_1)dv_2 \quad (4.7)$$

この等式は任意の確率過程（マルコフ過程である必要もない）について成立し，2時刻間の遷移確率 $P(v_2|v_1)$ を構築する上で，3時刻間の遷移確率 $P(v_3|v_2, v_1)$ が一般に必要なことを意味している。しかし，マルコフ過程に限ると次の等式が成立する：

$$P(v_3|v_1) = \int_{-\infty}^{\infty} P(v_3|v_2)P(v_2|v_1)dv_2 \quad (4.8)$$

つまり，2時刻間の遷移確率が決まれば，それを用いて別の2時刻遷移確率が決まるという事を述べている。この式をチャップマン・コルモゴロフ方程式という。

そこで $t_2 = t + \Delta t$, $t_1 = t$ に取ることで，微小時間変化 Δt に対する遷移確率

$$p(v, t + \Delta t|u, t) := P(v_2(t + \Delta t) = v|v_1(t) = u) \quad (4.9)$$

の性質を考えて行く。自明な関係式として

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} p(v, t + \Delta t|u, t) = \delta(v - u) \quad (4.10)$$

であることに注意。

4.1.3 パスの連続性

今からマスター方程式の標準形を導出して行く。そして，導出するにあたっていくつかの緩い仮定を導入する。しかし，この教科書では必要な仮定を天下一的に与えるのではなく，まずは発見論的に必要な仮定について考察していくことにする。

そこでまずはパスの連続性を定義する。何故ならパスの連続性を理解することが，マスター方程式の標準形の導出に当たっての仮定を理解する上で重要だからである。

マスター方程式の標準形は3つの部分に分けられる：移流項，拡散項，ジャンプ項である。ここで重要な事は，移流項と拡散項はパスに対して連続性を保つ影響しか与えないのに対し，ジャンプ項はパスに不連続な影響を与える事である。具体例を通じて理解して行こう。

例 4.1.1 (複合ポアソンノイズに駆動される SDE でのパスの不連続性) 例えば，複合ポアソンノイズ $\hat{\xi}_{\lambda(y)}^{\text{CP}}$ に駆動される SDE として，

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = \hat{\xi}_{\lambda(y)}^{\text{CP}} \quad (4.11)$$

を考えよう。この SDE ではジャンプが一定強度 $\lambda_{\text{tot}} := \int_{-\infty}^{\infty} \lambda(y)dy$ で発生しうするため，

$$\int_{|v-u|>\varepsilon} p(v, t + \Delta t|z, t)dv \approx \lambda_{\text{tot}}\Delta t \quad (4.12)$$

となる。但し $\varepsilon > 0$ は任意の微小定数である。この関係式を逆算すると，少し離れた場所 $|x - z| > \varepsilon$ に状態が遷移する強度 λ_{tot} が非ゼロであることが，ジャンプ過程の特徴である：

$$\lambda_{\text{tot}} \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{|v-u|>\varepsilon} p(v, t + \Delta t|u, t)dv \neq 0. \quad (4.13)$$

例 4.1.2 (定数ドリフト付きウィーナー過程でのパスの連続性) 次にガウスノイズに駆動される SDE として次のモデルを考えよう：

$$\frac{dv}{dt} = -a + \sigma \hat{\xi}^G \quad (4.14)$$

但し、 a と $\sigma > 0$ は定数である。このモデルにおいて、微小時間遷移確率密度は

$$p(v, t + \Delta t | u, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2\Delta t}} \exp\left[-\frac{(v - u + a\Delta t)^2}{2\sigma^2\Delta t}\right] \quad (4.15)$$

で与えられる。この系では少し離れた場所 $|v - u| > \varepsilon, \varepsilon > 0$ に状態遷移する強度 λ_{tot} はゼロである：

$$\lambda_{\text{tot}} := \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|v-u|>\varepsilon} p(v, t + \Delta t | u, t) dv = 0. \quad (4.16)$$

ところで、移流項 a と拡散項 σ^2 は $p(v, t + \Delta t | u, t)$ を用いて、

$$a = - \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|v-u|\leq\varepsilon} (v - u) p(v, t + \Delta t | u, t) dv + O(\varepsilon) \quad (4.17)$$

$$\sigma^2 = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|v-u|\leq\varepsilon} (v - u)^2 p(v, t + \Delta t | u, t) dv + O(\varepsilon) \quad (4.18)$$

と書き直すことが出来ることに注意。

発見論的に遷移確率密度と移流・拡散・ジャンプ項の関係を理解

上記の 2 例を踏まえると、次の量が重要であることがわかる：

$$\lambda_{t,\Delta t}(y|u) := \frac{1}{\Delta t} p(u + y, t + \Delta t | u, t) \quad (4.19)$$

実際、上の例からは任意の ε に対して、マスター方程式の標準形 (4.1) での

$$a_t(v) = - \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{|y|\geq\varepsilon} y \lambda_{t,\Delta t}(y|v) dy + O(\varepsilon) \quad (1 \text{ 次のモーメント})$$

$$b_t^2(v) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{|y|\geq\varepsilon} y^2 \lambda_{t,\Delta t}(y|v) dy + O(\varepsilon) \quad (2 \text{ 次のモーメント})$$

$$\lambda_t(y|v) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \lambda_{t,\Delta t}(y|v) \quad (|y| > \varepsilon) \quad (4.20)$$

に対応することが予想されるだろう。

パスの連続性

以上を踏まえて、パスの連続性は次のように定義することが出来る：

定義 4.1.2 (パスが連続なマルコフ過程) マルコフ過程が連続であるとは、任意の $\varepsilon > 0$ に対して

$$\lambda_{\text{tot};t}(u; \varepsilon) := \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{|y|>\varepsilon} \lambda_{t,\Delta t}(y|u) dy = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|x-z|>\varepsilon} p(v, t + \Delta t | u, t) dv = 0 \quad (4.21)$$

が成立することを指す。但し、

$$\lambda_{t,\Delta t}(y|u) := \frac{1}{\Delta t} p(u + y, t + \Delta t | u, t) \quad (4.22)$$

この条件はリンドバーグ条件 (Lindeberg condition) とも呼ばれる。

つまり、少し離れた場所 $|u - v| > \varepsilon, \varepsilon > 0$ に Δt 後に遷移する総強度 $\lambda_{\text{tot};t}$ がゼロであることを意味する。ポアソンノイズに駆動されるジャンプ過程ではパスの連続性は当然満たされないが、ガウスノイズに駆動される確率過程では本条件が満たされており、直観的に妥当な定義になっている。

4.1.4 導出の仮定

移流項・拡散項・強度密度関数の存在

以上の発見論的な考察を踏まえ、以下の仮定を導入する。

仮定 4.1.1 (マスター方程式の標準形に必要な仮定 1) 任意の $\varepsilon > 0$ に対して次を仮定する：

1. $|y| > \varepsilon$ を満たす任意の y, v に対して、次の量（強度密度関数）が一様収束する：

$$\lambda_t(y|v) := \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \lambda_{t, \Delta t}(y|v). \quad (4.23)$$

2. ドリフト項に対応する量が収束する：

$$a_t(v) := - \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{|y| \leq \varepsilon} y \lambda_{t, \Delta t}(y|v) dy + O(\varepsilon). \quad (4.24)$$

3. 拡散項に対応する量が収束する：

$$b_t^2(v) := \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{|y| \leq \varepsilon} y^2 \lambda_{t, \Delta t}(y|v) dy + O(\varepsilon). \quad (4.25)$$

これらは、マスター方程式の構成物である $a_t(v)$, $b_t(v)$, $\lambda_t(y|v)$ が定義できるという条件である⁴。

強度密度関数が正常であることの要請

ここは技術的な項目であるため、初学者は読み飛ばしても構わない。強度密度関数 $\lambda_t(y|v)$ について次の条件を課す：

仮定 4.1.2 (マスター方程式の標準形に必要な仮定 2) 総強度 $\lambda_{\text{tot};t}(v) := \int_{-\infty}^{\infty} \lambda_t(y|v) dy$ は発散していても良いが、あまり特異性が強すぎないと仮定する。具体的には、次の量

$$\int_{-\infty}^{\infty} \lambda_t(y|v) \min\{1, y^2\} < \infty \quad (4.28a)$$

が任意の v で成立すると仮定する。

⁴ところで、ここでは1次のモーメント $a_t(v)$ と2次のモーメント $b_t^2(v)$ が存在することを仮定したが、これらを仮定すると高次のモーメントは存在しないことを示すことが出来る。実際、3次以上のモーメントを定義しても、

$$M_t^{(n)}(v) := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{|y| \leq \varepsilon} y^n \lambda_{t, \Delta t}(y|v) dy = 0 \quad (\text{但し, } n \geq 3) \quad (4.26)$$

である。証明は容易であり、例えば $n = 3$ を考えると、次のようになる：

$$\left| \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{|y| \leq \varepsilon} y^3 \lambda_{t, \Delta t}(y|v) dy \right| \leq \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{|y| \leq \varepsilon} |y^3| \lambda_{t, \Delta t}(y|v) dy \leq \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{|y| \leq \varepsilon} \varepsilon |y^2| \lambda_{t, \Delta t}(y|v) dy = \varepsilon b_t^2(v) + O(\varepsilon). \quad (4.27)$$

仮定 (4.28) はレヴィ過程の特性関数 (章 4.3.1) の収束条件から来る。まず, $\lambda_t(y|v)$ は $y \rightarrow \infty$ である程度速く減衰しなければならない。例えばべき減衰を仮定した時,

$$\lambda_t(y|v) \propto y^{-\alpha_\infty-1}, \quad \alpha_\infty > 0. \quad (4.29)$$

を意味する。また, $y \rightarrow 0$ において特異点があっても良いが, それは例えばべき型の特異点を仮定するときは次の条件を充たす必要がある:

$$\lambda_t(y|v) \propto y^{-\alpha_0-1}, \quad \alpha_0 < 2. \quad (4.30)$$

総強度 $\lambda_{\text{tot};t}(v)$ は普通の物理的設定であれば有限だと思ってしまう構わないため, この部分は初学者は気にしなくても良い。興味がある読者は章 4.3.3 を読んでから改めて考えても良い。

4.1.5 導出

準備が済んだので, $t \geq t'$ を充たす時の遷移確率 $p(v, t|u, t')$ がマスター方程式の標準形 (4.1) を充たすことを示す。

チャップマン・コルモゴロフ方程式の適用

まず今までの手順通り, 任意の関数 $f(\hat{v})$ について, $\langle df(\hat{v})/dt \rangle$ を計算しよう。つまり,

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int dv f(v) p(v, t|u, t') \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int dv f(v) [p(v, t + \Delta t|u, t') - p(v, t|u, t')] \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left\{ \int dv \int dz f(v) p(v, t + \Delta t|z, t) p(z, t|u, t') - \int dv f(v) p(v, t|u, t') \right\} \end{aligned} \quad (4.31)$$

である。但し, チャップマン・コルモゴロフ方程式 (4.8) を用いた。この式がマルコフ過程であることを明示的に使った計算の出発点である。

式 (4.31) の第 1 項において, ダミー変数は入れ替えても良い ($v \rightarrow z, z \rightarrow v$) ので,

$$\frac{1}{\Delta t} \int dv \int dz f(v) p(v, t + \Delta t|z, t) p(z, t|u, t') = \frac{1}{\Delta t} \int dz \int dv f(z) p(z, t + \Delta t|v, t) p(v, t|u, t') \quad (4.32)$$

である。更に変数変換 $z = v + y$ を行って, ジャンプ幅 y についての積分に書き直すと,

$$\begin{aligned} (\text{右辺}) &= \frac{1}{\Delta t} \int dy \int dv f(v + y) p(v + y, t + \Delta t|v, t) p(v, t|u, t') \\ &= \int dy \int dv f(v + y) \lambda_{t, \Delta t}(y|v) p(v, t|u, t') \end{aligned} \quad (4.33)$$

である。但し, 有限時間 Δt での強度密度関数の定義式 $\lambda_{t, \Delta t}(y|v)$ を用いて式を更には書き直した。

式 (4.31) の第 2 項において, 積分して 1 になるような無意味な変数 y の積分 ($\int dy p(v + y, t + \Delta t|v, t) = 1$) を導入しても構わない。

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \int dv f(v) p(v, t|u, t') &= \frac{1}{\Delta t} \int dv \int dy f(v) p(v + y, t + \Delta t|v, t) p(v, t|u, t') \\ &= \int dv \int dy f(v) \lambda_{t, \Delta t}(y|v) p(v, t|u, t') \end{aligned} \quad (4.34)$$

よって, まとめると式 (4.31) は

$$\left\langle \frac{df(\hat{v})}{dt} \right\rangle = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int dv \int dy \{f(v + y) - f(v)\} \lambda_{t, \Delta t}(y|v) p(v, t|u, t') \quad (4.35)$$

変形できる。この式の意味することは, 直観的にもそのまま理解できるだろう。

連続性の定義を踏まえて積分範囲を分割

ここで、連続性の定義を踏まえて、ジャンプがない部分とジャンプがある部分に分解することを考える。具体的には、

$$\left\langle \frac{df(\hat{v})}{dt} \right\rangle = \int dv f(v) (\mathcal{L}_C + \mathcal{L}_J) P_t(v) \quad (4.36)$$

と分解できることを想定した時 (\mathcal{L}_C はジャンプがない移流拡散項, \mathcal{L}_J はジャンプ項), それぞれは式 (4.35) における積分範囲の分割

$$\int dy(\dots) = \int \int_{|y| \leq \varepsilon} dy(\dots) + \int \int_{|y| > \varepsilon} dy(\dots) \quad (4.37)$$

から生じることを想定して、以下計算を遂行する。但し、 $\varepsilon > 0$ は微小な正の実数である。

積分範囲 $|y| \leq \varepsilon$ (連続部分)

まずは連続部分に対応すると予想される微小積分範囲 $|y| \leq \varepsilon$ の寄与を見積もろう。そのためには、 ε が微小であることを用いて、テイラーの定理を用いれば良いだろう。つまり、

$$f(v+y) = f(v) + y \frac{df(v)}{dv} + \frac{y^2}{2} \frac{d^2 f(v)}{dv^2} + y^2 R(v, y). \quad (4.38)$$

但し、余剰項 $R(v, y)$ は $\lim_{|y| \rightarrow 0} |R(v, y)| \rightarrow 0$ を満たす。よって、

$$\begin{aligned} & \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int dv \int_{|y| \leq \varepsilon} dy \{f(v+y) - f(v)\} \lambda_{t, \Delta t}(y|v) p(v, t|u, t') \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int dv \int_{|y| \leq \varepsilon} dy \left\{ y \frac{df(v)}{dv} + \frac{y^2}{2} \frac{d^2 f(v)}{dv^2} + y^2 R(v, y) \right\} \lambda_{t, \Delta t}(y|v) p(v, t|u, t') \\ &= \int dv f(v) \left[\frac{\partial}{\partial v} a_t(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b_t^2(v) \right] p(v, t|u, t') + O(\varepsilon) \end{aligned} \quad (4.39)$$

である。但し、部分積分を用い、また、余剰項を無視した⁵。

積分範囲 $|y| > \varepsilon$ (不連続部分)

$$\begin{aligned} & \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int dv \int_{|y| > \varepsilon} dy \{f(v+y) - f(v)\} \lambda_{t, \Delta t}(y|v) p(v, t|u, t') \\ &= \int dv \int_{|y| > \varepsilon} dy \{f(v+y) - f(v)\} \lambda_t(y|v) p(v, t|u, t') \\ &= \int dv \int_{|y| > \varepsilon} dy f(v) [\lambda_t(y|v-y) p(v-y, t|u, t') - \lambda_t(y|v) p(v, t|u, t')]. \end{aligned} \quad (4.41)$$

まとめ

以上の結果をまとめると、 $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限では

$$\begin{aligned} \int f(v) \frac{\partial p(v, t|u, t')}{\partial t} dv &= \int dv f(v) \left\{ \left[\frac{\partial}{\partial v} a_t(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b_t^2(v) \right] p(v, t|u, t') \right. \\ &\quad \left. + \int dy [\lambda_t(y|v-y) p(v-y, t|u, t') - \lambda_t(y|v) p(v, t|u, t')] \right\} \end{aligned} \quad (4.42)$$

⁵余剰項は次のように見積もることで、無視できるとわかる：

$$\begin{aligned} \left| \int dv \int_{|y| \leq \varepsilon} y^2 \lambda_{t, \Delta t}(y|v) p(v, t|u, t') R(v, y) dy \right| &\leq \left| \int dv \int_{|y| \leq \varepsilon} y^2 \lambda_{t, \Delta t}(y|v) p(v, t|u, t') dy \right| \max_{|y| \leq \varepsilon} |R(v, y)| \\ &\rightarrow [b_t^2(v) + O(\varepsilon)] \max_{|y| \leq \varepsilon} |R(v, y)|. \end{aligned} \quad (4.40)$$

を得る。よって、チャップマン・コルモゴロフ方程式の微分系として、マスター方程式の標準形 (4.1) を得る。

4.1.6 標準形の枠に入らないマスター方程式は作れないのか？

マスター方程式の標準形を学んだとき、次のような疑問は出て来ないだろうか？

この枠に入らない方程式は本当に作れないのだろうか？

この問に対する回答は簡単であり、

$P_t(v)$ が確率であることを踏まえると作れない。無理に作ると、時間が経つと負の確率が現れたり、確率の和が1を超えたりする。つまり、確率論の構造が破壊されてしまう

ということである。以下、具体例を見てみよう。

具体例 1：負の確率

たとえば、次の様な偏微分方程式を考えてみよう。

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \left[\frac{\partial^2}{\partial v^2} - \frac{\partial^4}{\partial v^4} \right] P_t(v). \quad (4.43)$$

但し、初期条件を $P_0(v) = \delta(v)$ と仮定する。この方程式は連続の式（確率の保存則）を充たしている：

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial v} J_t(v), \quad J_t(v) := -\left[\frac{\partial}{\partial v} - \frac{\partial^3}{\partial v^3} \right] P_t(v) \quad (4.44)$$

よって、「確率」は保存する： $(d/dt) \int_{-\infty}^{\infty} P_t(v) = 0$ 。しかし、マスター方程式の標準形の枠外にあるため、 $P_t(v)$ の非負性 ($P_t(v) \geq 0$) が充たされない。実際、解は

$$P_t(v) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-(k^2+k^4)t} \cos(kv) \quad (4.45)$$

だが、数値的に評価すると $P_{t=1}(v=5) = -0.037... < 0$ である。

具体例 2：確率の非保存

次のような例題も考えてみよう：

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \left[-\frac{1}{\tau} + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] P_t(v). \quad (4.46)$$

この式は連続の式（確率の保存則）を充たしていない。実際、初期条件を $P_0(v) = \delta(v)$ と仮定すると、

$$P_t(v) = \frac{1}{\sqrt{2\sigma^2\pi t}} e^{-\frac{t}{\tau} - \frac{v^2}{2\sigma^2 t}} \quad (4.47)$$

であり、確率は保存しない：

$$\int_{-\infty}^{\infty} P_t(v) dv = e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (4.48)$$

つまり、式 (4.46) において、連続の式を壊している右辺第1項は、確率の流出を表している。

パウラの定理

この様に、マスター方程式には充たすべき数学的性質があり、自由に係数を設定することは出来ない。あくまで、標準形の範囲内で $a(v)$, $b(v)$, $\lambda(y|v) \geq 0$ を自由に動かすことになる。では、これらを弄ることでのどの程度自由にモデルを設定できるのだろうか？

この間に端的に解答できる定理としてパウラの定理 (Pawula's theorem) がある。この定理はクラマース・モヤル展開による表示の制限が明白化する。マスター方程式を展開してみよう：

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial v} a_t(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b_t^2(v) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial v^n} \alpha_{n;t}(v) \right] P_t(v), \quad \alpha_{n;t}(v) := \int y^n \lambda_t(y|v) dy. \quad (4.49)$$

パウラ定理の主張は次のようになる。以下、本質的ではないため、引数の t と v は省略する。

定理 4.1.1 (パウラの定理) クラマース・モヤル展開が途中で厳密に打ち切る事ができる場合、展開は2次までで必ず止まる。つまり、もし特定の $k \geq 1$ で $\alpha_{2k} = 0$ ならば、 $l \geq 3$ を充たす全ての l について $\alpha_l = 0$ 。

証明は付録 A.2 を参照せよ⁶。

4.2 1 変数確率微分方程式の標準形

マスター方程式の標準形 (4.1) に対応する確率微分方程式は

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a_t(\hat{v}) + b_t(\hat{v}) \cdot \hat{\xi}^G + \hat{\xi}_{\lambda_t(y|\hat{v})}^{\text{CP}}. \quad (4.50)$$

である。この式を本書では、**1 変数確率微分方程式の標準形**と呼ぶことにする。

4.2.1 導出

確率微分方程式 (4.50) のマスター方程式が式 (4.1) に一致することを示そう。今簡単のため、総強度は有限だと仮定する： $\lambda_{\text{tot};t}(\hat{v}) := \int_{-\infty}^{\infty} \lambda_t(y|\hat{v}) dy < \infty$ 。任意の滑らかな関数 $f(\hat{v})$ に対して、その時間発展 $df(\hat{v}) := f(\hat{v}(t+dt)) - f(\hat{v}(t))$ は

$$df(\hat{v}) = \begin{cases} \left[-a_t(\hat{v}) \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} + \frac{1}{2} b_t^2(\hat{v}) \frac{d^2 f}{d\hat{v}^2} \right] dt + b_t(\hat{v}) \frac{df(\hat{v})}{d\hat{v}} \cdot d\hat{W} & (\text{ジャンプ無：確率} = 1 - \lambda_{\text{tot};t}(\hat{v})dt) \\ f(\hat{v} + \hat{y}) - f(\hat{v}) & (\hat{y} \in [y, y + dy) : \text{確率} = \lambda_t(y|\hat{v}) dy dt) \end{cases} \quad (4.51)$$

に従う。但し、ジャンプがない場合については伊藤の公式を用いた。両辺の期待値を取ると

$$\langle df(\hat{v}) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dv P_t(v) \left[-a_t(v) \frac{df}{dv} + \frac{b_t^2(v)}{2} \frac{d^2 f}{dv^2} + \int_{-\infty}^{\infty} dy \lambda_t(y|v) \{f(v+y) - f(v)\} \right] dt + o(dt) \quad (4.52)$$

ここで部分積分を使うと

$$\int_{-\infty}^{\infty} dv P_t(v) \left[-a_t(v) \frac{df}{dv} + \frac{b_t^2(v)}{2} \frac{d^2 f}{dv^2} \right] = \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \left[\frac{\partial}{\partial v} a_t(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b_t^2(v) \right] P_t(v) \quad (4.53)$$

であり、また変数変換 $v \rightarrow v - y$ を行うと

$$\int_{-\infty}^{\infty} dv \int_{-\infty}^{\infty} dy P_t(v) \lambda_t(y|v) f(v+y) = \int_{-\infty}^{\infty} dv \int_{-\infty}^{\infty} dy f(v) \lambda_t(y|v-y) P_t(v-y) \quad (4.54)$$

