

力学過程と確率過程

北島, 一徳
九州大学応用力学研究所 : 教授

<https://doi.org/10.15017/4743682>

出版情報 : 應用力學研究所所報. 57, pp.625-630, 1982-10. 九州大学応用力学研究所
バージョン :
権利関係 :



力学過程と確率過程

北 島 一 徳*

概 要

微視的には運動方程式により記述される力学過程と、その巨視的な挙動を統計的に記述する確率過程を結ぶ近似を含まない一般的な関係式が提出された。統計の状態の時間的変化は遷移確率密度の連続の式—微積分方程式—で表わされ、その中で拡散項は時間空間的に相異なる2点での速度成分間の相関を通じて運動方程式に結びつけられ、またそれを用いて時間空間的な積分の形に表現された。

この表式は $6N$ 次元位相空間における力学的過程について前報で導かれたものであるが、本報では連続な速度を持つ一般的な確率過程についても同一の式を導き得ることが示され、両者の関係および表式の意味について議論がなされた。

Key words: Dynamical process, Stochastic process, Statistical Mechanics, Correlation Function.

1. 序 論

一般に力学的過程では初期条件および境界条件を与えると運動方程式により系の時間的経過は唯一に決定される。しかし力学系の自由度が大きい場合には運動方程式を解くことは一般に困難であるから、通常観測にかかり得るある種の平均量について統計的な取り扱いがなされる。すなわち確率過程として記述される。そこでは系の時間的発展は確率的法則によって与えられている。一方力学の立場からは確率的法則と運動方程式の間の関係を明らかにし、さらに進んで運動方程式を用いて確率法則を決定したい。このような目的については非可逆過程の統計力学が良く知られている¹⁾。しかしこの理論では系が熱平衡に近いことを前提としており、また系をマルコフ過程として近似するなどいくつかの仮定の下に導かれた近似理論にはかならないので、これらを前提としない力学系に対してはその適用は制限される。

一方我々は前報において N 個の粒子より成る閉じた力学系について粒子間の力の相関関数についての新しい定義を導入することにより系の統計的な時間的発展を記述する近似を含まない関係式を提出し上述非可逆過程の理論との関係を論じた²⁾⁷⁾。本報では前報に導いた表式が、その導かれた制限された力学系のみでなくより広い一般的な確率過程についても比較的簡単な制限条件の下で成立することを示したい。これによって種々の理論における種々の定式化の間の関係を明らかにし、また用いられている近似の意味をも明らかにし得ると考えられるからである。

* 九州大学教授, 応用力学研究所

2. 一般的な確率過程と種々の確率分布函数, 平均値, 相関函数の定義

いま力学系として N 個の粒子より成る閉じた力学系を取りその中の 1 個の粒子の運動を考える. 粒子の位置および速度を $x_i, u_i; i = 1, 2, 3$ とすれば粒子の運動は運動方程式

$$\begin{aligned}\frac{dx_i}{dt} &= u_i, \\ \frac{du_i}{dt} &= F_i(x_i, u_i, t; \omega),\end{aligned}\quad (1)$$

によって与えられる. ここに ω は N 個の粒子の運動の初期条件に対応するものであり, ω の値に対応して粒子の軌道

$$\begin{aligned}x_i &= x_i(t, \omega), \\ u_i &= u_i(t, \omega),\end{aligned}\quad (2)$$

が決定される. 従って系の統計的状态は $6N$ 次元位相空間における初期分布密度を与えることにより決定される. 前報ではこの力学過程において条件付確率分布密度 $\psi(x_i, t; x_{i,0}, t_0)$ すなわち時刻 t_0 において $x_{i,0}$ に存在した粒子が時刻 t において x_i に存在する確率密度, の時間的发展を記述する式, すなわち ψ の連続の式 (拡散方程式または輸送方程式) を導いた.