⁶メモ：金澤が2023年に京都大学で授業した時（講義名「統計力学特論」）は、6回目にここまで進んだ。

が成立する。よって、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dv \frac{\partial P_t(v)}{\partial t} f(v) = \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \left\{ \left[\frac{\partial}{\partial v} a_t(v) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} b_t^2(v) \right] P_t(v) + \int_{-\infty}^{\infty} dy [\lambda_t(y|v-y)P_t(v-y) - \lambda_t(y|v)P_t(v)] \right\} \quad (4.55)$$

が成立する。ここで $f(v)$ は任意なので、 $f(v) = \delta(v-u)$ を代入すると

$$\frac{\partial P_t(u)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial u} a_t(u) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial u^2} b_t^2(u) \right] P_t(u) + \int_{-\infty}^{\infty} dy [\lambda_t(y|u-y)P_t(u-y) - \lambda_t(y|u)P_t(u)] \quad (4.56)$$

である。但し、 u は任意の実数。ここでダミー変数である u を v に置きなおすと、式 (4.1) を得る。

4.2.2 標準形の枠に入らない確率微分方程式は作れないのか？

では、この標準形の枠の外の確率微分方程式は作れないのだろうか？もちろん、非マルコフ過程なら例外はあるかもしれない。しかし、一見マルコフ過程に見える標準形の枠外のモデルとして、例えば、

$$\hat{v}_{i+1} - \hat{v}_i = \hat{\eta}_i \Delta t, \quad \hat{\eta}_i \text{ は非ガウス乱数} \quad (4.57)$$

という確率過程の連続極限を考えたくならないだろうか？これはもし $\hat{\eta}_i$ が独立同分布に従って生成される場合、マルコフ過程になるだろうし、 $\hat{\eta}_i$ が非ガウス乱数なら、標準形 (4.50) の枠外のモデルに一見思えるかもしれない。

この疑問に対する答えは次のようになる：このモデルに対して時間連続極限を取ると、結局標準形 (4.50) の内側に入ってしまう。例えば非ガウス乱数の統計として

$$\hat{\eta}_i \sim P(\eta_i) \propto e^{-\eta_i^4 / \Delta t^\alpha}, \quad \alpha \in \mathbf{R} \quad (4.58)$$

だと仮定する。ここでホワイトノイズの性質として連続極限で $\langle \hat{\eta}(t) \hat{\eta}(t') \rangle \propto \delta(t-t')$ になるので、スケーリングとしては

$$\langle \hat{\eta}_i \hat{\eta}_j \rangle \propto \frac{1}{\Delta t} \delta_{i,j} \quad (4.59)$$

となるべきだろう。つまり、 $\alpha = 2$ である必要がある。この時、 $\Delta W_i := \hat{\eta}_i \Delta t$ については

$$\langle \Delta W_i^2 \rangle_c \propto \Delta t, \quad \langle \Delta W_i^4 \rangle_c = o(\Delta t) \quad (4.60)$$

が成り立つ。つまり、2次キュムラントは有効だが、4次のキュムラントが $\Delta t \rightarrow 0$ 極限では無視できるため、 ΔW は連続極限でウィーナー過程に収束する。つまり、 $\hat{\eta}_i$ は一見非ガウス乱数でも、連続極限ではガウスノイズと同じ役割を果たすことになる。

この性質は数値計算を実際に行っても確認することが出来る。つまり、 $\hat{\eta}_i$ を非ガウス乱数で生成して数値計算を行っても、 $\Delta t \rightarrow 0$ の極限ではガウスノイズを仮定した確率微分方程式の数値計算と一致する。この普遍性は中心極限定理から来していると解釈できる。

このように、時間に関する連続極限ではモデルに自由度の強い制限が加わり、標準形 (4.50) を外れたモデリングをマルコフ過程の範囲では行うことが出来ない。このことを念頭に確率過程のモデリングを行う必要がある。

例 4.2.1 (指数型非ガウス乱数の極限) 別の例として、両側指数乱数を用いた離散確率過程のモデルを考えよう：

$$\hat{v}_{i+1} - \hat{v}_i = -\hat{v}_i \Delta t + \hat{\eta}_i \sqrt{\Delta t}, \quad \hat{\eta}_i \sim P(\eta_i) = \frac{1}{2} e^{-|\eta_i|} \quad (4.61)$$

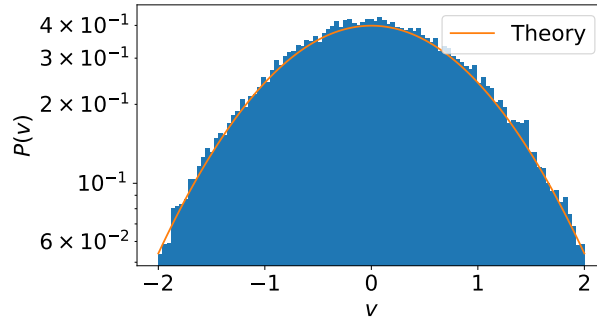


図 4.1: 離散時間の確率差分方程式 (4.61) に基づいて数値計算を行った. その結果として得られた $P_{ss}(v)$ のヒストグラムと, 連続時間ガウス型確率過程 (4.63) の理論解 (4.64) を比較した. 結果, 連続時間ガウス型モデルと一致した.

```

1 def path_gen(seed):
2     ts = np.linspace(0,3000.0,10000)
3     vs, v, dt = [], 1.0, ts[1]-ts[0]
4     np.random.seed(seed)
5     dt_sqrt = np.sqrt(dt)
6     for t in ts:
7         vs.append(v)
8         sign = +1.0 if np.random.rand() <= 0.5 else -1.0
9         v += -v*dt + dt_sqrt*sign*np.random.exponential()
10    return vs, ts
11 vs, ts = path_gen(5)
12 plt.yscale("log")
13 x = np.linspace(-2.0,2.0,100)
14 plt.hist(x=vs,bins=x,density=True)
15 plt.plot(x,np.exp(-x*x/2)/(2*3.14)**0.5)

```

コード 4.1: 離散時間の確率差分方程式 (4.61) の数値計算コード.

この時, $\Delta W_i := \hat{\eta}_i \sqrt{\Delta t}$ は

$$\langle \Delta W_i^2 \rangle \propto 2\Delta t \quad (4.62)$$

を充たす. もし標準形以外の確率過程が存在しないなら, 連続極限では

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -\hat{v} + \sqrt{2}\hat{\xi}^G \quad (4.63)$$

と同様に振舞うだろう. よって, 定常分布 $P_{ss}(v)$ は

$$P_{ss}(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-v^2/2} \quad (4.64)$$

となるはずである. 実際のコード例は 4.1 であり, 数値計算の結果は 4.1 である. 連続極限でガウス型の確率過程の解析解と一致していることがわかる. つまり, 結局非ガウス乱数を用いても連続極限ではガウスノイズを仮定しても一致してしまう.

コラム: 変な経路積分を定義することは出来ない

モデル (4.58) に話を戻してみよう. このノイズの経路積分表示を形式的に考えてみると $P(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_K) \propto \exp\left[-\sum_{i=1}^K \frac{\eta_i^4}{\Delta t^\alpha}\right]$ である. となると, 形式的な連続表現を取ると

$$P[\eta] \propto \exp\left[-\int_0^T \frac{\eta^4(t)}{dt^{\alpha+1}} dt\right] \quad (4.65)$$

となるように思われる. この“経路積分”表示は一見ガウス型とは異なるが, $\alpha = 2$ では結局ガウス過程の場合と結果が一致してしまう. また, オーダー評価を行えばわかる通り, $\alpha > 2$ では連続極限を採るとノイズが消失してしまって意味をなさず, $\alpha < 2$ では逆にノイズが大きすぎて発散してしまう. つまり, 結局変な経路積分を定義しても, 連続極限が意味をなさないことをこのことは主張している. つまり, 標準形の理論は連続極限でも確率論として妥当に定義出来る経路積分密度のクラスを規定している, と看做すことが出来る.

4.3 ホワイトノイズのレヴィ・伊藤分解

レヴィ・伊藤分解については一度主張を学んだが, 確率微分方程式の標準形 (4.50) を踏まえると, ホワイトノイズがガウスノイズと複合ポアソンノイズに分解されるのは自然だとわかる. 実際, ホワイトノイズは \hat{v} に依存しないモデルであることは意味として明らかであり, となると, 標準形 (4.50) における自由度である $a_t(\hat{v})$, $b_t(\hat{v})$, $\lambda_t(y|\hat{v})$ の \hat{v} 依存性と t 依存性を取り除けばよい. つまり,

$$a_t(\hat{v}) = -m = \text{const.}, \quad b_t(\hat{v}) = \sigma = \text{const.}, \quad \lambda_t(y|\lambda) = \lambda(y) \quad (4.66)$$

と置くことにより,

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = \hat{\xi}^W, \quad \hat{\xi}^W := m + \sigma\hat{\xi}^G + \hat{\xi}_{\lambda(y)}^{\text{CP}} \quad (4.67)$$

を得る. これで, レヴィ・伊藤分解の主張通り, ホワイトノイズ $\hat{\xi}^W$ は定数ドリフト m , ガウスノイズ $\hat{\xi}^G$, 複合ポアソンノイズ $\hat{\xi}_{\lambda(y)}^{\text{CP}}$ の和で構成されている. この \hat{v} を**レヴィ過程 (Lévy process)** と呼び, 以下, \hat{v} の代わりに \hat{L} と書くことにする.

4.3.1 レヴィ過程の特性関数

ここで、レヴィ過程についての特性関数について触れる。マスター方程式は

$$\frac{\partial P_t(L)}{\partial t} = \left[-m \frac{\partial}{\partial L} + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial L^2} \right] P_t(L) + \int_{-\infty}^{\infty} \lambda(y) [P_t(L-y) - P_t(L)] dy \quad (4.68)$$

で与えられる。特性関数は

$$\phi_t(s) := \int_{-\infty}^{\infty} e^{isL} P_t(L) dL \quad (4.69)$$

で定義される。結果として、

$$\log \phi_t(s) = t \left[ism - \frac{\sigma^2}{2} s^2 + \int_{-\infty}^{\infty} (e^{isy} - 1) \lambda(y) dy \right] \quad (4.70)$$

を得る。この主値積分が収束する条件として、仮定 (4.28) が必要である。

4.3.2 無限分解可能性

レヴィ過程の特性関数は無限分解可能性 (infinite divisibility) を満たす。ここで、無限分解可能性とは、ある確率変数 \hat{X} の分布 $P(X)$ が、任意の自然数 $n \geq 1$ に対して

$$\hat{X} = \sum_{i=1}^n \hat{X}_i, \quad X_i \sim Q(X_i) \quad (4.71)$$

と分解できることを意味する。但し、 \hat{X}_i は独立同分布 $Q(X_i)$ に従うとする。

この無限分解可能性が主張することは、特性関数で書くとわかりやすい。確率分布 $P(X)$, $Q(X_i)$ の特性関数をそれぞれ $\Phi_P(s) := \int P(X) e^{isX} dX$, $\Phi_Q(s) := \int Q(X_i) e^{isX_i} dX_i$ と書くと、

$$\Phi_P(s) = [\Phi_Q(s)]^n \quad (4.72)$$

となる。逆に言えば、 $\Phi_P(s)$ が特性関数として正常であるとき、任意の自然数 $n \geq 1$ に対して $[\Phi_P(s)]^{1/n}$ も特性関数として正常であることを要求している。ここで、「特性関数として正常」とは、フーリエ逆変換を行って分布に戻したとき、非負性と確率の保存則が成立することを指す。

レヴィ過程の特性関数は無限分解可能性を満たす。また逆に任意の無限分解可能な分布はレヴィ過程に自然に対応する。つまり、無限分解可能性はレヴィ過程を自然に特徴づける。

4.3.3 総強度 λ_{tot} が無限大になるレヴィ過程

ここまで、総強度 $\lambda_{\text{tot}} := \int \lambda(y) dy$ が有限の値を取るような「まとも」な確率過程を想定することが多かったが、レヴィ過程では一般的にこの仮定を取り去ることが出来る。もちろん、 $y \rightarrow \infty$ 方向の総強度が発散するケース ($\int_{|y|>a} \lambda(y) dy = \infty$, 但し $a > 0$) は異常なので定義できないが、 $y \simeq 0$ 近傍での総強度が発散するケース ($\int_{|y|<a} \lambda(y) dy = \infty$, 但し $a > 0$) については、well-defined な確率過程を得られることがある。

そのような代表的な題材はコーシー過程 (Cauchy process) である。具体的には

$$m = 0, \quad \sigma^2 = 0, \quad \lambda(y) = \frac{A}{y^2} \quad (4.73)$$

となるモデルである。この時、特性関数は

$$\log \phi_t(s) = -\pi A t |s| \quad (4.74)$$

で与えられ, well-defined である.

一般に, $\lambda(y)$ は原点近傍 $y \simeq 0$ で特異性を持つことが出来,

$$\lambda(y) \simeq |y|^{-\alpha-1}, \quad \alpha < 2 \text{ for } |y| \rightarrow 0 \quad (4.75)$$

という漸近形を持つならば λ_{tot} が発散しても, well-defined な確率過程を得ることが出来る. これは次に説明するパレート過程のもつ漸近的性質である.

総強度が無限大という状況は非常に奇妙に思うかもしれない. これは次のように理解すればよいだろう: 微小ジャンプが常に発生し続けているが, 正のジャンプと負のジャンプがある程度キャンセルし合い, その結果として, 全体としてまともな振る舞いを示している, ということだ. 実際, ガウスノイズに駆動されるウィーナー過程でも微小ジャンプが常に発生し続ける極限を取っているが, そこでも正負の両方向のジャンプがある程度キャンセルするように組み立てていた. 同様に, ベキ分布型の総強度の特異性を微小ジャンプについて導入したのがコーシー過程や, パレート過程である.

4.3.4 非対称な主値積分について

ここまでの主値積分は y について対称に定義していた ($\varepsilon_+ = \varepsilon_-$) が, 非対称な主値積分 ($\varepsilon_+ \neq \varepsilon_-$) として解釈することで, もう少し広いクラスの確率過程も標準形の内部に収めることが出来る. 例えば, 次のパレート過程 (Paretian process) を考える:

$$m = 0, \quad \sigma^2 = 0, \quad \lambda(y) = \begin{cases} A|u|^{-\alpha-1} & (u < 0) \\ Bu^{-\alpha-1} & (u > 0) \end{cases}, \quad \alpha \in (1, 2]. \quad (4.76)$$

但し, $A > 0$ は一般的に $B > 0$ と同じ値である必要はない.

パレート過程において, 対称な主値積分は収束するとは限らない. しかし, 主値積分の定義を適切に選択することで, 特性関数を収束させることが出来る. 具体的には,

$$\varepsilon_- := \begin{cases} \varepsilon_+ \left(\frac{A}{B + \kappa \varepsilon_+^{\alpha-1}} \right)^{\frac{1}{\alpha-1}} & (\alpha \in (1, 2)) \\ e^{\kappa} \varepsilon_+^{B/A} & (\alpha = 1) \end{cases} \quad (4.77)$$

という形に ε_- を選択することで,

$$\int \lambda(y)(e^{isy} - 1)dy := \lim_{\varepsilon_+ \rightarrow 0} \int_A \lambda(y)(e^{isy} - 1)dy, \quad A := (-\infty, \varepsilon_-) \cup (\varepsilon_+, \infty) \quad (4.78)$$

が収束する. 但し, κ は任意に選択可能な実数である. つまり, 主値積分の選択はモデルに応じた多義性があり, しかもモデルを固定しても任意定数 κ の自由度がある. 適切な κ で固定すると, パレート過程の特性関数は次の公式で具体的に与えられる:

$$\ln \phi_t(s) = \begin{cases} -|s|^\alpha t \gamma \left(1 + i\beta \frac{s}{|s|} \tan \frac{\pi\alpha}{2} \right) & (\alpha \in (1, 2), \quad \kappa = 0) \\ -|s| t \gamma \left(1 + \beta \frac{is}{|s|} \frac{2 \ln |s|}{\pi} \right) & (\alpha = 1, \quad \kappa = (B/A - 1)\gamma_{\text{Euler}}) \end{cases}, \quad (4.79)$$

$$\gamma := -(A + B)\Gamma(-\alpha) \cos \frac{\pi\alpha}{2}, \quad \beta := \frac{A - B}{A + B}, \quad \gamma_{\text{Euler}} := \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\sum_{k=1}^n \frac{1}{k} - \ln(n) \right) \quad (4.80)$$

4.3.5 レヴィ・ヒンチン公式

また、特性関数の公式において、主値積分を形式的に排除した形で書き直すことを考える。

$$M := m + m', \quad m' := \int_{-1}^1 y\lambda(y)dy \quad (4.81)$$

と定義する。ここでの主値積分は、非対称な主値積分を一般には含むとする。この M を用いて特性関数を

$$\log \phi_t(s) = t \left[isM - \frac{\sigma^2}{2} s^2 + \int_{-\infty}^{\infty} (e^{isy} - 1 - is\mathbf{1}_{|y|\geq 1})\lambda(y)dy \right] \quad (4.82)$$

と書き直すことが出来る。この式を**レヴィ・ヒンチン公式 (Lévy-Khinchin formula)** という。但し、指示関数を次の式で定義した：

$$\mathbf{1}_A(x) = \begin{cases} 1 & (x \in A) \\ 0 & (x \notin A) \end{cases}. \quad (4.83)$$

レヴィ・ヒンチン公式の右辺には主値積分が形式的に出てこないため、主値積分の解釈を具体的に設定することなく、レヴィ過程の特性関数を特徴づけることが出来る。

4.4 マスター方程式の形式論

ここまでマスター方程式と確率微分方程式の対応関係を説明して来た。解析的な計算を行う時、多くの場合は確率微分方程式を直接扱うのではなく、マスター方程式を扱う方が多い。何故なら、確率微分方程式は一般に非線形だが、マスター方程式は常に線形であり、線形代数⁷の枠組みを用いて形式論を整備することが出来るからだ。本節では1次元確率過程(1変数マスター方程式)を扱うが、本枠組みは多次元確率過程(多変数マスター方程式)への拡張は形式的に容易である。

4.4.1 固有値問題への帰着

マスター方程式は次の様な線型方程式になっている：

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \mathcal{L}P_t(v). \quad (4.84)$$

但し、 \mathcal{L} は線形演算子である。よって、次の形の固有値問題を扱うことが形式的な解法になる：

$$\mathcal{L}\phi_\mu(v) = -\mu\phi_\mu(v) \quad (4.85)$$

但し、 μ は固有値であり、 $\phi_\mu(v)$ は対応する固有関数である。この固有方程式について常に使用できる便利な定理はないが、多くの場合 μ の実部は非負である⁸。

今、 μ の実部が全て非負であり、 $\{\phi_\mu(v)\}_\mu$ が完全性を持つと仮定しよう。この時、確率分布の時間発展は形式的に

$$P_t(v) = \sum_{\mu} c_{\mu} e^{-\mu t} \phi_{\mu}(v) \quad (4.86)$$

⁷無限次元の固有値問題なので、厳密には関数解析の範疇。

⁸今の \mathcal{L} は無限次元の確率行列を少し変形した対応物である。有限次元の確率行列については、行列が規約であればペロン・フロベニウスの定理が使え、結果として μ は非負である。

と書くことが出来る。但し、 c_μ は初期条件 $P_0(v)$ によって決まる係数である。

以下、固有値問題を解くことが出来れば原理的には様々な確率過程の問題を形式的には解くことが出来ることを示して行こう。

4.4.2 定常分布

マスター方程式の性質が十分良い場合は、定常分布は第 0 固有関数に対応する。つまり、

$$P_{ss}(v) := \lim_{t \rightarrow \infty} P_t(v) \propto \phi_0(v). \quad (4.87)$$

である。

4.4.3 相関関数

相関関数も形式的には整理することが出来る。今、この節で扱うのは、物理量 A と B が、その時点の $\hat{v}(t)$ に関する関数として定義できる場合である： $\hat{A}_t = A(\hat{v}_t)$, $\hat{B}_{t'} = B(\hat{v}_{t'})$ 。

初期条件が $\hat{v}_0 = v_0$ で与えられる時、時刻 t での条件付き確率分布は

$$P_t(v|v_0) = e^{t\mathcal{L}}\delta(v - v_0) \quad (4.88)$$

である。よって、もし初期分布が一般の確率分布 $P_0(v_0)$ で与えられる時の相関関数は

$$\langle A(\hat{v}_t)B(\hat{v}_0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} A(v)B(v_0)P_0(v_0) \{e^{t\mathcal{L}}\delta(v - v_0)\} dv dv_0 \quad (4.89)$$

と書くことが出来る。今、 $\delta(v - v_0)$ に対して固有関数展開を行うと

$$\delta(v - v_0) = \sum_{\mu} c'_{\mu}(v_0)\phi_{\mu}(v), \quad (4.90)$$

原理的には

$$\langle A(\hat{v}_t)B(\hat{v}_0) \rangle = \sum_{\mu} e^{-\mu t} \int_{-\infty}^{\infty} A(v)B(v_0)P_0(v_0)c'_{\mu}(v_0)\phi_{\mu}(v)dv dv_0 \quad (4.91)$$

と書くことが出来る。また、初期分布が定常分布の時 $P_0(v) \propto \phi_0(v)$ は次の式で書くことが出来る：

$$C_{AB}(t) := \langle A(\hat{v}_t)B(\hat{v}_0) \rangle_{ss} = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} e^{-\mu t} \int_{-\infty}^{\infty} A(v)B(v_0)\phi_0(v_0)c'_{\mu}(v_0)\phi_{\mu}(v)dv dv_0, \quad (4.92)$$

$$Z := \int_{-\infty}^{\infty} \phi_0(v)dv. \quad (4.93)$$

但し、 $\langle \dots \rangle_{ss}$ は定常状態でのアンサンブル平均である。

Chapter 5

状態空間の拡張

次に、状態空間の拡張について説明する．既に定義されている確率過程に付随して、そこから構成される別の物理量についての統計を計算する時の計算技法である．抽象的に説明されても分かりにくいと考えられるため、まずは具体例から説明しよう．

5.1 導入としての具体例：計数統計

今、次のポアソンノイズ駆動ランジュバン方程式を考えよう：

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -a(\hat{v}) + \hat{\xi}_{y^*,\lambda}^P, \quad \hat{\xi}_{y^*,\lambda}^P := \sum_{i=1}^{\hat{N}(t)} y^* \delta(t - \hat{t}_i). \quad (5.1)$$

この系におけるマスター方程式は

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} [a(v)P_t(v)] + \lambda [P_t(v - y^*) - P_t(v)] \quad (5.2)$$

であることは既に学んだ．

ここで次の問題を考えよう： $\hat{v}(t)$ と $\hat{N}(t)$ の同時確率分布 $P_t(v, N) := P(\hat{v}(t) = v, \hat{N}(t) = N)$ をどうやって求めれば良いだろうか？この場合、 $\hat{v}(t)$ についての確率過程が定義されているとして、それに付随する別の確率変数 $\hat{N}(t)$ についての性質も理解しようとしている．このような問題は現実的な問題設定としてしばしば現れる．

このようなケースでは、状態空間の拡張を行えば良い．元々の確率過程は1次元空間 \hat{v} を扱っているが、状態空間を2次元空間 $\hat{\Gamma}(t) := (\hat{v}(t), \hat{N}(t))$ に拡張することで、2次元空間のマルコフ過程としてモデル化すればよい．つまり、 $\hat{\Gamma}(t)$ の時間発展として次の確率過程を考える：

$$d\hat{v} = \begin{cases} -a(\hat{v})dt & (\text{ジャンプ無：確率} = 1 - \lambda dt) \\ y^* & (\text{ジャンプ有：確率} = \lambda dt) \end{cases} \quad (5.3)$$

$$d\hat{N} = \begin{cases} 0 & (\text{ジャンプ無：確率} = 1 - \lambda dt) \\ 1 & (\text{ジャンプ有：確率} = \lambda dt) \end{cases} \quad (5.4)$$

但し、 $d\hat{v} := \hat{v}(t + dt) - \hat{v}(t)$ 、 $d\hat{N} := \hat{N}(t + dt) - \hat{N}(t)$ である．また、 \hat{v} と \hat{N} に置けるジャンプは完全同期すると仮定する¹．これを踏まえると、2次元マルコフ過程 $\hat{\Gamma}(t)$ についてのマスター方程式は

¹より正確には、次のように記述すればジャンプの同期を表現することが出来る（但し、 $d\hat{\Gamma}(t) := \hat{\Gamma}(t + dt) - \hat{\Gamma}(t)$ ）：

$$d\hat{\Gamma} = \begin{cases} (-a(\hat{v}), 0) dt & (\text{ジャンプ無：確率} = 1 - \lambda dt) \\ (y^*, 1) & (\text{ジャンプ有：確率} = \lambda dt) \end{cases} \quad (5.5)$$

次の式になる：

$$\frac{\partial P_t(v, N)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} [a(v)P_t(v, N)] + \lambda [P_t(v - y^*, N - 1) - P_t(v, N)]. \quad (5.6)$$

この様に、状態空間を拡張し、1次元確率過程を2次元確率過程に埋め込むことで、2次元マルコフ過程のマスター方程式の枠組みに帰着させれば良い。

導出. 任意の2変数関数 $f(\hat{\Gamma}(t))$ の時間発展は

$$df(\hat{\Gamma}) = \begin{cases} -a(\hat{v}) \frac{\partial f(\hat{\Gamma})}{\partial \hat{v}} dt & (\text{ジャンプ無：確率} = 1 - \lambda dt) \\ f(\hat{\Gamma} + \Delta \hat{\Gamma}) - f(\hat{\Gamma}) & (\text{ジャンプ有：確率} = \lambda dt). \end{cases} \quad (5.7)$$

但し、 $\Delta \hat{\Gamma} := (y^*, 1)$ である。ここで両辺の期待値を取ると

$$\langle df(\hat{\Gamma}) \rangle = \left\langle -a(\hat{v}) \frac{\partial f(\hat{\Gamma})}{\partial \hat{v}} dt \right\rangle + \lambda dt \langle f(\hat{\Gamma} + \Delta \hat{\Gamma}) - f(\hat{\Gamma}) \rangle + o(dt) \quad (5.8)$$

である。つまり、

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} f(v, N) \frac{\partial P_t(v, N)}{\partial t} dv dN \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ -a(v) \frac{\partial f(v, N)}{\partial v} + \lambda [f(v + y^*, N + 1) - f(v, N)] \right\} P_t(v, N) dv dN \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\partial}{\partial v} [a(v)P_t(v, N)] + \lambda [P_t(v - y^*, N - 1) - P_t(v, N)] \right\} f(v, N) dv dN. \end{aligned} \quad (5.9)$$

である。但し、2行目から3行目にかけて、部分積分と変数変換 $v + y^* \rightarrow v, N + 1 \rightarrow N$ を行った。この式は任意の $f(\hat{\Gamma})$ について成立する恒等式であり、マスター方程式 (5.6) が導出される。

5.2 形式論

以上の枠組みを形式的に整理しよう。今 K 次元の確率微分方程式

$$\frac{d\hat{\mathbf{X}}(t)}{dt} = \dots \quad (5.10)$$

が与えられていたとする (但し $\hat{\mathbf{X}} := (\hat{X}_1, \dots, \hat{X}_K)$)。今、 K' 個の付随する確率変数 $\hat{\mathbf{V}} := (\hat{V}_1, \dots, \hat{V}_{K'})$ についての確率分布の情報が知りたいとする。この時は状態空間を $K + K'$ 次元空間と設定し、 $\hat{\Gamma} := (\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{V}})$ についてのマルコフ過程に埋め込む。つまり、

$$\frac{d\hat{\Gamma}(t)}{dt} = \dots \quad (5.11)$$

がマルコフ過程となるようにする²。そうすると、 $K + K'$ 変数のマスター方程式を導出することが出来る：

$$\frac{\partial P_t(\Gamma)}{\partial t} = \mathcal{L}P_t(\Gamma) \quad (5.12)$$

が導出される (\mathcal{L} は線形演算子)。ここまで定式化できれば、あとは線型固有値問題を解けばよい。もし特定の1変数 V_j についての確率分布 $P_t(V_j)$ が知りたい場合 ($j \in [1, K']$) は、形式的に射影 (周辺化) を施せば良い：

$$P_t(V_j) := \int_{-\infty}^{\infty} P_t(\Gamma) \left(\prod_j dX_j \right) \left(\prod_{j \neq i} dV_j \right). \quad (5.13)$$

²正確には、マルコフ過程になる様に $\hat{\mathbf{V}}$ を選択する。この変数の組を探すには、一般的に試行錯誤が必要である。

5.3 様々な具体例

例 5.3.1 (ブラウン運動における位置と速度の同時確率分布) 今, 1次元速度 $\hat{V}(t)$ についてのランジュバン方程式を考える:

$$M \frac{d\hat{V}}{dt} = -\gamma \hat{V} + \sqrt{2\gamma T} \hat{\xi}^G \iff d\hat{V} = -\frac{\gamma \hat{V}}{M} dt + \frac{\sqrt{2\gamma T}}{M} d\hat{W} \quad (5.14)$$

を考えよう. M はブラウン粒子の質量, γ は粘性係数, T は温度, $d\hat{W} := \hat{\xi}^G dt$ である. ここで, このブラウン粒子の変位を考えよう:

$$\hat{X}(t) - \hat{X}(0) = \int_0^t \hat{V}(\tau) d\tau. \quad (5.15)$$

ここで \hat{X} については微分方程式の形

$$\frac{d\hat{X}}{dt} = \hat{V} \quad (5.16)$$

に書き直すことが出来る. つまり, 状態空間を2次元に拡張し, $\hat{\mathbf{I}}(t) := (\hat{V}(t), \hat{X}(t))$ についてのマルコフ過程として問題を看做せば良い. 結果としてクラマース方程式 (Kramers equation) を得る:

$$\frac{\partial P_t(V, X)}{\partial t} = -V \frac{\partial}{\partial X} P_t(V, X) + \frac{\gamma}{M} \frac{\partial}{\partial V} \left[V + \frac{T}{M} \frac{\partial}{\partial V} \right] P_t(V, X). \quad (5.17)$$

導出. 任意の関数 $f(\hat{V}, \hat{X})$ を用意する. この関数の時間発展は,

$$df(\hat{V}, \hat{X}) = d\hat{V} \frac{\partial f}{\partial \hat{V}} + d\hat{X} \frac{\partial f}{\partial \hat{X}} + \frac{1}{2} (d\hat{V})^2 \frac{\partial^2 f}{\partial^2 \hat{V}^2} + d\hat{V} d\hat{X} \frac{\partial^2 f}{\partial \hat{V} \partial \hat{X}} + \frac{1}{2} (d\hat{X})^2 \frac{\partial^2 f}{\partial^2 \hat{X}^2} + \dots \quad (5.18)$$

ここで両辺の期待値を取る. 特に, 伊藤ルールを意識すると

$$\langle (d\hat{V})^2 \rangle = \frac{2\gamma T}{M^2} dt + o(dt), \quad \langle d\hat{V} d\hat{X} \rangle = o(dt), \quad \langle (d\hat{X})^2 \rangle = o(dt) \quad (5.19)$$

であるため,

$$\langle df \rangle = \left\langle d\hat{V} \frac{\partial f}{\partial \hat{V}} + d\hat{X} \frac{\partial f}{\partial \hat{X}} + \frac{1}{2} \frac{2\gamma T}{M^2} \frac{\partial^2 f}{\partial^2 \hat{V}^2} dt \right\rangle + o(dt). \quad (5.20)$$

これを整理すると,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dX dV \frac{\partial P_t(V, X)}{\partial t} f &= \int_{-\infty}^{\infty} dX dV P_t(V, X) \left\{ -\frac{\gamma V}{M} \frac{\partial f}{\partial V} + V \frac{\partial f}{\partial X} + \frac{\gamma T}{M^2} \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} \right\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dX dV f(V, X) \left\{ \frac{\gamma}{M} \frac{\partial}{\partial V} [VP] - V \frac{\partial P}{\partial X} + \frac{\gamma T}{M^2} \frac{\partial^2 P}{\partial V^2} \right\}. \end{aligned} \quad (5.21)$$

但し, 部分積分を用いて $f(V, X)$ を括りだした. この等式は任意の $f(V, X)$ に対して成立するので, クラマース方程式 (5.17) を得る.

例 5.3.2 (BGK モデルにおける位置と速度の同時確率分布) 次の例として BGK モデルを考えよう:

$$\hat{V}(t+dt) = \begin{cases} \hat{V}(t) & (\text{ジャンプ無: 確率} = 1 - \lambda_0 dt) \\ \hat{V}' & (\text{ジャンプ有: 確率} = \lambda_0 dt, \text{ジャンプ先: } \hat{V}' \sim \phi_{\text{eq}}(V')) \end{cases}, \quad (5.22a)$$

$$\phi_{\text{eq}}(V') = \sqrt{\frac{M}{2\pi k_B T}} e^{-\frac{MV'^2}{2k_B T}}. \quad (5.22b)$$

ブラウン粒子の位置 $\hat{X}(t)$ の統計を理解したいと仮定する. この時, 状態空間を2次元に拡張し, $\hat{\Gamma} := (\hat{V}, \hat{X})$ についてのマルコフ過程と看做することが出来る. 結果として, 2変数マスター方程式 (BGK方程式) を得る:

$$\frac{\partial P_t(V, X)}{\partial t} = -V \frac{\partial}{\partial X} P_t(V, X) + \lambda_0 \phi_{\text{eq}}(V) \int_{-\infty}^{\infty} P_t(X, V') dV' - \lambda_0 P_t(V, X). \quad (5.23)$$

導出. 任意の関数 $f(\hat{V}, \hat{X})$ の時間発展は

$$df = \begin{cases} \hat{V} \frac{\partial f}{\partial \hat{X}} dt & (\text{ジャンプ無: 確率} = 1 - \lambda_0 dt) \\ f(\hat{V}', \hat{X}) - f(\hat{V}, \hat{X}) & (\text{ジャンプ有: 確率} = \lambda_0 dt, \text{ジャンプ先: } \hat{V}' \sim \phi_{\text{eq}}(V')) \end{cases} \quad (5.24)$$

である. 両辺の期待値を取って,

$$\langle df \rangle = \left\langle \hat{V} \frac{\partial f}{\partial \hat{X}} dt \right\rangle + \lambda_0 dt \int_{-\infty}^{\infty} dV' \phi_{\text{eq}}(V') \langle [f(V', \hat{X}) - f(\hat{V}, \hat{X})] \rangle \quad (5.25)$$

両辺を dt で割って整理すると,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dV dX \frac{\partial P_t}{\partial t} f = \int_{-\infty}^{\infty} dV dX P_t(V, X) \left\{ V \frac{\partial f}{\partial X} + \lambda_0 \int_{-\infty}^{\infty} dV' \phi_{\text{eq}}(V') [f(V', X) - f(V, X)] \right\} \quad (5.26)$$

ここで, 積分変数 V と V' はただのダミー変数であり, 両者の表記を入れ替えても良い ($V \rightarrow V', V' \rightarrow V$) ので,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dV dX dV' P_t(V, X) \phi_{\text{eq}}(V') f(V', X) = \int_{-\infty}^{\infty} dV dX dV' \phi_{\text{eq}}(V) f(V, X) P_t(V', X) \quad (5.27)$$

である. よって,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dV dX \frac{\partial P_t}{\partial t} f = \int_{-\infty}^{\infty} dV dX f(V, X) \left\{ -V \frac{\partial P_t}{\partial X} + \lambda_0 \phi_{\text{eq}}(V) \int_{-\infty}^{\infty} dV' P_t(V', X) - \lambda_0 P_t(V, X) \right\} \quad (5.28)$$

を得る. この式は任意の $f(V, X)$ に対して成立するため, マスター方程式 (5.23) を得る.

例 5.3.3 (確率熱力学における位置と仕事の同時確率分布) ブラウン粒子の位置 $\hat{X}(t)$ についての過減衰ランジュバン方程式 (overdamped Langevin equation) を考えよう. 但し, ブラウン粒子はポテンシャル $V(\hat{X}, a)$ に閉じ込められていると仮定する. 但し, $a(t)$ は操作変数であり, ポテンシャルを操作する実験者が自由に動かせると仮定する. つまり,

$$\gamma \frac{d\hat{X}}{dt} = -\frac{\partial V(\hat{X}, a)}{\partial \hat{X}} + \sqrt{2\gamma T} \hat{\xi}^G. \quad (5.29)$$

とモデル化する.

ところで, 確率熱力学 (stochastic thermodynamics) と呼ばれる分野では, 操作変数 $a(t)$ を動かした時の仕事 $\hat{W}(t)$ を次の様に定義する:

$$\hat{W}(t) := \int_0^t \frac{\partial V(\hat{X}(\tau), a(\tau))}{\partial a} \frac{da(\tau)}{d\tau} d\tau \implies \frac{d\hat{W}}{dt} = \frac{\partial V(\hat{X}, a)}{\partial a} \frac{da}{dt}. \quad (5.30)$$

今, 仕事 $\hat{W}(t)$ の統計を知りたいと仮定しよう. この場合は状態空間を2次元に拡張し, $\hat{\Gamma}(t) := (\hat{X}(t), \hat{W}(t))$ についてマルコフ過程と看做せばよい. 結果として次の2変数フォッカー・プランク方程式を得る:

$$\frac{\partial P_t(X, \mathcal{W})}{\partial t} = -\left(\frac{\partial V(X, a)}{\partial a} \frac{da}{dt} \right) \frac{\partial}{\partial \mathcal{W}} P_t(X, \mathcal{W}) + \frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial X} \left[\frac{\partial V(X, a)}{\partial X} + T \frac{\partial}{\partial X} \right] P_t(X, \mathcal{W}). \quad (5.31)$$

Chapter 6

境界条件と条件分岐

ここではフォッカー・プランク方程式に話を絞って境界条件を説明する。つまり本章で考える問題とは、ガウス型確率微分方程式

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = -a(\hat{x}) + b(\hat{x}) \cdot \hat{\xi}^G \quad (6.1)$$

に対応するフォッカー・プランク方程式

$$\frac{\partial P_t(x)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial x} a(x) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} b^2(x) \right] P_t(x) \quad (6.2)$$

の境界条件である。また、この章では速度を想起させる \hat{v} ではなく、位置を想起させる \hat{x} を確率変数の文字として使用する。また特に断りがない限り、 $a(\hat{x})$ と $b(\hat{x})$ は滑らかに変動する関数だと仮定する。

6.1 様々な境界条件の天下りの紹介

ではまず、確率流を定義した後に、様々な境界条件を天下りの的に与えていこう。

6.1.1 確率流の定義

境界条件を理解する上で重要な量は確率流 (probability flux) である。フォッカー・プランク方程式において確率流は連続の式を充たすように定義される：

$$J_t(x) := - \left[a(x) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} b^2(x) \right] P_t(x), \quad \frac{\partial P_t(x)}{\partial t} + \frac{\partial J_t(x)}{\partial x} = 0. \quad (6.3)$$

何故なら、連続の式を $[a, b]$ で積分すると

$$\frac{d}{dt} \int_a^b P_t(x) dx = \underbrace{J_t(a)}_{\text{流入}} - \underbrace{J_t(b)}_{\text{流出}} \quad (6.4)$$

となり、境界 $x = a, b$ から確率がどの程度流出・流入するかを記述しているからだ¹。

¹メモ：金澤が2023年に京都大学で授業した時（講義名「統計力学特論」）は、7回目にここまで進んだ。

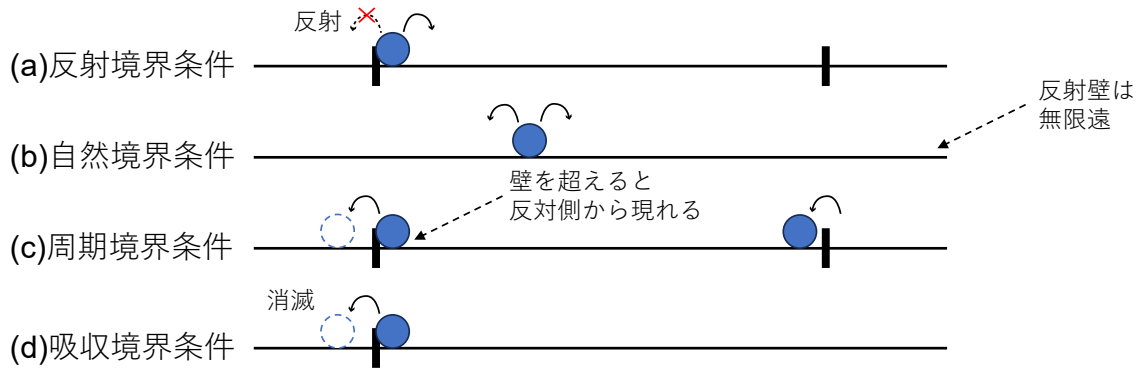


図 6.1: 様々な境界条件. (a) 反射境界条件. 反射壁が $x = x_{\min}$ と $x = x_{\max}$ に挿入されており, 粒子は反射壁を超えることが出来ない. (b) 自然境界条件. 反射壁が無遠に挿入されており, 実質的に自由に進むことが出来る. 最も標準的な設定. (c) 周期境界条件. 境界を超えると, 反対側の境界から現れる. (d) 吸収境界条件. 吸収壁を超えると粒子が消滅する.

境界近傍では, 確率流 $J_t(x)$ も確率密度関数 $P_t(x)$ も, 右極限・左極限を明確に指定した方が適切であるため, 以下の定義を導入して記法を整理する:

$$J_t(x_{\max}) := \lim_{x \rightarrow x_{\max} - 0} J_t(x), \quad J_t(x_{\min}) := \lim_{x \rightarrow x_{\min} + 0} J_t(x), \quad (6.5)$$

$$P_t(x_{\max}) := \lim_{x \rightarrow x_{\max} - 0} P_t(x), \quad P_t(x_{\min}) := \lim_{x \rightarrow x_{\min} + 0} P_t(x). \quad (6.6)$$

6.1.2 反射境界条件

まずは反射境界条件を考える (図 6.1(a)). 今, 確率微分方程式 (6.1) に従う粒子の位置として確率変数 \hat{x} を考えるが, この粒子を閉じ込める反射壁が $x = x_{\min}$ と $x = x_{\max}$ に存在すると仮定しよう. つまり, 反射壁の関係で確率変数 \hat{x} は強制的に $\hat{x} \in [x_{\min}, x_{\max}]$ を満たすとす. この時, 反射境界条件は

$$J_t(x_{\min}) = J_t(x_{\max}) = 0 \quad (6.7)$$

を全ての時刻 t に対して課すことで定式化される. つまり, 壁をにじむようにすり抜ける確率流が強制的にゼロになるように設計するということだ. この境界条件の下では確率が自然に保存していることに注意. 実際,

$$\frac{d}{dt} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} P_t(x) dx = J_t(x_{\min}) - J_t(x_{\max}) = 0 \quad (6.8)$$

である.

例 6.1.1 (反射境界条件を課した自由ブラウン運動) では, 最も素朴な例として反射境界が $x = x_{\min}$ と $x = x_{\max}$ に存在する時の, $\hat{x} \in [x_{\min}, x_{\max}]$ の領域での自由ブラウン運動を考えよう:

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \sigma \hat{\xi}^G \quad (\hat{x} \in [x_{\min}, x_{\max}]). \quad (6.9)$$

この系は拡散方程式に従う

$$\frac{\partial P_t(x)}{\partial t} = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 P_t(x)}{\partial x^2} \quad (x \in [x_{\min}, x_{\max}]). \quad (6.10)$$

定常状態では $\partial P_{ss}(x)/\partial t = 0$ より, $\partial^2 P_{ss}(x)/\partial^2 x = 0$ であり, つまり, $P_{ss}(x) = c_0 + c_1 x$ を得る. 但し, $(x \in [x_{\min}, x_{\max}])$ である. 反射境界条件から

$$J_{ss}(x_{\min}) = -\frac{\sigma^2}{2} \partial_+ P_{ss}(x_{\min}) = -\frac{c_1 \sigma^2}{2} = 0, \quad J_{ss}(x_{\max}) = -\frac{\sigma^2}{2} \partial_- P_{ss}(x_{\max}) = -\frac{c_1 \sigma^2}{2} = 0. \quad (6.11)$$

但し, 右微分と左微分を定義した:

$$\partial_+ f(x) := \lim_{h \rightarrow +0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, \quad \partial_- f(x) := \lim_{h \rightarrow +0} \frac{f(x) - f(x-h)}{h}. \quad (6.12)$$

よって, 確率分布の規格化条件 $\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} P_{ss}(x) dx = 1$ より,

$$P_{ss}(x) = c_0 = \frac{1}{x_{\max} - x_{\min}} \quad (x \in [x_{\min}, x_{\max}]) \quad (6.13)$$

が定常分布である.

6.1.3 自然境界条件

自然境界条件とは, 特に境界条件を明示的には考えず, 無限遠まで自由に粒子が移動できる (つまり, $\hat{x} \in (-\infty, \infty)$) 問題設定を指す. 図 6.1(b) に示すように, 自然境界条件は反射壁を無限遠に設置した反射境界条件の一種とみなすことが出来る ($x_{\max} \rightarrow \infty, x_{\min} \rightarrow -\infty$). つまり自然境界条件では

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} P_t(x) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} J_t(x) = 0 \quad (6.14)$$

を任意の時刻に対して課す.

今までの定式化では暗に自然境界条件を課していたため, 部分積分の境界項がゼロになっていた, と解釈することが実は正しい. 実際, 任意の関数 $f(v)$ に対して,

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} P_t(x) \left[-a(x) \frac{df(x)}{dx} + \frac{b^2(x)}{2} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} \right] dx \\ &= \underbrace{\left[f(x) J_t(x) + P_t(x) \frac{b^2(x)}{2} \frac{df(x)}{dx} \right]_{-\infty}^{\infty}}_{\text{境界項}} + \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \left[\frac{\partial}{\partial x} a(x) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} b^2(x) \right] P_t(x) dx \end{aligned} \quad (6.15)$$

であるため, 自然境界条件を課すと境界項がゼロになる.