ここでは前述の力学的過程から離れて一般的な確率過程

$$\{x_i(t, \omega), u_i(t, \omega)\}, \quad a \leq t \leq b; \omega \in \Omega, \quad (3)$$

を考える. ここに $x_i(t, \omega), u_i(t, \omega)$ は集合 Ω 内の点 ω について定められる t の実函数であり, $x_i(t, \omega)$ は連続微分可能で $u_i(t, \omega) = \frac{dx_i(t, \omega)}{dt}$ とする. Ω は $a \leq t \leq b$ 上のすべての実函数 $f(t)$ の集合—函数空間—であり, Ω 内の任意のボレル部分集合について x_i, u_i の確率分布が与えられているすなわち確率過程 (3) が定義されているとする⁹⁾.

このように定義された一般的な確率過程には上述の $6N$ 次元の閉じた力学系は勿論, 連続体の力学系などより広い力学系のみでなく, (1) のような決定論的な運動方程式の代りに確率論的な運動法則に支配されている系をも含めることができる. 以下簡単のために添字 i は省略し種々の定義を導入する.

時刻 t における確率変数の空間を (x, u, t) とし, 粒子が区間 $(x, x+dx), (u, u+du)$ に存在する確率密度

$$\rho(x, u, t) dx du. \quad (4)$$

時刻 t_1 で $(x_1; u_1)$ に存在し, 時刻 t_2 で (x_2, u_2) に存在する結合確率密度

$$\rho(x_1, u_1, t_1; x_2, u_2, t_2) dx_1 du_1 \cdot dx_2 du_2, \quad (5)$$

定義から

$$\iint \rho(x_1, u_1, t_1; x_2, u_2, t_2) dx_2 du_2 = \rho(x_1, u_1, t_1).$$

時刻 t_1 で (x_1, u_1) に存在した粒子が時刻 t_2 において (x_2, u_2) に存在する条件付確率密度, または遷移確率密度

$$\begin{aligned} & \psi(x_2, u_2, t_2/x_1, u_1, t_1) dx_2 du_2 \\ & \iint \psi(x_2, u_2, t_2/x_1, u_1, t_1) dx_2 du_2 = 1. \end{aligned} \quad (6)$$

(5) は (4), (6) とつぎのように結ばれる.

$$\begin{aligned} \rho(x_1, u_1, t_1; x_2, u_2, t_2) \\ = \rho(x_1, u_1, t_1) \psi(x_2, u_2, t_2/x_1, u_1, t_1), \end{aligned} \quad (7)$$

$$= \rho(x_2, u_2, t_2) \psi(x_1, u_1, t_1/x_2, u_2, t_2), \quad (7')$$

ここに $\psi(x_1, u_1, t_1/x_2, u_2, t_2)$ は $t_2 > t_1$ であるから後向き遷移確率密度と名付けてよい.

一方時刻 t , 部分空間 (x) における確率密度

$$\rho(x, t) = \int \rho(x, u, t) du. \quad (8)$$

(x, t) における u の平均値

$$\rho(x, t) \bar{u}(x, t) = \int u \rho(x, u, t) du. \quad (9)$$

時刻 t_1 において x_1 に存在した粒子が t_2 において x_2 に存在する 条件付確率密度 または 遷移確率密度

$$\psi(x_2, t_2/x_1, t_1) = \iint \rho(x_1, u_1, t_1) \psi(x_2, u_2, t_2/x_1, u_1, t_1) du_1 du_2 / \rho(x_1, t_1), \quad (10)$$

$$\psi(x_1, t_1/x_2, t_2) = \iint \rho(x_2, u_2, t_2) \psi(x_1, u_1, t_1/x_2, u_2, t_2) du_1 du_2 / \rho(x_2, t_2). \quad (10')$$

Chapmann-Smoluchowsky の式

$$\rho(x_2, t_2) = \int \rho(x_1, t_1) \psi(x_2, t_2/x_1, t_1) dx_1. \quad (11)$$

(x_1, t_1) における u_1 と (x_2, t_2) における u_2 の相関関数

$$\begin{aligned} R(x_1, t_1; x_2, t_2) &= \left\langle \iint u_1 u_2 \rho(x_1, u_1, t_1; x_2, u_2, t_2) du_1 du_2 \right\rangle \\ &= \left\langle \iint \rho(x_1, u_1, t_1; x_2, u_2, t_2) du_1 du_2 \right\rangle. \end{aligned} \quad (12)$$