6.1.4 周期境界条件

周期境界とは, x_{\max} と x_{\min} が連続的に繋がっている状況である (図 6.1(c)). つまり, 粒子が x_{\max} を超えた瞬間に x_{\min} に到達し, 逆に x_{\min} を超えた瞬間に x_{\max} に戻る. 特に $a(\hat{x})$ と $b(\hat{x})$ は境界について周期性があると仮定しよう:

$$a(x_{\min}) = a(x_{\max}), \quad b(x_{\min}) = b(x_{\max}). \quad (6.16)$$

この場合の周期境界条件は

$$P_t(x_{\min}) = P_t(x_{\max}), \quad J_t(x_{\min}) = J_t(x_{\max}) \quad (6.17)$$

で定式化される.

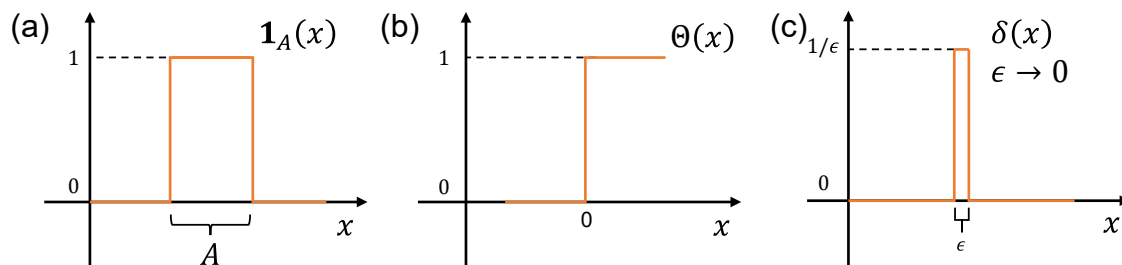


図 6.2: (a) 指示関数 $1_A(x)$ の図. (b) ヘビサイド関数 $\Theta(x)$ の図. 指示関数の特殊な場合に該当する. (c) δ 関数の図. 指示関数からの極限に該当する.

6.1.5 吸収境界条件

今までは確率が保存するような境界条件を考えていたが、ここでは確率が保存しない境界条件を考える。これは一見奇妙なようで、しばしば物理的設定としては自然に表れる。

今、粒子が確率過程に従っているとして、 $x = x_a$ に吸収壁を入れる設定を考えよう。この吸収壁に粒子が到達すると、粒子は取り除かれ、系から消滅するでしょう (図 6.1(d))。この時の境界条件は

$$P_t(a) = 0 \tag{6.18}$$

を任意の時刻 t に課すことで定式化される。

6.2 境界条件の演繹的導出

以上の境界条件は多くの確率過程の教科書に載っているものであり、実用的に使われているため、必ず知っておく必要がある。

ところで、この境界条件については天下りに与えられすぎており、すこしだまされた感じがしないだろうか？今までは、確率微分方程式 (6.1) が与えられ、これが動力学についての完全な情報を持っているため、そこから演繹的にマスター方程式や、フォッカー・プランク方程式を導出してきたはずである。ところが、境界条件については確率微分方程式から導出されるのではなく、物理的な意味を直観から考えて構成している。もし確率微分方程式のレベルで完全にダイナミクスが決まっているのであれば、そこから境界条件も力学から演繹的に導出されるべきではないだろうか？

この節ではこのような疑問に答えることを目標とする。つまり、確率微分方程式のレベルから境界条件を明示的に実装し、フォッカー・プランク方程式の境界条件を演繹的に導出する。ここで学ぶことは、上で解説した代表的な境界条件しか研究で扱わない学生・研究者にとっては必要ないものかもしれない。しかし、教科書に載っていない特殊な境界条件を自分で実装する必要性が生じたときは、その境界条件を自力で導出するうえで役に立つと思われる²。

6.2.1 指示関数

この節で重要な役割を果たす道具は指示関数 (indicator function, 図 6.2(a)) である³：

²かなり非標準的な構成だと思うが、金澤が経済物理の研究を行う上で、複雑な境界条件を演繹的に導出する必要があり、その結果としてこういう演繹的/力学的な導出をまじめに考える必要性が生じたので記載している。

³特性関数 (characteristic function) と呼ばれることもある。

$$\mathbf{1}_A(x) = \begin{cases} 1 & (\text{if } x \in A) \\ 0 & (\text{if } x \notin A) \end{cases}. \quad (6.19)$$

但し、 A は何らかの領域である。この指示関数を用いることで、プログラミングにおけるif文の様な条件分岐を連続時間系であっても強引に実装することが出来る。

指示関数は多くの重要な関数と関わっている。例えば、ヘビサイド関数 (図 6.2(b)) は

$$\Theta(x) := \mathbf{1}_{(0,\infty)}(x) = \begin{cases} 1 & (x > 0) \\ 0 & (x \leq 0) \end{cases} \quad (6.20)$$

と書くことが出来る。また、ここまで非常に活躍してきた δ 関数も指示関数の極限とみなすことが出来る (図 6.2(c)):

$$\delta(x-a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{1}_{(a-\varepsilon/2, a+\varepsilon/2)} = \begin{cases} 1/\varepsilon & (x \in (a-\varepsilon/2, a+\varepsilon/2)) \\ 0 & (x \notin (a-\varepsilon/2, a+\varepsilon/2)) \end{cases}. \quad (6.21)$$

6.2.2 反射境界条件

まず、反射境界条件を力学的に扱う。ここでは簡単のため、加法的ノイズの場合、つまり $b(\hat{x}) = \sigma^2 = \text{const.}$ の場合を考える。

ここで、確率微分方程式 (6.1) はガウスノイズに駆動されるモデルであるが、一旦ガウスノイズに戻る前の対称ポアソンノイズに駆動される系について考えてみよう。つまり、反射壁から離れているときは、粒子の位置 \hat{x} は有限幅 a のジャンプに従ってランダムウォークするとしよう:

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \hat{\xi}_{a,\lambda}^{\text{SP}}. \quad (6.22)$$

但し、 λ は対称ポアソンノイズの強度である。最終的にガウス極限 ($a \rightarrow 0$, 但し $\sigma^2 = \lambda a^2 = \text{const.}$) を取ることにする。

反射境界条件下での対称ポアソン過程のマスター方程式

ここで確率微分方程式 (6.22) に対して、境界条件を明確に実装することにしよう。境界条件を実装する上で重要なことは、場合分けを実装するという点である。プログラミングでif文を書くことは非常に多いが、if文を確率微分方程式に実装することがポイントである。まず、確率微分方程式のレベルでは全て領域 $\hat{x} \in (-\infty, \infty)$ での動力学を、場合分けすることで次のように書くことが出来る:

$$d\hat{x} = \begin{cases} +a & (\text{確率} = dt\lambda/2, \text{if } \hat{x} + a \leq x_{\max}) \\ -a & (\text{確率} = dt\lambda/2, \text{if } \hat{x} - a \geq x_{\min}) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (6.23)$$

こういった場合分けを想定した上で、任意の関数 $f(\hat{x})$ の動力学を考えよう。まず、

$$df(\hat{x}) = \begin{cases} f(\hat{x} + a) - f(\hat{x}) & (\text{確率} = dt\lambda/2, \text{if } \hat{x} + a \leq x_{\max}) \\ f(\hat{x} - a) - f(\hat{x}) & (\text{確率} = dt\lambda/2, \text{if } \hat{x} - a \geq x_{\min}) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (6.24)$$

が整理する．よって，両辺の平均値を取ると

$$\langle df(\hat{x}) \rangle = dt \int_{-\infty}^{\infty} dx P_t(x) \left\{ \frac{\lambda}{2} [f(x+a) - f(x)] \mathbf{1}_A(x) + \frac{\lambda}{2} [f(x-a) - f(x)] \mathbf{1}_B(x) \right\} \quad (6.25)$$

但し， $A := (-\infty, x_{\max} - a]$ ， $B := [x_{\min} + a, \infty)$ で定義し，指示関数を用いて場合分けを表現した．両辺を整理すると，

$$\left\langle \frac{df(\hat{x})}{dt} \right\rangle = \frac{\lambda}{2} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) [P_t(x-a) \mathbf{1}_A(x-a) - P_t(x) \mathbf{1}_A(x) + P_t(x+a) \mathbf{1}_B(x+a) - P_t(x) \mathbf{1}_B(x)] \quad (6.26)$$

を得る．この式は任意の $f(x)$ に対して成立するので，次のマスター方程式を得る：

$$\frac{\partial P_t(x)}{\partial t} = \frac{\lambda}{2} [P_t(x-a) \mathbf{1}_A(x-a) - P_t(x) \mathbf{1}_A(x) + P_t(x+a) \mathbf{1}_B(x+a) - P_t(x) \mathbf{1}_B(x)]. \quad (6.27)$$

この式は任意の $x \in (-\infty, \infty)$ で成立し，境界条件すらも自動的に含んでいることがポイントである．つまり，この式を出発点にすれば，原理的に導出できない性質は存在しないはずである．

実際，右辺の振る舞いを更に場合分けすると， $x \in [x_{\min}, x_{\max}]$ の領域に置いて，

$$\frac{\partial P_t(x)}{\partial t} = \begin{cases} \frac{\lambda}{2} [P_t(x+a) - 2P_t(x) + P_t(x-a)] & (x \in C := A \cap B = [x_{\min} + a, x_{\max} - a]) \\ \frac{\lambda}{2} [P_t(x-a) - P_t(x)] & (x \in \partial A := (x_{\max} - a, x_{\max}]) \\ \frac{\lambda}{2} [P_t(x+a) - P_t(x)] & (x \in \partial B := [x_{\min}, x_{\min} + a)) \end{cases} \quad (6.28)$$

但し， $\forall x \notin [x_{\min}, x_{\max}]$ で $P_t(x) = 0$ が成立することを用いた⁴．

自然境界条件の演繹的導出 1

ところで，最終的にガウス極限 ($a \rightarrow +0, \sigma^2 := \lambda a^2 = \text{const.}$) を取ることを念頭にオーダー評価してみると，

$$\frac{\partial P_t(x)}{\partial t} \approx \begin{cases} \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 P_t(x)}{\partial x^2} & (x \in C := A \cap B = [x_{\min} + a, x_{\max} - a]) \\ \frac{\sigma^2}{2a} \frac{\partial P_t(x)}{\partial x} & (x \in \partial A := (x_{\max} - a, x_{\max}]) \\ \frac{\sigma^2}{2a} \frac{\partial P_t(x)}{\partial x} & (x \in \partial B := [x_{\min}, x_{\min} + a)) \end{cases} \quad (6.29)$$

である．初期条件として，

$$\frac{\partial^2 P_t(x)}{\partial x^2} = O(1) \neq 0 \quad (x \in C), \quad \frac{\partial P_t(x)}{\partial x} = O(1) \neq 0 \quad (x \in \partial A \cup \partial B) \quad (6.30)$$

を仮定すると， $x \in C$ での $P_t(x)$ の時間変化は比較的遅く，境界 ($x \in \partial A \cup \partial B$) での $P_t(x)$ の時間変化は $a \rightarrow +0$ で速いことに気付く．結果， $a \rightarrow +0$ では

$$\frac{\partial P_t(x)}{\partial x} = 0 \quad (x \in \partial A \cup \partial B) \quad (6.31)$$

を充たすように，境界での $P_t(x)$ が即座に緩和する．つまり， $a \rightarrow +0$ の極限では反射境界条件 (6.7) が成立する．

⁴ $\forall x \notin [x_{\min}, x_{\max}]$ で $P_0(x) = 0$ を充たす初期条件を課すと，式 (6.27) から自動的に充たされる．証明は略．

反射境界条件下のブラウン運動のフォッカー・プランク方程式

以上の考察を形式的に反射条件下のフォッカー・プランク方程式として定式化してみよう。指示関数を使って式 (6.28) を更に整理すると、

$$\frac{\partial P_t(x)}{\partial t} = \frac{\lambda}{2} \Delta^2 P_t(x) \mathbf{1}_C(x) + \frac{\lambda}{2} [P_t(x-a) - P_t(x)] \mathbf{1}_{\partial A}(x) + \frac{\lambda}{2} [P_t(x+a) - P_t(x)] \mathbf{1}_{\partial B}(x). \quad (6.32)$$

但し、 $\Delta^2 P_t(x) := P_t(x+a) - 2P_t(x) + P_t(x-a)$ である。ここで a が十分小さいと仮定し、最終的にガウス極限を取ろう。つまり、 $\sigma^2 := \lambda a^2 = \text{const.}$ の条件を課して $a \rightarrow +0$ とする。結果、

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_t(x)}{\partial t} &= \mathbf{1}_C(x) \frac{\lambda a^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P_t(x) - \mathbf{1}_{\partial A}(x) \frac{a\lambda}{2} \partial_- P_t(x) + \mathbf{1}_{\partial B}(x) \frac{a\lambda}{2} \partial_+ P_t(x) + o(\lambda a^2) \\ &\approx \mathbf{1}_D(x) \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P_t(x) - \delta(x - x_{\max}) \frac{\sigma^2}{2} \partial_- P_t(x) + \delta(x - x_{\min}) \frac{\sigma^2}{2} \partial_+ P_t(x) \end{aligned} \quad (6.33)$$

となる。但し、 $D := (x_{\min}, x_{\max})$ である。つまり確率流を用いて書くとガウス極限では、

$$\frac{\partial P_t(x)}{\partial t} = -\mathbf{1}_D(x) \frac{\partial}{\partial x} J_t(x) + \delta(x - x_{\max}) J_t(x_{\max}) - \delta(x - x_{\min}) J_t(x_{\min}), \quad (6.34)$$

$$J_t(x) := -\frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} P_t(x) \quad (\forall x \in D := (x_{\min}, x_{\max})), \quad (6.35)$$

$$J_t(x_{\max}) := -\frac{\sigma^2}{2} \partial_- P_t(x_{\max}), \quad J_t(x_{\min}) := -\frac{\sigma^2}{2} \partial_+ P_t(x_{\min}) \quad (6.36)$$

である。但し、

$$\lim_{a \rightarrow +0} \frac{1}{a} \mathbf{1}_{\partial A}(x) = \delta(x - x_{\max}), \quad \lim_{a \rightarrow +0} \frac{1}{a} \mathbf{1}_{\partial B}(x) = \delta(x - x_{\min}).$$

を用いた。つまり、ガウス極限では境界条件が δ 関数の形で実装された。

自然境界条件の演繹的導出 2

ここで δ 関数が境界条件としてどのような影響を及ぼすかを検討しよう。まず、境界近傍で積分してみよう。 $\varepsilon > 0$ を微小実数と仮定すると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{x_{\max}-\varepsilon}^{x_{\max}+\varepsilon} P_t(x) dx &= \int_{x_{\max}-\varepsilon}^{x_{\max}+\varepsilon} \left[-\mathbf{1}_D(x) \frac{\partial}{\partial x} J_t(x) + \delta(x - x_{\max}) J_t(x_{\max}) - \delta(x - x_{\min}) J_t(x_{\min}) \right] dx \\ &= - \int_{x_{\max}-\varepsilon}^{x_{\max}} \frac{\partial}{\partial x} J_t(x) + J_t(x_{\max}) \\ &= J_t(x_{\max} - \varepsilon) \end{aligned} \quad (6.37)$$

ここで、 $P_t(x)$ は境界近傍で有限の値を取る ($P_t(x) < \infty$) ため、

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{d}{dt} \int_{x_{\max}-\varepsilon}^{x_{\max}+\varepsilon} P_t(x) dx = 0 \quad (6.38)$$

であるから、反射境界条件

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} J_t(x_{\max} - \varepsilon) = J_t(x_{\max}) = -\frac{\sigma^2}{2} \partial_- P_t(x_{\max}) = 0 \quad (6.39)$$

が再度、演繹的に導出された⁵。

⁵メモ：金澤が2023年に京都大学で授業した時（講義名「統計力学特論」）は、8回目にここまで進んだ。

6.2.3 周期境界条件

次に周期境界条件を扱う。まず、例によって対称ポアソンノイズから出発して境界条件を明示的に取り入れたマスター方程式を導出し、最後にガウス極限を取る方針にする。

周期境界条件下での対称ポアソン過程のマスター方程式

まず、次の確率動力学を考える：

$$d\hat{x} := \begin{cases} +a & (\text{確率} = dt\lambda/2, \text{ if } \hat{x} + a \leq +L) \\ -a & (\text{確率} = dt\lambda/2, \text{ if } \hat{x} - a \geq -L) \\ -2L + a & (\text{確率} = dt\lambda/2, \text{ if } \hat{x} + a > +L) \\ +2L - a & (\text{確率} = dt\lambda/2, \text{ if } \hat{x} - a < -L) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (6.40)$$

但し、周期境界が $x_{\max} = +L$ と $x_{\min} = -L$ に挿入されていると仮定する。この動力学のもとでは、任意の関数 $f(\hat{x})$ の時間変化は

$$\langle df \rangle = dt \int dx P_t(x) \left[\frac{\lambda}{2} \{f(x+a) - f(x)\} \mathbf{1}_A(x) + \frac{\lambda}{2} \{f(x-a) - f(x)\} \mathbf{1}_B(x) \right. \\ \left. + \frac{\lambda}{2} \{f(x+a-2L) - f(x)\} \mathbf{1}_{\bar{A}}(x) + \frac{\lambda}{2} \{f(x-a+2L) - f(x)\} \mathbf{1}_{\bar{B}}(x) \right] \quad (6.41)$$

である。但し、 $A := (-\infty, L-a]$, $B := [-L+a, \infty)$, $\bar{A} := (L-a, \infty)$, $\bar{B} := (-\infty, -L+a)$ である。この式は任意の $f(x)$ に対して成立するため、境界条件を明示的に含んだマスター方程式を得る：

$$\frac{\partial P_t(x)}{\partial t} = \frac{\lambda}{2} \left[\mathbf{1}_A(x-a) P_t(x-a) - \mathbf{1}_A(x) P_t(x) + \mathbf{1}_B(x+a) P_t(x+a) - \mathbf{1}_B(x) P_t(x) \right. \\ \left. + \mathbf{1}_{\bar{A}}(x-a+2L) P_t(x-a+2L) - \mathbf{1}_{\bar{A}}(x) P_t(x) + \mathbf{1}_{\bar{B}}(x+a-2L) P_t(x+a-2L) - \mathbf{1}_{\bar{B}}(x) P_t(x) \right]. \quad (6.42)$$

周期境界条件の演繹的導出 1

式を整理して場合分けすると、 $x \in [-L, L]$ では

$$\frac{\partial P_t(x)}{\partial t} = \begin{cases} \frac{\lambda}{2} \Delta^2 P_t(x) & (x \in C) \\ \frac{\lambda}{2} [P_t(x-a) - P_t(x) + P_t(x+a-2L) - P_t(x)] & (x \in \partial A) \\ \frac{\lambda}{2} [P_t(x+a) - P_t(x) + P_t(x-a+2L) - P_t(x)] & (x \in \partial B) \end{cases} \quad (6.43)$$

を得る。但し、 $C := A \cap B := [-L+a, L-a]$, $\partial A := (L-a, L)$, $\partial B := (-L, -L+a)$ である。また、 $x \notin [-L, L]$ の時は $P_t(x) = 0$ であることを使用した。

ガウス極限 ($a \rightarrow +0, \sigma^2 := \lambda a^2 = \text{const.}$) を取ることを前提に、各項の大きさを評価する。ここで

$$P_t^-(L) := \lim_{h \rightarrow 0} P_t(L-h), \quad P_t^+(L) := \lim_{h \rightarrow 0} P_t(-L+h) \quad (6.44)$$

で定義すると、式 (6.43) から直ちに、

$$\frac{\partial}{\partial t} (P_t^-(L) - P_t^+(-L)) = -\frac{\sigma^2}{a^2} (P_t^-(L) - P_t^+(-L)) \quad (6.45)$$

を得る．つまり，初期条件がたとえ $P_t^-(L) \neq P_t^+(-L)$ だったとしても， $a \rightarrow +0$ の時は即座に

$$P_t^-(L) = P_t^+(-L) \quad (6.46)$$

を充たすように緩和する．これで境界条件の1つが得られた．

また， $P_t^-(L) = P_t^+(-L)$ を使うと，

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P_t^-(L) &= \frac{\lambda}{2} [P_t(L-a) - P_t^-(L) + P_t(-L+a) - P_t^+(-L)] \\ &\approx \frac{\sigma^2}{2a} [-\partial_- P_t(L) + \partial_+ P_t(-L) + O(a)] \end{aligned} \quad (6.47)$$

である．つまり，いかなる初期条件であっても

$$\partial_- P_t(L) = \partial_+ P_t(-L) \quad (6.48)$$

を充たすように $a \rightarrow +0$ では即座に緩和する．以上のことから，たとえ初期条件が境界条件を充たさないものであってもガウス極限では即座周期境界条件 (6.17) を充たすように解が緩和するため，周期境界条件 (6.17) を課してフォッカー・プランク方程式を解けばよいことが分かる．以上のように，周期境界条件 (6.17) を演繹的に導出することが出来る．

周期境界条件化のブラウン運動のフォッカー・プランク方程式

次に，境界条件を陽に取り込んだフォッカー・プランク方程式を形式的に導出しよう．指示関数を使って再度整理すると，次の式を得る：

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_t(x)}{\partial t} &= \frac{\lambda}{2} \Delta^2 P_t(x) \mathbf{1}_C(x) + \frac{\lambda}{2} [P_t(x-a) - P_t(x) + P_t(x+a-2L) - P_t(x)] \mathbf{1}_{\partial A}(x) \\ &\quad + \frac{\lambda}{2} [P_t(x+a) - P_t(x) + P_t(x-a+2L) - P_t(x)] \mathbf{1}_{\partial B}(x). \end{aligned} \quad (6.49)$$

では，ガウス極限を取ろう ($a \rightarrow +0, \sigma^2 := \lambda a^2 = \text{const.}$)．但し，ここでは次の式変形に着目する：

$$\begin{aligned} P_t(+L-a) &= P_t(+L-a) - a \partial_- P_t(+L) + O(a^2) \\ P_t(-L+a) &= P_t(-L+a) + a \partial_+ P_t(-L) + O(a^2) \\ \lim_{a \rightarrow +0} \frac{1}{a} \mathbf{1}_{\partial A}(x) &= \delta(x-L), \quad \lim_{a \rightarrow +0} \frac{1}{a} \mathbf{1}_{\partial B}(x) = \delta(x+L). \end{aligned}$$

これらを用いると，十分小さい a に対して，

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_t(x)}{\partial t} &= \mathbf{1}_D(x) \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 P_t(x)}{\partial x^2} + \frac{\sigma^2}{2} \delta(x-L) \left[-\partial_- P_t(L) + \partial_+ P_t(-L) + \frac{P_t(-L) - P_t(L)}{a} \right] \\ &\quad + \frac{\sigma^2}{2} \delta(x+L) \left[+\partial_+ P_t(-L) - \partial_- P_t(+L) + \frac{P_t(+L) - P_t(-L)}{a} \right] + O(a) \end{aligned} \quad (6.50)$$

である．

周期境界条件の演繹的な導出 2

ここで境界近傍での δ 関数の影響を見積もってみよう．まず両辺を境界近傍で積分する． $\varepsilon > 0$ を微小実数として，

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{L-\varepsilon}^{L+\varepsilon} P_t(x) dx &= \frac{d}{dt} \int_{L-\varepsilon}^L \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 P_t(x)}{\partial x^2} dx + \frac{\sigma^2}{2} \left[-\partial_- P_t(L) + \partial_+ P_t(-L) + \frac{P_t(-L) - P_t(L)}{a} \right] \\ &= \frac{\sigma^2}{2} \left[-\frac{\partial P_t(L-\varepsilon)}{\partial x} + \partial_+ P_t(-L) + \frac{P_t(-L) - P_t(L)}{a} \right] \end{aligned} \quad (6.51)$$

ここで、境界近傍では $P_t(x) < \infty$ であるため、

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{d}{dt} \int_{L-\varepsilon}^{L+\varepsilon} P_t(x) dx = 0 \quad (6.52)$$

である必要がある。つまり、そのためには周期境界条件 (6.17) が再導出された。

Part III

統計物理における確率過程

Chapter 7

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 [34–36] 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。

7.1 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。

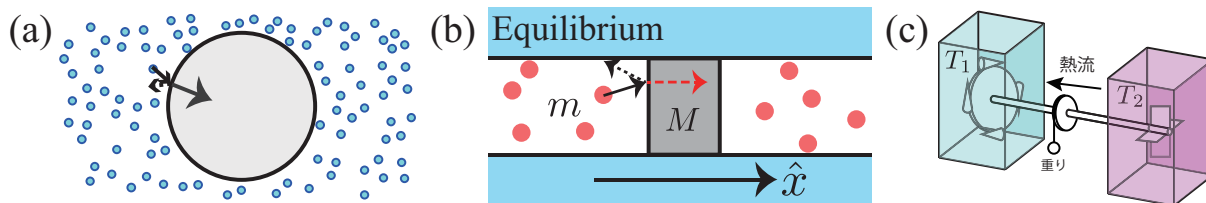


図 7.1: (a) 3次元ブラウン運動. (b) 1次元ブラウン運動（レイリーピストン，文献 [9] のものを改変して引用）. (c) ブラウンラチェット（文献 [33] の画像を縮小して引用．この設定は文献 [42] に基づく．）

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るが、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・分子モデルが適用できる程度の適温の気体だけを対象とする。

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 7.1(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 7.1(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 7.1(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用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。

7.2 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、擬リウビル方程式を導出する [35, 36]。次に擬リウビル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 [6, 37–39]。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 ($\alpha, \beta \geq 0$)。

7.3 玩具モデルの擬リウビル方程式

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玩具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 7.2):

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = -2\hat{v}\delta(t - \hat{t}_c), \quad \frac{d\hat{x}}{dt} = \hat{v}, \quad (7.1)$$

ここで \hat{t}_c は衝突時刻であり次の条件を充たす：

$$\hat{x}(\hat{t}_c) = x_c, \quad \hat{v}(\hat{t}_c) > 0. \quad (7.2)$$

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： $\hat{v}(t)\delta(t - \hat{t}_c) := \hat{v}(t - 0)\delta(t - \hat{t}_c) = v_0\delta(t - \hat{t}_c)$ 。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 $P_t(v, x)$ の時間発展方程式は次のような擬リウビル方程式に従う：

$$\frac{\partial P_t(v, x)}{\partial t} = [P_t(-v, x)\Theta(-v) - P_t(v, x)\Theta(v)]|v|\delta(x - x_c) - \frac{\partial P_t(v, x)}{\partial x}v. \quad (7.3)$$

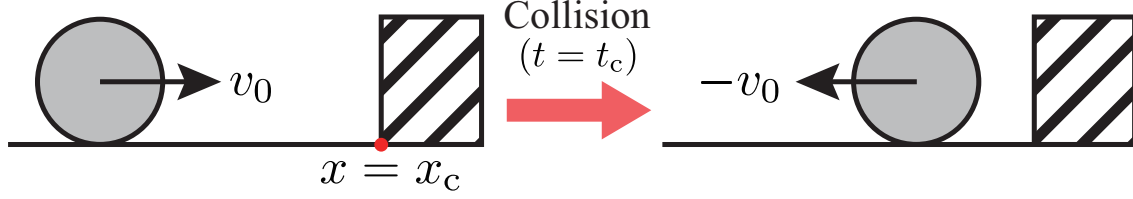


図 7.2: 決定論的衝突のポンチ絵 (文献 [9] より引用). $x = x_c$ にある壁に時刻 $t = t_c$ に衝突する一次元の粒子運動を考えている.

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 $P_t(v, x)dvdx$ として特徴づける. これは剛体球多体系の擬リウビル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:

$$\frac{\partial P_t(v, x)}{\partial t} = \underbrace{P_t(-v, x)\Theta(-v)|v|\delta(x - x_c)}_{\text{流入項}} - \underbrace{P_t(v, x)\Theta(v)|v|\delta(x - x_c)}_{\text{流出項}} + \underbrace{\left(-\frac{\partial P_t(v, x)}{\partial x}v\right)}_{\text{移流項}}. \quad (7.4)$$

導出

δ 関数の恒等式に着目する:

$$\delta(f(t)) = \sum_k \frac{\delta(t - t_k)}{|f'(t_k)|} \iff g(t)\delta(f(t)) = \sum_k \frac{g(t_k)}{|f'(t_k)|} \delta(t - t_k), \quad (7.5)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{df(\hat{v}, \hat{x})}{dt} &= [f(\hat{v} - 2\hat{v}, \hat{x}) - f(\hat{v}, \hat{x})]\delta(t - \hat{t}_c) + \frac{\partial f(\hat{v}, \hat{x})}{\partial \hat{x}}\hat{v} \\ &= [f(-\hat{v}, \hat{x}) - f(\hat{v}, \hat{x})]|\hat{v}|\delta(\hat{x} - x_c)\Theta(\hat{v}) + \frac{\partial f(\hat{v}, \hat{x})}{\partial \hat{x}}\hat{v}, \end{aligned} \quad (7.6)$$

とかける. ここで恒等式 (7.5) 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:

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} dvdx \frac{\partial P_t(v, x)}{\partial t} f(v, x) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dvdx P_t(v, x) \left\{ [f(-v, x) - f(v, x)]|v|\delta(x - x_c)\Theta(v) + \frac{\partial f(v, x)}{\partial x}v \right\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dvdx f(v, x) \left\{ [P_t(-v, x)\Theta(-v) - P_t(v, x)\Theta(v)]|v|\delta(x - x_c) - \frac{\partial P_t(v, x)}{\partial x}v \right\}, \end{aligned} \quad (7.7)$$

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 (7.3) が玩具モデル (7.1) のマスター方程式として導出される. この計算方法が節 7.4 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.

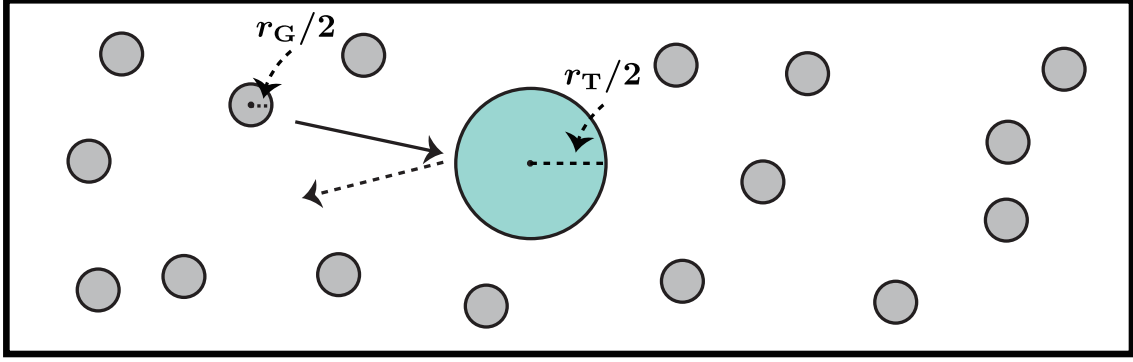


図 7.3: 多数のガス粒子とトレーサー粒子. 十分希薄なガスであり, 全粒子が剛体球だと仮定した. 文献 [9] より引用.

解の整合性確認

玩具モデル (7.1) 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:

$$P_t(v, x) = \begin{cases} \delta(v - v_0)\delta(x - x_0 - v_0t) & (t < \hat{t}_c) \\ \delta(v + v_0)\delta(x - x_c + v_0(t - t_c)) & (t > \hat{t}_c) \end{cases} \quad (7.8)$$

$t = \hat{t}_c$ での, この解の切り替えがうまく擬リウビル方程式 (7.3) から導出できることを示そう. $t < \hat{t}_c$ では, 式 (7.3) 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 (7.3) の両辺を時間積分すると

$$\begin{aligned} P_{\hat{t}_c+\varepsilon}(v, x) &= P_{\hat{t}_c-\varepsilon}(v, x) + \int_{\hat{t}_c-\varepsilon}^{\hat{t}_c+\varepsilon} dt [P_t(-v, x)\Theta(-v) - P_t(v, x)\Theta(v)]|v|\delta(x - x_c) + O(\varepsilon) \\ &= P_{\hat{t}_c-\varepsilon}(v, x) + \int_{\hat{t}_c-\varepsilon}^{\hat{t}_c+\varepsilon} dt [\delta(v + v_0)\delta(x - x_0 - v_0t)\Theta(-v) - \delta(v - v_0)\delta(x - x_0 - v_0t)\Theta(v)]|v|\delta(x - x_c) + O(\varepsilon) \\ &= \delta(v - v_0)\delta(x - x_c) + \underbrace{[\delta(v + v_0)\delta(x - x_c)]}_{\text{流入項}} - \underbrace{[\delta(v - v_0)\delta(x - x_c)]}_{\text{流出項}} + O(\varepsilon) = \delta(v + v_0)\delta(x - x_c) + O(\varepsilon) \end{aligned} \quad (7.9)$$

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.

7.4 多体剛体球系の擬リウビル方程式

7.4.1 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 7.3 を参照):

$$\frac{d\hat{x}_i}{dt} = \hat{v}_i, \quad \frac{d\hat{v}_i}{dt} = -\frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial \hat{x}_i}, \quad \frac{d\hat{X}}{dt} = \hat{V}, \quad \frac{d\hat{V}}{dt} = -\frac{1}{M} \frac{\partial U}{\partial \hat{X}}. \quad (7.10)$$

ポテンシャルは

$$U(\hat{X}, \hat{x}_1, \dots, \hat{x}_N) = \sum_{\alpha} U_{\text{EX}}(\hat{x}_{\alpha}) + \sum_{j < k} U_{\text{GG}}(|\hat{x}_j - \hat{x}_k|) + \sum_j U_{\text{TG}}(|\hat{x}_j - \hat{X}|) \quad (7.11)$$

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:

$$U_{\text{EX}}(\hat{\boldsymbol{x}}_\alpha) = \begin{cases} 0 & (\hat{\boldsymbol{x}}_\alpha \in [0, L]^3) \\ \infty & (\hat{\boldsymbol{x}}_\alpha \notin [0, L]^3) \end{cases}. \quad (7.12)$$

7.4.2 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

$$U_{\text{GG}}(r) = \begin{cases} 0 & (r > r_{\text{G}}) \\ \infty & (r \leq r_{\text{G}}) \end{cases}, \quad U_{\text{TG}}(r) = \begin{cases} 0 & (r > (r_{\text{G}} + r_{\text{T}})/2) \\ \infty & (r \leq (r_{\text{G}} + r_{\text{T}})/2) \end{cases} \quad (7.13)$$

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 7.4). i 番目の粒子と j 番目の粒子間の衝突条件は

$$|\hat{\boldsymbol{x}}_i - \hat{\boldsymbol{x}}_j| = r_{\text{G}}, \quad (\hat{\boldsymbol{v}}_i - \hat{\boldsymbol{v}}_j) \cdot \hat{\boldsymbol{e}}_{ij} < 0 \quad (7.14)$$

で与えられる². ただし, $\hat{\boldsymbol{e}}_{ij} := (\hat{\boldsymbol{x}}_i - \hat{\boldsymbol{x}}_j)/|\hat{\boldsymbol{x}}_i - \hat{\boldsymbol{x}}_j|$ 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 $\hat{\boldsymbol{v}}'_i$, $\hat{\boldsymbol{v}}'_j$ は運動量交換, エネルギー保存則, 滑りなし条件³で決まる.

$$m\hat{\boldsymbol{v}}_i + m\hat{\boldsymbol{v}}_j = m\hat{\boldsymbol{v}}'_i + m\hat{\boldsymbol{v}}'_j, \quad \frac{m}{2}\hat{\boldsymbol{v}}_i^2 + \frac{m}{2}\hat{\boldsymbol{v}}_j^2 = \frac{m}{2}\hat{\boldsymbol{v}}_i'^2 + \frac{m}{2}\hat{\boldsymbol{v}}_j'^2, \quad \hat{\boldsymbol{v}}'_i - \hat{\boldsymbol{v}}_i \propto \hat{\boldsymbol{e}}_{ij} \quad (7.15)$$

この方程式を解くと衝突後速度を得る⁴ (図 7.4a):

$$\hat{\boldsymbol{v}}'_i = \hat{\boldsymbol{v}}_i - [(\hat{\boldsymbol{v}}_i - \hat{\boldsymbol{v}}_j) \cdot \hat{\boldsymbol{e}}_{ij}] \hat{\boldsymbol{e}}_{ij}, \quad \hat{\boldsymbol{v}}'_j = \hat{\boldsymbol{v}}_j + [(\hat{\boldsymbol{v}}_i - \hat{\boldsymbol{v}}_j) \cdot \hat{\boldsymbol{e}}_{ij}] \hat{\boldsymbol{e}}_{ij}. \quad (7.17)$$

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

$$\hat{\boldsymbol{V}}' = \hat{\boldsymbol{V}} - \frac{2m}{m+M} [(\hat{\boldsymbol{V}} - \hat{\boldsymbol{v}}_i) \cdot \hat{\boldsymbol{e}}_{0j}] \hat{\boldsymbol{e}}_{0j}, \quad \hat{\boldsymbol{v}}'_j = \hat{\boldsymbol{v}}_j + \frac{2M}{m+M} [(\hat{\boldsymbol{V}} - \hat{\boldsymbol{v}}_j) \cdot \hat{\boldsymbol{e}}_{0j}] \hat{\boldsymbol{e}}_{0j} \quad (7.18)$$

で与えられる. ただし, $\hat{\boldsymbol{e}}_{0j} := (\hat{\boldsymbol{X}} - \hat{\boldsymbol{x}}_j)/|\hat{\boldsymbol{X}} - \hat{\boldsymbol{x}}_j|$ は法線ベクトルである (図 7.4(b)).

²メモ: 金澤が 2023 年度に京都大学で授業した時 (講義名「統計力学特論」) は, 9 回目にここまで進んだ.

³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.

⁴ $\hat{\boldsymbol{v}}'_i = \hat{\boldsymbol{v}}_i - k_{ij} \hat{\boldsymbol{e}}_{ij}$ と置く. 但し $\hat{\boldsymbol{e}}_{ij} = -\hat{\boldsymbol{e}}_{ji}$ であり, 運動量保存則から $k_{ij} = k_{ji}$ である. ここで運動量保存則 $\hat{\boldsymbol{v}}_i + \hat{\boldsymbol{v}}_j = \hat{\boldsymbol{v}}'_i + \hat{\boldsymbol{v}}'_j$ の両辺を二乗すると, $\hat{\boldsymbol{v}}_i^2 + \hat{\boldsymbol{v}}_j^2 + 2\hat{\boldsymbol{v}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{v}}_j = \hat{\boldsymbol{v}}_i'^2 + \hat{\boldsymbol{v}}_j'^2 + 2\hat{\boldsymbol{v}}'_i \cdot \hat{\boldsymbol{v}}'_j$ を得る. エネルギー保存則 $\hat{\boldsymbol{v}}_i^2 + \hat{\boldsymbol{v}}_j^2 = \hat{\boldsymbol{v}}_i'^2 + \hat{\boldsymbol{v}}_j'^2$ より,

$$\hat{\boldsymbol{v}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{v}}_j = \hat{\boldsymbol{v}}'_i \cdot \hat{\boldsymbol{v}}'_j \quad (7.16)$$

を得る. この式に $\hat{\boldsymbol{v}}'_i = \hat{\boldsymbol{v}}_i - k_{ij} \hat{\boldsymbol{e}}_{ij}$ を代入して整理すると, $k_{ij} \neq 0$ を満たす解は $k_{ij} = [(\hat{\boldsymbol{v}}_i - \hat{\boldsymbol{v}}_j) \cdot \hat{\boldsymbol{e}}_{ij}]$ である.

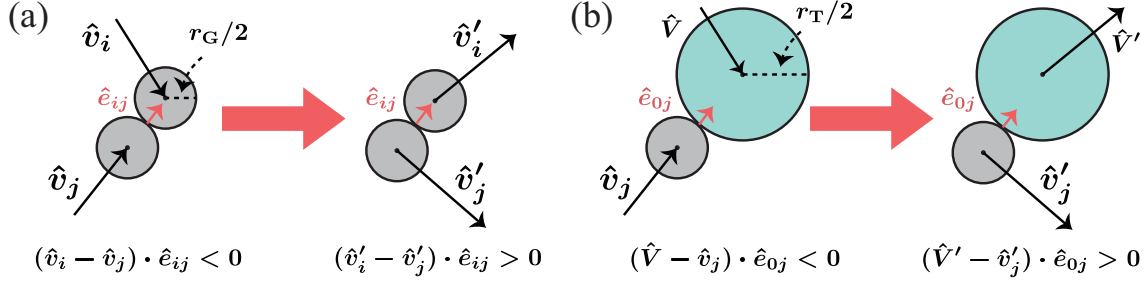


図 7.4: (a) 2つのガス粒子間の衝突. (b) ガス粒子とトレーサー粒子との衝突 (レイリーピストン, 文献 [9] のものを改変して引用).

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⁵. 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:

$$\frac{d\hat{x}_\alpha}{dt} = \hat{v}_\alpha, \quad \frac{d\hat{v}_\alpha}{dt} = -\frac{1}{m_\alpha} \frac{\partial U_{\text{EX}}}{\partial \hat{x}_\alpha} + \sum_\beta' \sum_{k=1}^{\infty} \hat{\mathbf{F}}_{\alpha;\beta} \delta(t - \hat{t}_{k;\alpha\beta}). \quad (7.19)$$

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

$$\hat{\mathbf{F}}_{\alpha;\beta} = -\frac{2m_\beta}{m_\alpha + m_\beta} [(\hat{v}_\alpha - \hat{v}_\beta) \cdot \hat{e}_{\alpha\beta}] \hat{e}_{\alpha\beta} \quad (7.20)$$

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:

$$|\hat{x}_\alpha(\hat{t}_{k;\alpha\beta}) - \hat{x}_\beta(\hat{t}_{k;\alpha\beta})| = (r_\alpha + r_\beta)/2, \quad (\hat{v}_\alpha(\hat{t}_{k;\alpha\beta}) - \hat{v}_\beta(\hat{t}_{k;\alpha\beta})) \cdot \hat{e}_{\alpha\beta}(\hat{t}_{k;\alpha\beta}) < 0. \quad (7.21)$$

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.

直接衝突と逆衝突

公式 (7.20) は初期速度 $(\hat{v}_\alpha, \hat{v}_\beta)$ を出発点に, 衝突後速度 $(\hat{v}'_\alpha, \hat{v}'_\beta)$ を予言する. 分子運動論の文脈 [36] では, この手の衝突を**直接衝突 (direct collision)**と呼ぶ. その反対として, **逆衝突 (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 $(\hat{v}'_\alpha, \hat{v}'_\beta)$ から初期速度 $(\hat{v}_\alpha, \hat{v}_\beta)$ を逆推定することを指す. つまり, 初期速度 $(\hat{v}_\alpha, \hat{v}_\beta)$ を衝突後速度 $(\hat{v}'_\alpha, \hat{v}'_\beta)$ の関数として陽に書き下して,

$$\hat{v}_\alpha = \hat{v}'_\alpha + \hat{\mathbf{F}}'_{\alpha;\beta}, \quad \hat{\mathbf{F}}'_{\alpha;\beta} := -\frac{2m_\beta}{m_\alpha + m_\beta} [(\hat{v}'_\alpha - \hat{v}'_\beta) \cdot \hat{e}_{\alpha\beta}] \hat{e}_{\alpha\beta}. \quad (7.22)$$

となる. ここで直接衝突の公式 (7.20) と逆衝突の公式 (7.22) 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.

7.4.3 擬リュウビル方程式

次に位相空間上の状態点の動力学方程式 (擬リュウビル方程式) を導出する.

⁵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.

位相空間の定義

位相空間上の状態点を

$$\hat{\Gamma}(t) := (\hat{V}, \hat{X}; \hat{v}_1, \hat{x}_1; \dots; \hat{v}_N, \hat{x}_N) \in \mathbf{R}^{6N+6} \quad (7.23)$$

として定義する．つまり， $6N + 6$ 次元の位相空間上の点として，系の状態は指定される．

直接衝突と逆衝突の関係の整理

ここで位相空間の点 $\hat{\Gamma}$ で表現した時の，直接衝突と逆衝突の関係式を整理しよう：

$$\Gamma := (\dots, \mathbf{v}_\alpha, \dots, \mathbf{v}_\beta, \dots) \rightarrow \Gamma' := (\dots, \mathbf{v}'_\alpha, \dots, \mathbf{v}'_\beta, \dots) = \Gamma + \Delta\Gamma_{\alpha;\beta}(\Gamma), \quad (7.24)$$

$$\Gamma' := (\dots, \mathbf{v}'_\alpha, \dots, \mathbf{v}'_\beta, \dots) \rightarrow \Gamma := (\dots, \mathbf{v}_\alpha, \dots, \mathbf{v}_\beta, \dots) = \Gamma' + \Delta\Gamma'_{\alpha;\beta}(\Gamma'). \quad (7.25)$$

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⁶：

$$d\Gamma = d\Gamma'. \quad (7.26)$$

但し， $d\Gamma := \prod_\alpha dv_\alpha dx_\alpha$ は体積要素である．また，直接衝突と逆衝突の公式は，弾性衝突の仮定ゆえに時間反転対称性があり，関数形が一致する：

$$\Delta\Gamma'_{\alpha;\beta}(\Gamma') = \Delta\Gamma_{\alpha;\beta}(\Gamma). \quad (7.27)$$

位相空間上の分布関数の時間発展

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．この位相分布関数は次の擬リュウビル方程式に従う：

$$\begin{aligned} & \frac{D^{(N)}}{Dt} P_t^{(N)}(\Gamma) \\ &= \sum_{\alpha < \beta} \left[P_t^{(N)}(\Gamma + \Delta\Gamma_{\alpha;\beta}) \Theta(\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) - P_t^{(N)}(\Gamma) \Theta(-\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \right] |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}). \end{aligned} \quad (7.28)$$

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

$$\frac{D^{(N)}}{Dt} := \left[\frac{\partial}{\partial t} + \sum_\alpha \left(\mathbf{v}_\alpha \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_\alpha} - \frac{1}{m_\alpha} \frac{\partial U_{\text{EX}}}{\partial \mathbf{x}_\alpha} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_\alpha} \right) \right] \quad (7.29)$$

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

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

$$\frac{df}{dt} = \sum_\alpha \left(\mathbf{v}_\alpha \frac{\partial f}{\partial \hat{\mathbf{x}}_\alpha} - \frac{1}{m_\alpha} \frac{\partial U_{\text{EX}}}{\partial \mathbf{x}_\alpha} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}_\alpha} \right) + \sum_{\alpha < \beta} \sum_{k=1}^{\infty} \left[f(\hat{\Gamma} + \Delta\hat{\Gamma}_{\alpha;\beta}) - f \right] \delta(t - \hat{t}_{k;\alpha\beta}). \quad (7.30)$$

⁶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 [36]．

恒等式 (7.30) を次のように変形しよう,

$$\begin{aligned} & \frac{df}{dt} - \sum_{\alpha} \hat{v}_{\alpha} \frac{\partial f}{\partial \hat{x}_{\alpha}} + \sum_{\alpha} \frac{1}{m_{\alpha}} \frac{\partial U_{\text{EX}}}{\partial \mathbf{x}_{\alpha}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}_{\alpha}} \\ &= \sum_{\alpha < \beta} \left[f(\hat{\Gamma} + \Delta \hat{\Gamma}_{\alpha;\beta}) - f \right] |\hat{\mathbf{v}}_{\alpha\beta} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\alpha\beta}| \Theta(-\hat{\mathbf{v}}_{\alpha\beta} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\alpha\beta}) \delta(|\hat{\mathbf{x}}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}). \end{aligned} \quad (7.31)$$

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

$$\sum_{k=1}^{\infty} \hat{\mathbf{F}}_{\alpha;\beta} \delta(t - \hat{t}_{k;\alpha\beta}) = \hat{\mathbf{F}}_{\alpha;\beta} \left| \frac{d}{dt} (|\hat{\mathbf{x}}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \right| \delta(|\hat{\mathbf{x}}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \Theta(-\hat{\mathbf{v}}_{\alpha\beta} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{ij}) \quad (7.32)$$

を用いた. この恒等式は式 (7.5) と

$$\frac{d|\hat{\mathbf{x}}_{\alpha\beta}|}{dt} = \hat{\mathbf{v}}_{\alpha\beta} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\alpha\beta} \quad (7.33)$$

を用いて導出される⁷. 両辺の平均をとると次の恒等式を得る,

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{\Gamma} \left[\frac{\partial P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma})}{\partial t} f(\mathbf{\Gamma}) + \sum_{\alpha} \left(-\mathbf{v}_{\alpha} \frac{\partial f(\mathbf{\Gamma})}{\partial \mathbf{x}_{\alpha}} + \frac{1}{m_{\alpha}} \frac{\partial U_{\text{EX}}}{\partial \mathbf{x}_{\alpha}} \frac{\partial f(\mathbf{\Gamma})}{\partial \mathbf{v}_{\alpha}} \right) P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma}) \right] \\ &= \sum_{\alpha < \beta} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{\Gamma} P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma}) [f(\mathbf{\Gamma} + \Delta \mathbf{\Gamma}_{\alpha;\beta}) - f(\mathbf{\Gamma})] |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \Theta(-\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}). \end{aligned} \quad (7.35)$$

ここで式変形が少し複雑な項は

$$I := \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{\Gamma} P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma}) f(\mathbf{\Gamma}') |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \Theta(-\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \quad (7.36)$$

である. I の積分を変形し, $f(\mathbf{\Gamma})$ を括りだしてみよう. 衝突後の点 $\mathbf{\Gamma}'$ を, 衝突前の点 $\mathbf{\Gamma}$ の関数として看做した場合 ($\mathbf{\Gamma}' = \mathbf{\Gamma}'(\mathbf{\Gamma})$), 変数変換 $\mathbf{\Gamma} \rightarrow \mathbf{\Gamma}'$ を行った際に体積要素は保存する. 具体的には式 (7.26) が成立する. よって, 変数変換 $\mathbf{\Gamma} \rightarrow \mathbf{\Gamma}'$ の結果として,

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{\Gamma}' P_t^{(N)}(\underbrace{\mathbf{\Gamma}' + \Delta \mathbf{\Gamma}'_{\alpha;\beta}(\mathbf{\Gamma}')}_{\mathbf{\Gamma}}) f(\mathbf{\Gamma}') |\mathbf{v}_{\alpha\beta}(\mathbf{\Gamma}') \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \Theta(-\mathbf{v}_{\alpha\beta}(\mathbf{\Gamma}') \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \quad (7.37)$$

を得る. 但し, $\mathbf{\Gamma} = \mathbf{\Gamma}' + \Delta \mathbf{\Gamma}'_{\alpha;\beta}(\mathbf{\Gamma}')$ や $\mathbf{v}_{\alpha\beta}(\mathbf{\Gamma}')$ は, $\mathbf{\Gamma}'$ の関数に変化していることに注意. ここで,

$$\mathbf{v}_{\alpha\beta}(\mathbf{\Gamma}') \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta} = -\mathbf{v}'_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta} \quad (7.38)$$

に注目すると,

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{\Gamma}' P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma}' + \Delta \mathbf{\Gamma}'_{\alpha;\beta}(\mathbf{\Gamma}')) f(\mathbf{\Gamma}') |\mathbf{v}'_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \Theta(\mathbf{v}'_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \quad (7.39)$$

⁷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:

$$\frac{d|\hat{\mathbf{x}}|}{dt} = \frac{d}{dt} \sqrt{x^2 + y^2} = \frac{1}{2\sqrt{x^2 + y^2}} \left(2x \frac{dx}{dt} + 2y \frac{dy}{dt} \right) = \frac{\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{v}}}{|\hat{\mathbf{x}}|} = \hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{e}}. \quad (7.34)$$

更に変形を重ねると次の等式を得る：

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} d\Gamma P_t^{(N)}(\Gamma + \Delta\Gamma'_{\alpha;\beta}(\Gamma)) f(\Gamma) |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \Theta(\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\Gamma P_t^{(N)}(\Gamma + \Delta\Gamma_{\alpha;\beta}(\Gamma)) f(\Gamma) |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \Theta(\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}). \end{aligned} \quad (7.40)$$

但し、1行目でダミー変数の表記を書き換え ($\Gamma' \rightarrow \Gamma$)、2行目で時間反転対称性から出てくる等式 $\Delta\Gamma'_{\alpha;\beta}(\Gamma) = \Delta\Gamma_{\alpha;\beta}(\Gamma)$ を用いた⁸。つまり、 $f(\Gamma)$ を括り出すことが出来た。

以上を踏まえて式 (7.35) を整理すると、

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} d\Gamma f(\Gamma) \left[\frac{\partial P_t^{(N)}(\Gamma)}{\partial t} + \sum_{\alpha} \left(\mathbf{v}_{\alpha} \frac{\partial P_t^{(N)}(\Gamma)}{\partial \mathbf{x}_{\alpha}} - \frac{1}{m_{\alpha}} \frac{\partial U_{\text{EX}}}{\partial \mathbf{x}_{\alpha}} \frac{\partial P_t^{(N)}(\Gamma)}{\partial \mathbf{v}_{\alpha}} \right) \right] \\ &= \sum_{\alpha < \beta} \int_{-\infty}^{\infty} d\Gamma f(\Gamma) \left[P_t^{(N)}(\Gamma + \Delta\Gamma_{\alpha;\beta}) \Theta(\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) - P_t^{(N)}(\Gamma) \Theta(-\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \right] |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}). \end{aligned} \quad (7.41)$$

この恒等式は任意の関数 $f(\Gamma)$ について成立するので、式 (7.28) が $P_t^{(N)}(\Gamma)$ の時間発展方程式として導出される。

7.5 BBGKY 階層構造とボルツマン方程式

擬リウビル方程式 (7.28) 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、ボルツマン方程式という近似的な可解モデルを導出する。ボルツマン方程式を導出する前に、擬リウビル方程式を出発点に、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ボルツマン方程式、およびトレーサー粒子に対するボルツマン-ローレンツ方程式がそれぞれ導出される。

7.5.1 BBGKY 階層構造

まず少数体 (1 体・2 体) の分布関数を導入する：

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

更に、多体分布について対称性を仮定する：

$$P_t^{(N)}(\Gamma) = P_t^{(N)}(\Gamma'), \quad \Gamma' = (\mathbf{V}, \mathbf{X}; \mathbf{v}_{i_1}, \mathbf{x}_{i_1}; \dots; \mathbf{v}_{i_N}, \mathbf{x}_{i_N}) \quad (7.42)$$

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：

⁸非弾性衝突を考えると多少補正項が現れる。

$$\begin{aligned} \frac{D^{(1)}\phi_t^{(1)}}{Dt} &= \int d\mathbf{v}_2 d\mathbf{e} \sigma^G(\mathbf{v}_{12}, \mathbf{e}) [\phi_t^{(2)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{x}_1; \mathbf{v}'_2, \mathbf{x}_1 + r_G \mathbf{e}) - \phi_t^{(2)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1; \mathbf{v}_2, \mathbf{x}_1 - r_G \mathbf{e})] \\ &+ \frac{1}{N} \int d\mathbf{V} d\mathbf{e} \sigma^{(TG)}(\mathbf{v}_{10}, \mathbf{e}) [P_t^{(TG)}(\mathbf{V}', \mathbf{x}_1 + r_{TG} \mathbf{e}; \mathbf{v}'_1, \mathbf{x}_1) - P_t^{(TG)}(\mathbf{V}, \mathbf{x}_1 - r_{TG} \mathbf{e}; \mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1)], \end{aligned} \quad (7.43)$$

$$\frac{D^{(T)}P_t^{(T)}}{Dt} = \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{e} \sigma^{(TG)}(\mathbf{v}_{01}, \mathbf{e}) [P_t^{(TG)}(\mathbf{V}', \mathbf{X}_1; \mathbf{v}'_1, \mathbf{X}_1 + r_{TG} \mathbf{e}) - P_t^{(TG)}(\mathbf{V}, \mathbf{X}; \mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1 - r_{TG} \mathbf{e})]. \quad (7.44)$$

$$\sigma^{(G)}(\mathbf{v}, \mathbf{e}) := (N-1)r_G^2 \Theta(-\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}|, \quad \sigma^{(TG)}(\mathbf{v}, \mathbf{e}) := Nr_{TG}^2 \Theta(-\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}| \quad (7.45)$$

但し、ガス粒子とトレーサー粒子の平均半径 $r_{TG} := (r_T + r_G)/2$ と 1 体の Liouville 演算子

$$\frac{D^{(1)}}{Dt} := \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} - \frac{1}{m} \frac{\partial U_{EX}}{\partial \mathbf{x}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_1}, \quad \frac{D^{(T)}}{Dt} := \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{V} \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} - \frac{1}{M} \frac{\partial U_{EX}}{\partial \mathbf{X}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{V}}. \quad (7.46)$$

を導入した。但し、 \mathbf{e} に関する積分は単位球面上の積分を表す。

導出： 式 (7.28) を \mathbf{v}_1 と \mathbf{x}_1 以外で積分すると、

$$\begin{aligned} &\int \frac{D^{(N)}}{Dt} P_t^{(N)}(\Gamma) \prod_{i=0, i \geq 2} d\mathbf{v}_i d\mathbf{x}_i \\ &= \sum_{(\alpha < \beta) \wedge (\alpha, \beta \neq 1)} \int [P_t^{(N)}(\Gamma + \Delta\Gamma_{\alpha; \beta}) \Theta(\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) - P_t^{(N)}(\Gamma) \Theta(-\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta})] |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \prod_{i=0, i \geq 2} d\mathbf{v}_i d\mathbf{x}_i \\ &+ \sum_{\beta \neq 1} \int [P_t^{(N)}(\Gamma + \Delta\Gamma_{1; \beta}) \Theta(\mathbf{v}_{1\beta} \cdot \mathbf{e}_{1\beta}) - P_t^{(N)}(\Gamma) \Theta(-\mathbf{v}_{1\beta} \cdot \mathbf{e}_{1\beta})] |\mathbf{v}_{1\beta} \cdot \mathbf{e}_{1\beta}| \delta(|\mathbf{x}_{1\beta}| - r_{1\beta}) \prod_{i=0, i \geq 2} d\mathbf{v}_i d\mathbf{x}_i. \end{aligned} \quad (7.47)$$

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、キャンセルするはずである。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 (7.47) 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 (7.40) の $f(\Gamma)$ に $\delta(\mathbf{v}_1 - \mathbf{u}_1) \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{y}_1)$ を代入する⁹ と、 $\alpha, \beta \neq 1$ の時は¹⁰

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} P_t^{(N)}(\Gamma + \Delta\Gamma_{\alpha; \beta}) |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \Theta(\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \prod_{i=0, i \geq 2} d\mathbf{v}_i d\mathbf{x}_i \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} P_t^{(N)}(\Gamma) |\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}| \Theta(-\mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta}) \delta(|\mathbf{x}_{\alpha\beta}| - r_{\alpha\beta}) \prod_{i=0, i \geq 2} d\mathbf{v}_i d\mathbf{x}_i \end{aligned} \quad (7.49)$$

を得る。この関係式から式 (7.47) の 2 行目はキャンセルされる。

⁹ 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：

$$\int dx dy f(x, y) P(x, y) = \int dy P(x', y). \quad (7.48)$$

¹⁰ 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 (7.47) 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、

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} P_t^{(N)}(\mathbf{\Gamma} + \Delta\mathbf{\Gamma}_{1;2}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}| \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \delta(|\mathbf{x}_{12}| - r_G) \prod_{i=0, i \geq 2} d\mathbf{v}_i d\mathbf{x}_i \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{v}_2 d\mathbf{x}_2 \phi_t^{(2)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{x}_1; \mathbf{v}'_2, \mathbf{x}_2) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{21}| \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \delta(|\mathbf{x}_{12}| - r_G) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{v}_2 \int_0^{\infty} z^2 dz \int d\mathbf{e} \phi_t^{(2)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{x}_1; \mathbf{v}'_2, \mathbf{x}_2) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}| \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}) \delta(z - r_G) \\
&= r_G^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{v}_2 \int d\mathbf{e} \phi_t^{(2)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{x}_1; \mathbf{v}'_2, \mathbf{x}_1 - r_G \mathbf{e}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}| \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}) \quad (7.50)
\end{aligned}$$

を得る。但し \mathbf{x}_2 についての積分は、変数変換を行っている。具体的には積分変数を \mathbf{x}_2 から $\mathbf{x}_{12} := \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 = |\mathbf{x}_{12}| \mathbf{e}_{12}$ に変数変換すると、

$$\int d\mathbf{x}_2 [\dots] = \int d\mathbf{x}_{12} [\dots] = \int_0^{\infty} z^2 dz \int d\mathbf{e} [\dots], \quad \mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 - z\mathbf{e} \quad (7.51)$$

となる。但し、 $z := |\mathbf{x}_{12}|$, $\mathbf{e} := \mathbf{e}_{12}$ であり、 \mathbf{e} に関する積分は単位球面上の積分を表している。式 (7.50) の 4 行目のダミー変数の符号を置き換える ($\mathbf{e} \rightarrow -\mathbf{e}$) ことで、

$$\begin{aligned}
& r_G^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{v}_2 \int d\mathbf{e} \phi_t^{(2)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{x}_1; \mathbf{v}'_2, \mathbf{x}_1 - r_G \mathbf{e}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}| \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}) \\
&= r_G^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{v}_2 \int d\mathbf{e} \phi_t^{(2)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{x}_1; \mathbf{v}'_2, \mathbf{x}_1 + r_G \mathbf{e}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}| \Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}) \quad (7.52)
\end{aligned}$$

を得る。これらの等式を使うと、式 (7.43) の 1 行目が得られる。同様に式 (7.44) も得られる。

7.5.2 ボルツマン方程式

次に立方体中に閉じ込められた希薄ガスに対するボルツマン方程式を導出する。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。具体的には、次のボルツマン・グラッド極限を考える [40, 41]:

$$N \rightarrow \infty \text{ with } \eta_G := Nr_G^2 = \text{const. and } \eta_T := Nr_{TG}^2 = \text{const.} \quad (7.53)$$

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 ($r_G \rightarrow 0$) に対応している。この条件では次の分子カオスが正当化される:

$$\phi_t^{(2)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1; \mathbf{v}_2, \mathbf{x}_2) \simeq \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}_2, \mathbf{x}_2). \quad (7.54)$$

ここで式 (7.43) 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、ボルツマン方程式を得る:

$$\frac{D^{(1)}}{Dt} \phi_t^{(1)} \simeq \eta_G \int d\mathbf{v}_2 d\mathbf{e} [\phi_t^{(1)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{x}_1) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}'_2, \mathbf{x}_1) - \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}_2, \mathbf{x}_1)] \Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}|. \quad (7.55)$$

但し、 $r_G \rightarrow 0$ に伴い、 $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 \pm r_G \mathbf{e}$ は \mathbf{x}_1 に置き換えられた。

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

$$\int d\mathbf{v}_2 d\mathbf{e}_{12} [\phi_{\text{eq}}(\mathbf{v}'_1) \phi_{\text{eq}}(\mathbf{v}'_2) - \phi_{\text{eq}}(\mathbf{v}_1) \phi_{\text{eq}}(\mathbf{v}_2)] \Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}| = 0 \quad (7.56)$$

を充たすので、マクスウェル・ボルツマン分布が定常分布になる：

$$\phi_{\text{eq}}(\mathbf{v}) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-m\mathbf{v}^2/2k_B T}. \quad (7.57)$$

7.5.3 線形ボルツマン方程式

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：

$$P_t^{(\text{TG})}(\mathbf{V}, \mathbf{X}; \mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1) \simeq P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}, \mathbf{X}) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{x}_1). \quad (7.58)$$

結果、線型ボルツマン方程式を得る、

$$\frac{D^{(\text{T})}}{Dt} P_t^{(\text{T})} \simeq \eta_T \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{e} [P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}', \mathbf{X}) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{X}) - P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}, \mathbf{X}) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{X})] \Theta(-\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}|. \quad (7.59)$$

式 (7.59) 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。以下、線型ボルツマン方程式がマスター方程式の種々の性質と整合することを確認してみよう。

確率の保存

まずは確率の保存を確認しよう。確率の保存を調べるためには、両辺を \mathbf{V} と \mathbf{X} で積分してみよう。 $\int d\mathbf{V} d\mathbf{X} P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}, \mathbf{X}) = 1$ を充たす任意の $P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}, \mathbf{X})$ に対して、左辺は

$$\int d\mathbf{V} d\mathbf{X} \left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{V} \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} - \frac{1}{M} \frac{\partial U_{\text{EX}}}{\partial \mathbf{X}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{V}} \right] P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}, \mathbf{X}) = 0 \quad (7.60)$$

である。右辺の第1項を積分すると、

$$\begin{aligned} & \eta_T \int d\mathbf{X} d\mathbf{V} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{e} P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}', \mathbf{X}) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{X}) \Theta(-\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}| \\ &= \eta_T \int d\mathbf{X} d\mathbf{V}' d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{e} P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}', \mathbf{X}) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{X}) \Theta(\mathbf{v}'_{01} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{v}'_{01} \cdot \mathbf{e}| \\ &= \eta_T \int d\mathbf{X} d\mathbf{V}' d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{e} P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}', \mathbf{X}) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{X}) \Theta(-\mathbf{v}'_{01} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{v}'_{01} \cdot \mathbf{e}| \\ &= \eta_T \int d\mathbf{X} d\mathbf{V} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{e} P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}, \mathbf{X}) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{X}) \Theta(-\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}| \end{aligned} \quad (7.61)$$

である。ここで1行目から2行目にかけて積分変数を $(\mathbf{V}, \mathbf{v}_1)$ から $(\mathbf{V}', \mathbf{v}'_1)$ に変数変換した。この際、変数変換では位相空間の体積が変化しない事 ($d\mathbf{V} d\mathbf{v}_1 = d\mathbf{V}' d\mathbf{v}'_1$) を用いた。次に2行目から3行目にかけて、積分のダミー変数 \mathbf{e} を $-\mathbf{e}$ に書き換えた。最後に3行目から4行目にかけて、積分のダミー変数 $(\mathbf{V}', \mathbf{v}'_1)$ の表記を $(\mathbf{V}, \mathbf{v}_1)$ に置き換えた。よって、右辺の積分は

$$\eta_T \int d\mathbf{X} d\mathbf{V} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{e} [P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}', \mathbf{X}) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{X}) - P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}, \mathbf{X}) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{X})] \Theta(-\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}| = 0 \quad (7.62)$$

が任意の $P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}, \mathbf{X})$ に対して成立している。これは確率の保存と整合する。

マスター方程式の標準形への変形

実際、マスター方程式の標準形の条件を充たしている。この事確かめるために、線形ボルツマン方程式を変形する。まず恒等式

$$\int d\mathbf{Y} \delta \left(\mathbf{Y} - \frac{2m}{m+M} (\mathbf{v}_{10} \cdot \mathbf{e}) \mathbf{e} \right) = 1 \quad (7.63)$$

に着目すると

$$\begin{aligned} & \eta_{\Gamma} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{e} P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}', \mathbf{X}) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{X}) \Theta(-\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}| \\ &= \eta_{\Gamma} \int d\mathbf{Y} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{e} P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}', \mathbf{X}) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{X}) \Theta(-\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}| \delta \left(\mathbf{Y} - \frac{2m}{m+M} (\mathbf{v}_{10} \cdot \mathbf{e}) \mathbf{e} \right) \\ &= \int d\mathbf{Y} P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V} - \mathbf{Y}, \mathbf{X}) \eta_{\Gamma} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{e} \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{X}) \Theta(-\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}| \delta \left(\mathbf{Y} - \frac{2m}{m+M} (\mathbf{v}_{10} \cdot \mathbf{e}) \mathbf{e} \right) \end{aligned} \quad (7.64)$$

である。そこで、 $\mathbf{Z} := \mathbf{V} + \mathbf{Y} - \mathbf{v}_1$ と置いたうえで、

$$\lambda_t(\mathbf{Y}|\mathbf{V}, \mathbf{X}) := \eta_{\Gamma} \int d\mathbf{e} d\mathbf{v}_1 \delta \left(\mathbf{Y} - \frac{2m}{m+M} (\mathbf{Z} \cdot \mathbf{e}) \mathbf{e} \right) \phi_t^{(1)} \left(\mathbf{v}_1 + \frac{M}{m} \mathbf{Y} \right) \Theta(-\mathbf{Z} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{Z} \cdot \mathbf{e}| \geq 0, \quad (7.65)$$

を導入すれば、

$$\eta_{\Gamma} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{e} P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}', \mathbf{X}) \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}'_1, \mathbf{X}) \Theta(-\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}| = \int d\mathbf{Y} \lambda_t(\mathbf{Y}|\mathbf{V} - \mathbf{Y}, \mathbf{X}) P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V} - \mathbf{Y}, \mathbf{X}) \quad (7.66)$$

と変形できる。つまり、 $\lambda_t(\mathbf{Y}|\mathbf{V}, \mathbf{X})$ がジャンプ幅 \mathbf{Y} のイベントが発生する強度密度関数である。

ところで、確率の保存を表す恒等式 (7.62) に着目しよう。まずは式変形 (7.66) を踏まえた上で、恒等式 (7.62) を次のように書き直そう：

$$\int d\mathbf{X} d\mathbf{V} \left[-\lambda_{\text{tot};t}(\mathbf{V}, \mathbf{X}) P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}, \mathbf{X}) + \int d\mathbf{Y} \lambda_t(\mathbf{Y}|\mathbf{V} - \mathbf{Y}, \mathbf{X}) P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V} - \mathbf{Y}, \mathbf{X}) \right] = 0, \quad (7.67)$$

$$\lambda_{\text{tot};t}(\mathbf{V}, \mathbf{X}) := \eta_{\Gamma} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{e} \phi_t^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{X}) \Theta(-\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{v}_{01} \cdot \mathbf{e}|. \quad (7.68)$$

この恒等式は $\int d\mathbf{V} d\mathbf{X} P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}, \mathbf{X}) = 1$ を充たす任意の確率分布 $P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}, \mathbf{X})$ に対して成立するので、 $P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}, \mathbf{X}) = \delta(\mathbf{V} - \mathbf{U}) \delta(\mathbf{X} - \mathbf{W})$ と設定しても良い。但し、 \mathbf{U} と \mathbf{W} は任意の3次元ベクトルである。そうすると、

$$\lambda_{\text{tot};t}(\mathbf{U}, \mathbf{W}) = \int d\mathbf{Y} \lambda_t(\mathbf{Y}|\mathbf{U}, \mathbf{W}) \quad (7.69)$$

を得る。ここで引数を $\mathbf{U} \rightarrow \mathbf{V}, \mathbf{W} \rightarrow \mathbf{X}$ と置き換えて、線型ボルツマン方程式 (7.59) を整理すると

$$\frac{D^{(\text{T})}}{Dt} P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}, \mathbf{X}) = \int d\mathbf{Y} \left[\lambda_t(\mathbf{Y}|\mathbf{V} - \mathbf{Y}, \mathbf{X}) P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V} - \mathbf{Y}, \mathbf{X}) - \lambda_t(\mathbf{Y}|\mathbf{V}, \mathbf{X}) P_t^{(\text{T})}(\mathbf{V}, \mathbf{X}) \right] \quad (7.70)$$

の形に変形される。つまり線型ボルツマン方程式はまさにマスター方程式の標準形の枠内に入っている。

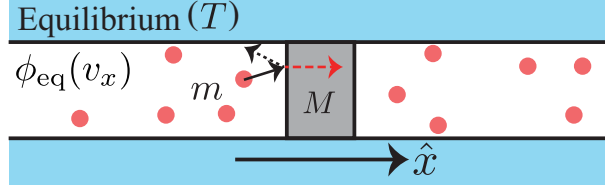


図 7.5: 1次元ブラウン運動としてのレイリーピストン. 質量 M の壁粒子が細いチューブに沿って動き, 質量 m のガス粒子と相互作用する (文献 [9] の図から引用).

7.6 具体例で遊ぶ

7.6.1 例 1: レイリーピストン

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レイリーピストンを考える (図 7.5). 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 軸方向にのみ動くことと仮定する. 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 $\phi_{\text{eq}}(v_x)$ はマクスウェル・ボルツマン分布しているとする:

$$\phi_{\text{eq}}(v_x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} e^{-mv_x^2/2k_B T}. \quad (7.71)$$

ガスが十分希薄ならば, 壁粒子の速度は線型ボルツマン方程式で記述できる [6, 37–39]:

$$\frac{\partial P_t(V)}{\partial t} = \rho S \int_{-\infty}^{\infty} dv_x |v_x - V| \{P_t(V') \phi_{\text{eq}}(v'_x) - P_t(V) \phi_{\text{eq}}(v_x)\}, \quad (7.72)$$

ただし $P_t(V) := P(\hat{V}(t) = V)$ 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,

$$V' := V - \frac{2m}{m+M}(V - v_x), \quad v'_x := v_x + \frac{2M}{m+M}(V - v_x). \quad (7.73)$$

は衝突後速度である. 式 (7.72) はマスター方程式の標準形に書き直すことができる,

$$\frac{\partial P_t(V)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} dY \{W_\varepsilon(Y; V - Y) P_t(V - Y) - W_\varepsilon(Y; V) P_t(V)\}. \quad (7.74)$$

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

$$W_\varepsilon(Y; V) = \rho S \frac{(1+\varepsilon)^2}{4\varepsilon^2} |Y| \phi_{\text{eq}}\left(V + \frac{1+\varepsilon}{2\varepsilon} Y\right). \quad (7.75)$$

と書いた. この式 (7.74) はランジュバン方程式のマスター方程式とは異なっている. これはランジュバン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 [6, 37, 38]. ここについては次の章で説明する.

7.6.2 例 2: ブラウンラチェット

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

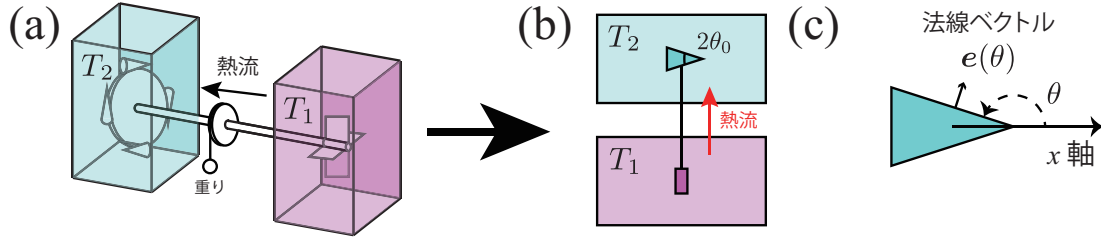


図 7.6: (a) 3次元系でのブラウンラチェット. (b) 本質的に等価な1次元系のブラウン運動. ブラウン粒子の形状は2次元だが, 粒子は1次元方向 (x 方向) にしか進まないとする. (文献 [33] の画像を縮小・改変して (a) として引用. (a) と (b) の両設定は文献 [42] に基づく.)

る. 例えば図 7.6(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, ブラウンラチェット (もしくはファインマンラチェット) 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 7.6(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:

$$\frac{\partial P_i(V)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} dY \{W_{\varepsilon}(Y; V-Y)P_i(V-Y) - W_{\varepsilon}(Y; V)P_i(V)\}. \quad (7.76)$$

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,

$$W_{\varepsilon}(Y; V) = \sum_{i=1,2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_{-\infty}^{\infty} dv_x dv_y \rho_i \phi_i(v_x, v_y) L_i F_i(\theta) [(\mathbf{V} - \mathbf{v}) \cdot \mathbf{e}(\theta)] \Theta((\mathbf{V} - \mathbf{v}) \cdot \mathbf{e}(\theta)) \\ \times \delta\left(Y + \frac{m}{M} B(\theta)(V - v_x + v_y \cot \theta)\right). \quad (7.77)$$

ここで ρ_i はガスの数密度, L_i は物体の全周長, $B(\theta) := 2M \sin^2 \theta / (M + m \sin^2 \theta)$, $\mathbf{e}(\theta) := (\sin \theta, -\cos \theta)$, $\phi_i(v_x, v_y) = m \exp[-m(v_x^2 + v_y^2)/2k_B T_i] / 2\pi k_B T_i$. $F_i(\theta)$ 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 7.6(b) の場合は $F_i(\theta)$ は次の式で与えられる:

$$F_1(\theta) = \frac{1}{2} (\delta(\theta - \pi/2) + \delta(\theta - 3\pi/2)) \quad (7.78)$$

$$F_2(\theta) = \frac{2\delta(\theta - 3\pi/2) \sin \theta_0 + \delta(\theta - \theta_0) + \delta(\theta - (\pi - \theta_0))}{2(1 + \sin \theta_0)}. \quad (7.79)$$

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 7.6) 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 [32] 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.

7.6.3 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

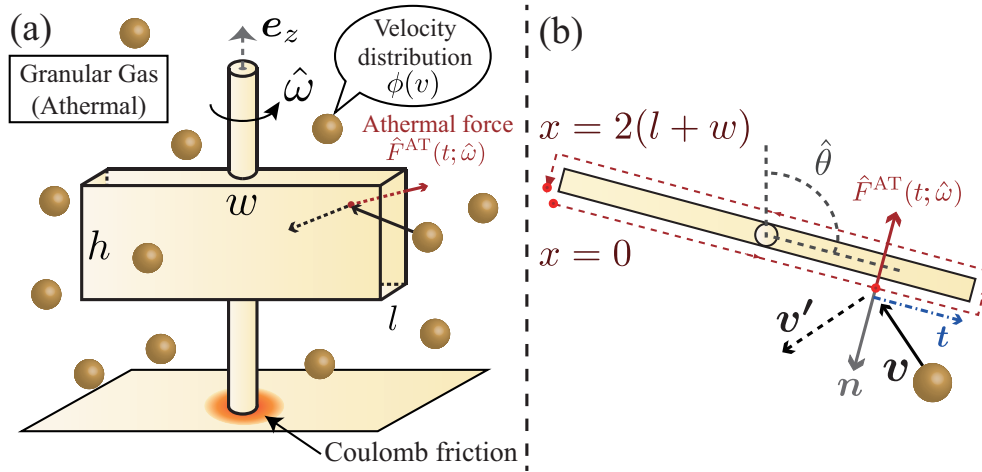


図 7.7: 希薄粉体ガス中のローター. 粉体は加振されて非平衡定常状態を保っており, 非平衡状態の粉体粒子がローターにぶつかる. 非平衡状態での「ブラウン運動」の例. 文献 [52] より引用.

(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 [45–50] と呼ばれる設定を考える (図 7.7a). 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 [36]. 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, 一般的にはマクスウェル・ボルツマン分布していない. 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,

$$F^{\text{fri}}(\hat{\omega}) = \gamma \text{sgn}(\hat{\omega}). \quad (7.80)$$

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

$$\frac{d\hat{\omega}}{dt} = F^{\text{fri}}(\hat{\omega}) + \hat{F}^{\text{AT}}(t; \hat{\omega}). \quad (7.81)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(\omega) = \gamma \frac{\partial}{\partial \omega} \text{sgn}(\omega) P_t(\omega) + \int dy [W_\varepsilon(y; \omega - y) P_t(\omega - y) - W_\varepsilon(y; \omega) P_t(\omega)], \quad (7.82)$$

で与えられる. ここでジャンプレートは

$$W_\varepsilon(y; \omega) = \rho h \int_0^{2(l+w)} ds \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{v} \phi(|\mathbf{v}|) \Theta(\Delta \mathbf{V}(s) \cdot \mathbf{n}(s)) |\Delta \mathbf{V}(s) \cdot \mathbf{n}(s)| \delta(y - \Delta \omega(s)), \quad (7.83)$$

であり, ρ は粉体ガスの数密度, γ は摩擦係数,

$$\mathbf{V}(s) := \omega \mathbf{e}_z \times \mathbf{r}(s), \quad g(s) := \frac{\mathbf{r}(s) \cdot \mathbf{t}(s)}{R_1}, \quad \mathbf{t}(s) := \mathbf{e}_z \times \mathbf{n}(s), \quad (7.84)$$

$$\Delta \mathbf{V}(s) := \mathbf{V}(s) - \mathbf{v}, \quad \Delta \omega := (1 + \varepsilon) \frac{\Delta \mathbf{V} \cdot \mathbf{n}}{R_1} \frac{\varepsilon g(s)}{1 + \varepsilon g^2(s)}. \quad (7.85)$$

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, $\varepsilon := m/M$ は質量比 (図 7.7b).

7.7 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

$$\frac{d\hat{V}}{dt} = \hat{\xi}_{W_\varepsilon(Y; \hat{V})}^{\text{CP}} \quad (7.86)$$

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。

7.8 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、色々な玩具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、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。

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t^{(1)}(x) = \underbrace{\mathcal{L}_1 P_t^{(1)}(x) + \mathcal{L}_2 P_t^{(2)}(x, x')}_{\text{2体衝突型だとここで切れる}} + \cdots + \mathcal{L}_N P_t^{(N)}(x, x_1, \dots) + \dots \quad (7.87)$$

- 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：

$$P_t^{(2)}(x, x') \simeq P_t^{(1)}(x) P_t^{(1)}(x'). \quad (7.88)$$

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、プリゴジン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 [43] 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 [44]。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 8

ランジュバン方程式の統計力学的導出

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 [5,6,37] 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。

8.1 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 8.1 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：

$$M \frac{d\hat{v}}{dt} = -\gamma \hat{v} + \hat{\xi}_T. \quad (8.1)$$

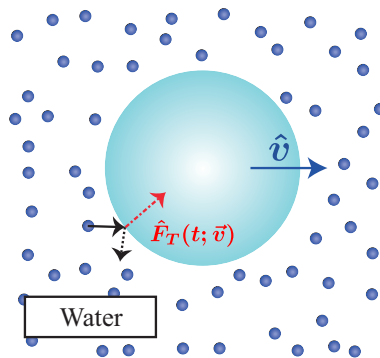


図 8.1: 水中のビーズのブラウン運動の絵。ビーズは水分子によって駆動され、ランダムに動く。(文献 [9] のものを引用)

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

$$\left\langle \frac{M}{2} \dot{v}^2 \right\rangle = \frac{1}{2} k_B T. \quad (8.2)$$

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 [51]：

$$c^2 = 2\gamma k_B T \iff \langle \hat{\xi}_T(t_1) \hat{\xi}_T(t_2) \rangle = 2\gamma k_B T \delta(t_1 - t_2). \quad (8.3)$$

8.1.1 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：

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \gamma \left[\frac{\partial}{\partial v} v + T \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] P_t(v). \quad (8.4)$$

但し、式 (2.60) を用いた。この定常解としてカノニカル分布が得られる：

$$P_{SS}(v) = \sqrt{\frac{M}{2\pi k_B T}} \exp \left[-\frac{Mv^2}{2k_B T} \right]. \quad (8.5)$$

但し、 $P_{SS}(v) \equiv \lim_{v \rightarrow \infty} P_t(v)$ 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。

8.1.2 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グリーン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、グリーン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。

8.2 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 (7.59) や (7.72) は、フォッカー・プランク方程式 (8.4) 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 [5,6,37]. 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.

8.2.1 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 7.6.1 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 (7.72) 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 (7.72) 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 (7.72) 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.

8.2.2 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。

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = \hat{\xi}_{W_\varepsilon(y;\hat{v})}^{CP}. \quad (8.6)$$

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：

$$\hat{\xi}_{W_\varepsilon(y;\hat{v})}^{CP} = \varepsilon \hat{\xi}_{\bar{W}(\mathcal{Y};\hat{v})}^{CP}(t). \quad (8.7)$$

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

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} dy [W_\varepsilon(y; v-y)P_t(v-y) - W_\varepsilon(y; v)P_t(v)], \quad (8.8)$$

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：

$$W_\varepsilon(y; v)dy = \bar{W}(\mathcal{Y}; v)d\mathcal{Y} \iff W_\varepsilon(y; v) = \frac{1}{\varepsilon} \bar{W}\left(\frac{y}{\varepsilon}; v\right). \quad (8.9)$$

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 (2.109)：

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\varepsilon)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial v^n} [\alpha_n(v)P_t(v)], \quad (8.10)$$

但し、 $\alpha_n(v)$ はクラマース・モヤル係数である

$$\alpha_n(v) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{Y} \bar{W}(\mathcal{Y}; v) \mathcal{Y}^n. \quad (8.11)$$

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：

$$\alpha_1^{(0)} = 0, \quad \alpha_1^{(1)} = -\gamma < 0, \quad \alpha_2^{(0)} = 2\gamma T > 0. \quad (8.12)$$

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」となんとなくアタリをつけて理解すれば良い。

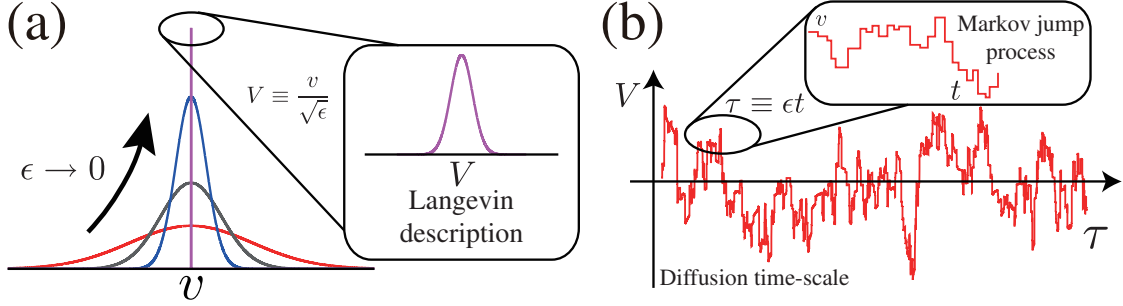


図 8.2: (a) 弱結合極限では、デルタ関数に定常分布が収束する．速度スケールを変数変換 V によってリスケールすることで、ランジュバン描像が有効なピーク近傍を拡大している．(b) マルコフジャンププロセスを粗視化するために、リスケールされた時間スケール τ で現象を見る．このスケールではジャンププロセスが拡散プロセスに見える．文献 [52] の図を改変して使用．

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： $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} P_{\text{SS}}(v) = \delta(v)$ (図 8.2(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 8.2(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：

$$V \equiv \frac{v}{\sqrt{\epsilon}}, \quad \tau \equiv \epsilon t. \quad (8.13)$$

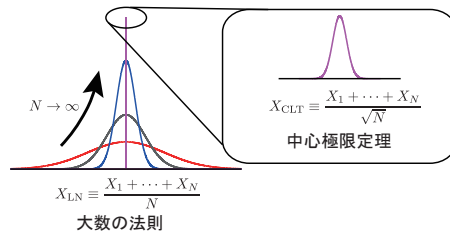
変数変換 $V \equiv v/\sqrt{\epsilon}$ は、ランジュバン描像が有効的に正しい領域である、分布のピークだけを拡大する変数変換である (図 8.2(a))．また変数変換 $\tau \equiv \epsilon t$ は、緩和時間の発散を取り除くために、時間スケールをリスケールする変数変換である (Fig. 8.2(b))²．上記の変数変換を用いて、クラマース・モヤル展開されたマスター方程式 (8.10) を更にテイラー展開する：

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_\tau(V)}{\partial \tau} &= \left[\frac{\partial}{\partial V} \gamma V - \sum_{k=2}^{\infty} \frac{\epsilon^{(k-1)/2}}{k!} \frac{\partial}{\partial V} V^k \alpha_1^{(k)} + \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \epsilon^{(n+k)/2-1}}{n!k!} \frac{\partial^n}{\partial V^n} V^k \alpha_n^{(k)} \right] P_\tau(V) \\ &= \gamma \left[\frac{\partial}{\partial V} V + T \frac{\partial^2}{\partial V^2} \right] P_\tau(V) + O(\epsilon^{1/2}), \end{aligned} \quad (8.14)$$

ここで式 (8.14) 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：

$$\frac{d\hat{V}}{d\tau} = -\gamma \hat{V} + \sqrt{2\gamma T} \hat{\xi}^G \iff \frac{d\hat{v}}{dt} = -\epsilon\gamma v + \epsilon\sqrt{2\gamma T} \hat{\xi}^G. \quad (8.15)$$

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 $X_{\text{LN}} \equiv (X_1 + \dots + X_N)/N$ と $X_{\text{CLT}} \equiv (X_1 + \dots + X_N)/\sqrt{N}$ を定義する．大数の法則・中心極限定理によれば、 X_{LN} は $\lim_{N \rightarrow \infty} P(X_{\text{LN}}) = \delta(X_{\text{LN}})$ 、 X_{CLT} は $\lim_{N \rightarrow \infty} P(X_{\text{CLT}}) = \exp(-X_{\text{CLT}}^2/2\sigma^2)/\sqrt{2\pi\sigma^2}$ 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 (8.14) 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。

8.2.3 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 7.6.1 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：

$$\varepsilon \ll 1 \iff m \ll M. \quad (8.16)$$

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ルリング (8.9) を有効的に充たしていることを確認する：

$$W_\varepsilon(y; V) = \rho S \frac{(1+\varepsilon)^2}{4\varepsilon^2} |Y| \phi_{eq} \left(V + \frac{1+\varepsilon}{2\varepsilon} y \right) \simeq \frac{1}{\varepsilon} \bar{W} \left(\frac{y}{\varepsilon}; V \right). \quad (8.17)$$

ここで ε に依存しない遷移率として

$$\bar{W}(y; V) = \frac{\rho S}{4} |y| \phi_{eq} \left(V + \frac{y}{2} \right) \quad (8.18)$$

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ルリング (8.9) 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 (8.14) 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：

$$\frac{d\hat{\mathcal{V}}}{d\tau} = -8\rho S \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi m}} \hat{\mathcal{V}} + 8\rho S \sqrt{\frac{(k_B T)^3}{2\pi m^3}} \hat{\xi}^G, \quad (8.19)$$

または、

$$M \frac{d\hat{V}}{dt} = -\gamma \hat{V} + \sqrt{2\gamma T} \hat{\xi}^G. \quad (8.20)$$

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 [37] 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ル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 (8.15) の導出に関わる、計算をまとめておく。マスター方程式 (7.72) に対するクラマース・モヤル展開は次の式で与えられる：

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(V) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\varepsilon)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial V^n} \alpha_n(V) P_t(V). \quad (8.21)$$

ここでクラマース・モヤル係数 α_n は

$$\alpha_n(V) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{Y} \mathcal{Y}^n \overline{W}(\mathcal{Y}; V) = \frac{\rho S}{4} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{Y} \mathcal{Y}^n |\mathcal{Y}| \phi_{eq} \left(V + \frac{\mathcal{Y}}{2} \right) \quad (8.22)$$

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

$$\alpha'_1(0) = \frac{\rho S}{2} \int_0^{\infty} d\mathcal{Y} \mathcal{Y}^2 \left. \frac{d\phi_{eq}(V + \mathcal{Y}/2)}{dV} \right|_{V=0} = -8\rho S \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi m}}, \quad (8.23)$$

$$\alpha_2(0) = \frac{\rho S}{2} \int_0^{\infty} d\mathcal{Y} \mathcal{Y}^3 \phi_{eq}(\mathcal{Y}/2) = 16\rho S \sqrt{\frac{(k_B T)^3}{2\pi m^3}}, \quad (8.24)$$

を得る。これらの結果は式 (8.19) を意味している。

8.2.4 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 7.6.2 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

$$\langle V \rangle = \varepsilon \rho_1 \rho_2 (1 - \sin^2 \theta_0) \sqrt{\frac{\pi k_B}{8M}} \frac{(T_1 - T_2) \sqrt{T_1}}{[2\rho_1 \sqrt{T_1} + \rho_2 \sqrt{T_2} (1 + \sin \theta_0)]^2} + O(\varepsilon^2). \quad (8.25)$$

となる。興味があれば文献 [42] の計算を追えばよい。

パウラの定理について

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パウラの定理 (Pawula's theorem) 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パウラの定理である。パウラの定理によれば、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

$$\alpha_{2k}(v) = 0 \text{ がある } k \geq 1 \text{ に対して成立するなら, } n \geq 3 \text{ で } \alpha_n(v) = 0 \quad (8.26)$$

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，

$$P^\varepsilon(v) = \frac{(1+\varepsilon)}{2} e^{-(1+\varepsilon)|v|} \quad (8.27)$$

に対して摂動展開すると，

$$P^\varepsilon(v) = P^{(0)}(v) + \varepsilon P^{(1)}(v) + \dots = \frac{1}{2} e^{-|v|} + \frac{\varepsilon(1-|v|)}{2} e^{-|v|} + \dots \quad (8.28)$$

但し，

$$P^{(0)}(v) = \frac{1}{2} e^{-|v|}, \quad P^{(1)}(v) = \frac{(1-|v|)}{2} e^{-|v|}. \quad (8.29)$$

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．

8.2.5 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：

$$\frac{d\hat{V}}{dt} = -\alpha(\hat{V}) + \beta(\hat{V}) \cdot \hat{\xi}^G. \quad (8.30)$$

ファン・カンペンはこの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。

8.3 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。詳細はファン・カンペン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。

8.3.1 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

$$\frac{\partial P_t(v)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} dy [W_\varepsilon(y; v-y)P(v-y, t) - W_\varepsilon(y; v)P_t(v)] \quad (8.31)$$

のカーネルが次のスケーリングを充たすとする：

$$W_\varepsilon(y; v)dy = \overline{W}(\mathcal{Y}; v)d\mathcal{Y} \iff W_\varepsilon(y; v) = \frac{1}{\varepsilon} \overline{W}\left(\frac{y}{\varepsilon}; v\right). \quad (8.32)$$

ここでクラマースモヤル展開

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(V) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\varepsilon)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial V^n} \alpha_n(V) P_t(V), \quad \alpha_n(V) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{Y} \mathcal{Y}^n \overline{W}(\mathcal{Y}; V) \quad (8.33)$$

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：

$$\alpha_1(V) = 0. \quad (8.34)$$

この場合、引き伸ばされた時間として

$$\tau \equiv \varepsilon^2 t \quad (8.35)$$

を導入する。この時間の定義は前の定義 (8.13) 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

$$\frac{\partial}{\partial \tau} P_\tau(V) = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-\varepsilon)^{n-2}}{n!} \frac{\partial^n}{\partial V^n} \alpha_n(V) P_\tau(V) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial V^2} \alpha_2(V) P_\tau(V) + O(\varepsilon) \quad (8.36)$$

となり，乗法的ノイズが現れる，

$$\frac{d\hat{V}}{dt} = \sqrt{\alpha_2(\hat{V})} \cdot \hat{\xi}^G. \quad (8.37)$$

8.3.2 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ルリングを充たすとする：

$$W_\varepsilon(y; v) = \frac{1}{\varepsilon} \left[\bar{W}_0 \left(\frac{y}{\varepsilon}; v \right) + \varepsilon \bar{W}_1 \left(\frac{y}{\varepsilon}; v \right) + \dots \right]. \quad (8.38)$$

この場合のクラマースモヤル展開は

$$\frac{\partial P_t(V)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \varepsilon^{n+m}}{n!} \frac{\partial^n}{\partial V^n} \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_{n,m}(V) P_t(V), \quad \alpha_{n,m}(V) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{Y} \mathcal{Y}^n \bar{W}_m(\mathcal{Y}; V) \quad (8.39)$$

である．ここで散逸が十分弱いと仮定する．具体的には

$$\alpha_{1,0}(V) = 0 \quad (8.40)$$

とする．この時，

$$\frac{\partial P_t(V)}{\partial t} = \varepsilon^2 \left[-\frac{\partial}{\partial V} \alpha_{1,1}(V) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial V^2} \alpha_{2,0}(V) \right] + O(\varepsilon^3). \quad (8.41)$$

となるので，引き延ばされた時間スケール (8.35) を導入すると， $\varepsilon \rightarrow 0$ 極限で

$$\frac{d\hat{V}}{dt} = \alpha_{1,1}(\hat{V}) + \sqrt{\alpha_{2,0}(\hat{V})} \cdot \hat{\xi}^G. \quad (8.42)$$

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．

8.3.3 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，固有値やグリーン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：

$$0 = \left[-\alpha_{1,1}(V) + \frac{1}{2} \frac{d}{dV} \alpha_{2,0}(V) \right] P_{SS}(V) \implies P_{SS}(V) = \frac{C}{\alpha_{2,0}(V)} \exp \left[2 \int dV \frac{\alpha_{1,1}(V)}{\alpha_{2,0}(V)} \right]. \quad (8.43)$$

8.4 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・空間のスケールリ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

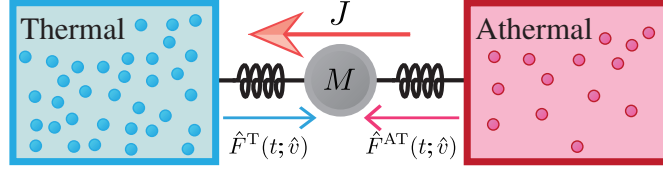


図 8.3: 「ブラウン」粒子が2つの環境に接しているとする。図は文献 [52] から引用。

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 7.6.3 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 8.3 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

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = \hat{F}^T(t; \hat{v}) + \hat{F}^{AT}(t; \hat{v}) \quad (8.44)$$

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

$$\hat{F}^T(t; \hat{v}) = -\gamma\hat{v} + \sqrt{2\gamma T}\hat{\xi}^G \quad (8.45)$$

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：

$$\hat{F}^{AT}(t; \hat{v}) = \varepsilon \hat{\xi}_{\bar{W}(\mathcal{Y}; \hat{v})}^P \iff W_\varepsilon(y; \hat{v}) = \frac{1}{\varepsilon} \bar{W}\left(\frac{y}{\varepsilon}; \hat{v}\right). \quad (8.46)$$

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、

$$\gamma \gg \gamma^{AT} \quad (8.47)$$

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：

$$T = \varepsilon^2 \mathcal{T} \quad (8.48)$$

但し、 \mathcal{T} は ε に寄らない定数。

これらの仮定を置くと、図 8.4 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

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(v) = \gamma \left[\frac{\partial}{\partial v} v + \varepsilon^2 \mathcal{T} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] P_t(v) + \int dy [W_\varepsilon(y; v-y) P_t(v-y) - W_\varepsilon(y; v) P_t(v)]. \quad (8.49)$$

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。

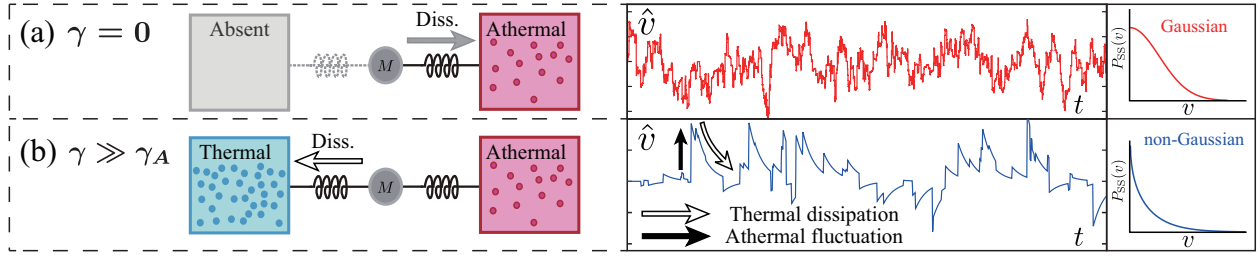


図 8.4: 熱散逸が十分大きい仮定をおく. 散逸は主に熱揺らぎから寄与し, 揺動は非熱揺らぎから寄与する. つまり, 揺動と散逸の起源が明瞭に分離する. 図は文献 [52] から引用.

ここでスケール変数として

$$V = \frac{v}{\varepsilon} \quad (8.50)$$

を導入する. このスケール変数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

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P_t(V) &= \gamma \left[\frac{\partial}{\partial V} V + \mathcal{T} \frac{\partial^2}{\partial V^2} \right] P_t(v) + \int d\mathcal{Y} [\bar{W}(\mathcal{Y}; \varepsilon(V - \mathcal{Y})) P_t(V - \mathcal{Y}) - \bar{W}(\mathcal{Y}; \varepsilon V) P_t(V)] \\ &= \gamma \left[\frac{\partial}{\partial V} V + \mathcal{T} \frac{\partial^2}{\partial V^2} \right] P_t(v) + \int d\mathcal{Y} \bar{W}(\mathcal{Y}; 0) [P_t(V - \mathcal{Y}) - P_t(V)] + O(\varepsilon) \end{aligned} \quad (8.51)$$

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,

$$\frac{d\hat{V}}{dt} = -\gamma V + \sqrt{2\gamma\mathcal{T}} \hat{\xi}^G + \hat{\xi}^{\text{NG}}, \quad \hat{\xi}^{\text{NG}} = \hat{\xi}_{\bar{W}(\mathcal{Y}; 0)}^{\text{CP}}(t). \quad (8.52)$$

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

$$P_{\text{SS}}(V) = \int \frac{ds}{2\pi} \exp \left[-isV + \int_0^s \frac{ds' \Phi(s')}{\gamma s'} \right], \quad \Phi(s) \equiv \int d\mathcal{Y} \bar{W}(\mathcal{Y}; 0) (e^{is\mathcal{Y}} - 1) \quad (8.53)$$

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 [52] 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 8.5 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.

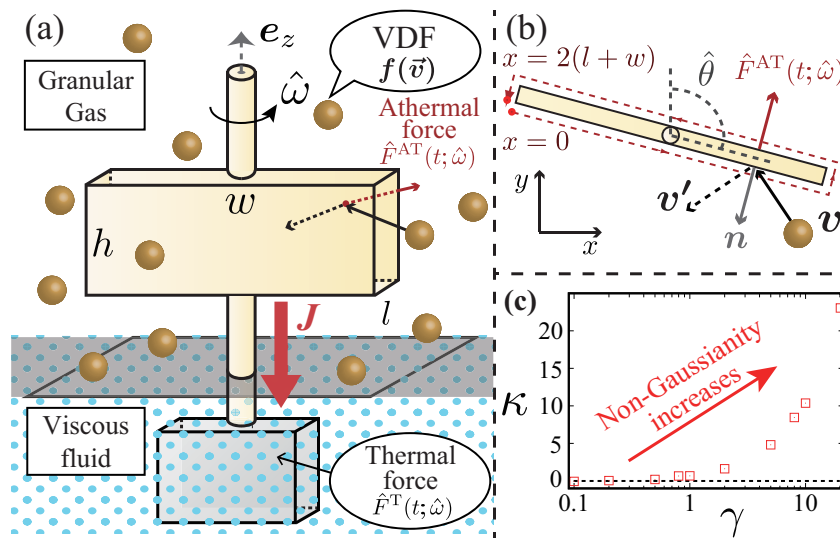


図 8.5: 熱散逸が十分大きい仮定をおく. 散逸は主に粘性流体から寄与し, 揺動は粉体の衝突から寄与する. つまり, 揺動と散逸の起源が明瞭に分離する. 図は文献 [52] から引用.

Appendix A

省略した計算・証明など

A.1 3次以上の次数での伊藤ルール (3.24) の証明

ここでは伊藤ルール (3.24) を $n \geq 3$ の条件で示す. 伊藤ルールの等式は平均二乗収束の意味で成立することを踏まえ, まずは時間について離散化を行った状態で計算を行う:

$$\begin{aligned}
 \left\langle \left[\sum_{i=0}^{N-1} f(\hat{v}_i) \Delta W_i^n \right]^2 \right\rangle &= \left\langle \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} f(\hat{v}_i) f(\hat{v}_j) \Delta W_i^n \Delta W_j^n \right\rangle \\
 &= \left\langle \sum_{i=0}^{N-1} \underbrace{f^2(\hat{v}_i)}_{\text{過去}} \Delta W_i^{2n} \right\rangle + 2 \left\langle \sum_{i,j | i>j} \underbrace{f(\hat{v}_i) f(\hat{v}_j) \Delta W_j^n \Delta W_i^n}_{\text{過去}} \right\rangle \\
 &= \left\langle \sum_{i=0}^{N-1} f^2(\hat{v}_i) \right\rangle \underbrace{\langle \Delta W_i^{2n} \rangle}_{=o(\Delta t_i)} + 2 \left\langle \sum_{i,j | i>j} f(\hat{v}_i) f(\hat{v}_j) \Delta W_j^n \right\rangle \underbrace{\langle \Delta W_j^n \rangle}_{=o(\Delta t_i)} = o(|\Delta t|) \quad (\text{A.1})
 \end{aligned}$$

よって, 平均二乗収束の意味で

$$\lim_{|\Delta t| \rightarrow 0} \left\langle \left[\sum_{i=0}^{N-1} f(\hat{v}_i) \Delta W_i^n \right]^2 \right\rangle = 0 \quad (\text{A.2})$$

が成り立つため, 伊藤ルール (3.24) は $n \geq 3$ でも成立する.

A.2 パウラの定理の証明

ここではパウラの定理 4.1.1 を証明する. 本証明は Risken の教科書 [7] をベースに構成した.

準備 1: 係数についての不等式

まず, 積分系でのコーシー・シュワルツの不等式を考える (証明は付録 A.3 を参照):

$$\left[\int f(y) g(y) P(y) dy \right]^2 \leq \left[\int f^2(y) P(y) dy \right] \left[\int g^2(y) P(y) dy \right]. \quad (\text{A.3})$$

但し, $f(y)$ と $g(y)$ は任意の関数, $P(y) \geq 0$ は任意の非負関数である. ここで

$$f(y) = y^n, \quad g(y) = y^{n+m}, \quad P(y) = \lambda_t(y|v) \geq 0 \quad (\text{A.4})$$

を代入する. 但し, n, m は非負整数である. 結果, クラマース・モヤル係数についての不等式

$$(\alpha_{2n+m}^2)^2 \leq \alpha_{2n} \alpha_{2n+2m} \quad (\text{A.5})$$

が導出される.

準備 2：不等式から導出される係数の制限

まず、ある非負整数 n について、

$$\alpha_{2n} = 0 \implies \alpha_{2n+m} = 0 \text{ for all integer } m \geq 0 \quad (\text{A.6})$$

が言える。また、ある非負整数 $n \geq 0, m \geq 1$ に対して

$$\alpha_{2n+2m} = 0 \implies \alpha_{2n+m} = 0 \quad (\text{A.7})$$

が成立する。

証明

今、仮定としてある整数 $k \geq 2$ において、 $\alpha_{2k} = 0$ だと仮定する。この時、関係式 (A.6) を用いると、

$$\alpha_{2k+1} = \alpha_{2k+2} = \cdots = 0 \quad (\text{A.8})$$

が成立する。つまり、 $2k$ 次を含む、高次の項は全て存在しないことが証明された。

次に、 $2k$ 次以下の項についても考察しよう。まずは具体例として、 $k = 3$ の場合を考える (つまり $\alpha_6 = 0$)。ここで、 $2n + 2m = 6$ となる $n \geq 0, m \geq 1$ の組み合わせとして、 $(n, m) = (1, 2), (2, 1)$ が存在する。つまり、この 2 パターンについて関係式 (A.7) を適用すると $\alpha_4 = \alpha_5 = 0$ が証明できる。更に、 $\alpha_4 = 0$ が示されたのだから $2n + 2m = 4$ を充たす組み合わせとして $(n, m) = (1, 1)$ があり、関係式 (A.7) を適用すると $\alpha_3 = 0$ が証明できる。

この論理は一般的な k について拡張することが出来る。つまり、

$$\alpha_{2k} = 0 \implies \alpha_{k+1} = \cdots = \alpha_{2k-1} = 0 \quad (\text{A.9})$$

が示される。関係式 (A.9) を繰り返して用いることで、

$$\alpha_{2k} = 0 \implies \alpha_3 = \alpha_4 = \cdots = \alpha_{2k-1} \quad (\text{A.10})$$

を得る。よって、関係式 (A.8) と (A.10) を組み合わせることでパウラの定理が証明される。

A.3 積分型のコーシー・シュワルツの不等式 (A.3) の証明

任意の $t \in \mathbf{R}$ に対して、

$$\int [tf(y) + g(y)]^2 P(y) dy \geq 0 \quad (\text{A.11})$$

が自明に成立する。つまり、

$$h(t) := t^2 \left[\int f^2(y) P(y) dy \right] + 2t \left[\int f(y)g(y) P(y) dy \right] + \left[\int g^2(y) P(y) dy \right], \quad h(t) \geq 0. \quad (\text{A.12})$$

これが意味することは、2 次方程式 $h(t) = 0$ は実数解を持たないか、持つとしてもそれは重解である。つまり、2 次方程式の判別式は非負である。つまり、

$$\left[\int f(y)g(y) P(y) dy \right]^2 - \left[\int f^2(y) P(y) dy \right] \left[\int g^2(y) P(y) dy \right] \geq 0 \quad (\text{A.13})$$

を得る。これは積分型のコーシー・シュワルツの不等式 (A.3) である。

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] K. Klafter and I.M. Sokolov (秋元琢磨 訳), *ランダムウォーク はじめの一步：自然現象の解析を見すえて* (共立出版, 2018).
- [12] J.D. Hamilton, *Time Series Analysis* (Princeton University Press, 1994).
- [13] A. Dassios and H. Zhao, A dynamic contagion process, *Adv. Appl. Probab.* **43**, 814 (2011).
- [14] K. Kanazawa and D. Sornette, Field master equation theory of the self-excited Hawkes process, *Phys. Rev. Research* **2**, 033442 (2020).
- [15] K. Kanazawa and D. Sornette, Nonuniversal Power Law Distribution of Intensities of the Self-Excited Hawkes Process: A Field-Theoretical Approach, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 138301 (2020).
- [16] K. Kanazawa and D. Sornette, Ubiquitous power law scaling in nonlinear self-excited Hawkes processes, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 188301 (2021).
- [17] K. Kanazawa and D. Sornette, Asymptotic solutions to nonlinear Hawkes processes: A systematic classification of the steady-state solutions, *Phys. Rev. Research* **5**, 013067 (2023).
- [18] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistical and Polymer Physics*, 5th ed. (World Scientific, Singapore, 2009).

- [19] N.G. van Kampen, *Can. J. Phys.* **39**, 551 (1961).
- [20] T. Li, S. Kheifets, D. Medellin, and M.G. Raizen, *Science* **328**, 1673 (2010).
- [21] S. Kheifets, A. Simha, K. Melin, T. Li, and M.G. Raizen, *Science* **343**, 1493 (2014).
- [22] 早川尚男, 非平衡統計力学 (サイエンス社, 2007) .
- [23] J.-P. Hansen and I.R. McDonald, *Theory of Simple Liquids*. 4th ed. Academic Press (2013).
- [24] A. Siegel, *J. Math. Phys.* **1**, 378 (1960).
- [25] C.T.J. Alkemade, N.G. van Kampen, and D.K.C. MacDonald, *Proc. Roy. Soc. Lond. Ser. A* **271**, 449 (1963).
- [26] H. Lorentz, *Arch. Néerl.* **10**, 336 (1905).
- [27] N.V. Brilliantov and T.Pöschel, *Kinetic of Theory of Granular Gases*, Oxford, (2003).
- [28] G. Gallavotti, *Phys. Rev.* **185**, 308 (1969).
- [29] H. Spohn, *Comm. Math. Phys.* **60**, 277 (1978).
- [30] C. Boldrighini, L.A. Bunimovich, and Y.G. Sinai, *J. Stat. Phys.* **32**, 477 (1983).
- [31] C. Cercignani, R. Illner, M. Pulvirenti: *The mathematical theory of dilute gases*. Applied Mathematical Sciences **106** (New York: Springer-Verlag, 1994).
- [32] A. Fruleux, R. Kawai, and K. Sekimoto, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 160601 (2012).
- [33] 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).
- [34] S. Chapman and T.G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases* (Cambridge University Press, Cambridge, 1970), 3rd ed.
- [35] P. Résibois and M. de Leener, *Classical Kinetic Theory of Liquids* (Wiley, New York, 1977).
- [36] N.V. Brilliantov and T.Pöschel, *Kinetic of Theory of Granular Gases* (Oxford University Press, Oxford, 2003).
- [37] N.G. van Kampen, *Can. J. Phys.* **39**, 551 (1961).
- [38] C.T.J. Alkemade, N.G. van Kampen, and D.K.C. MacDonald, *Proc. Roy. Soc. Lond. Ser. A* **271**, 449 (1963).
- [39] A. Siegel, *J. Math. Phys.* **1**, 378 (1960).
- [40] H. Grad, *Commun. Pure Appl. Math.* **2**, 331 (1949).
- [41] C. Cercignani, *Trans. Theory Stat. Phys.* **2**, 211 (1972).
- [42] 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).
- [43] L. Pareschi and G. Toscani, *Interacting multiagent systems: kinetic equations and Monte Carlo methods* (Oxford University Press, Oxford, 2013).

- [44] K. Kanazawa, T. Sueshige, H. Takayasu, and M. Takayasu, Phys. Rev. Lett. **120**, 138301 (2018); Phys. Rev. E **98**, 052317 (2018).
- [45] P. Eshuis, K. van der Weele, D. Lohse, and D. van der Meer, Phys. Rev. Lett. **104**, 248001 (2010).
- [46] J. Talbot, R.D. Wildman, and P. Viot, Phys. Rev. Lett. **107**, 138001 (2011).
- [47] A. Gnoli, A. Petri, F. Dalton, G. Pontuale, G. Gradenigo, A. Sarracino and A. Puglisi, Phys. Rev. Lett. **110**, 120601 (2013).
- [48] A. Gnoli, A. Puglisi, and H. Touchette, Europhys. Lett. **102**, 14002 (2013).
- [49] A. Gnoli, A. Sarracino, A. Puglisi, and A. Petri, Phys. Rev. E **87**, 052209 (2013).
- [50] L.O. Gálvez and D. van der Meer, J. Stat. Mech. (2016) 043206.
- [51] R. Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume, *Statistical Physics II*, 2nd ed. (Springer, Berlin, 1991).
- [52] K. Kanazawa, T.G. Sano, T. Sagawa, and H. Hayakawa, Minimal Model of Stochastic Athermal Systems: Origin of Non-Gaussian Noise, Phys. Rev. Lett. **114**, 090601 (2015); Asymptotic derivation of Langevin-like equation with non-Gaussian noise and its analytical solution, J. Stat. Phys. **160**, 1294 (2015).