時刻 t_2 において x_2 に来る粒子が (x_1, t_1) において持つ u_1 の条件付平均値

$$\begin{aligned} U(x_1, t_1; x_2, t_2) &= \left\langle \iint u_1 \rho(x_1, u_1, t_1; x_2, t_2) du_1 du_2 \right\rangle \\ &= \left\langle \iint \rho(x_1, u_1, t_1; x_2, u_2, t_2) du_1 du_2 \right\rangle. \end{aligned} \quad (13)$$

(12) (13) の左辺の分母は (7'), (10') を用いて,

$$\iint \rho(x_1, u_1, t_1; x_2, u_2, t_2) du_1 du_2 = \rho(x_2, t_2) \psi(x_1, t_1/x_2, t_2). \quad (14)$$

$$= \rho(x_1, t_1) \psi(x_2, t_2/x_1, t_1) \quad (14')$$

3. 条件付確率密度の連続の式

つぎに我々はここで一本の軌道 $x(t, \omega)$, $u(t, \omega)$ に沿って一定値を保つ量 θ を導入し, 重価函数と名付ける (または軌道の定義函数と言ってもよい). またとくに時刻 t_1 において x_1 を通る軌道に沿っては一定値=1 を持ち, その他の軌道に沿っては0となる量を考える. この θ は上述の定義から函数空間 $\mathcal{Q}$ 上で定義し得てその確率分布をも定め得る量であるから 確率変数として取り扱うことができる. そこでこの θ の (x_2, t_2) における平均値を

$$\rho(x_2, t_2) \bar{\theta}(x_2, t_2/x_1, t_1) = \int \rho(x_2, u_2, t_2) \theta \, du_2 \quad (15)$$

とすればこれは θ の意味から遷移確率密度 $\psi(x_2, t_2/x_1, t_1)$ を定義するものに外ならない. すなわち,

$$\rho(x_2, t_2) \bar{\theta}(x_2, t_2/x_1, t_1) = \rho(x_1, t_1) \psi(x_2, t_2/x_1, t_1) \quad (16)$$

さて部分空間 (x, t) における確率密度 $\rho(x, t)$ の連続の式は (x, u, t) の空間における $\rho(x, u, t)$ の流れの考察から

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x} (\bar{u} \rho) = 0 \quad (17)$$

となる. 一方遷移確率密度 $\psi(x_2, t_2/x_1, t_1)$ の連続の式は重価函数 θ の (x, u, t) 空間における流れの考察から

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \bar{\theta} + \frac{\partial}{\partial x} \int \rho u \theta \, du = 0. \quad (18)$$

ここに

$$\begin{aligned} u &= \bar{u} + u - \bar{u}, \\ \theta &= \bar{\theta} + \theta - \bar{\theta} \end{aligned}$$

と記し (18) の第2項は

$$\int \rho u \theta \, du = \rho \bar{u} \bar{\theta} + \int \rho (u - \bar{u})(\theta - \bar{\theta}) \, du, \quad (19)$$

となる.

いま $(\theta - \bar{\theta})_{x, t}$ を軌道に沿った積分で置き換える.

$$(\theta - \bar{\theta}) = \int_0^t \frac{d}{ds} (\theta - \bar{\theta}) \, ds + (\theta - \bar{\theta})_{t=0}. \quad (20)$$

θ の定義から

$$\frac{d}{ds} \theta = 0, \quad (\theta - \bar{\theta})_{t=0} = 0.$$

また軌道に沿った微分 $\frac{d}{ds}$ は (x, t) 空間では

$$\left(\frac{d}{ds} \right)_{\substack{\tau=\xi \\ t=\tau}} = \frac{\partial}{\partial \tau} + u' \frac{\partial}{\partial \xi}, \quad (u)_{\substack{\tau=\xi \\ t=\tau}} = u', \quad (21)$$

と書き表わされるから (20) は

$$(\theta - \bar{\theta})_{x,t} = \int_0^t \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + u' \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \bar{\theta} ds, \quad (22)$$

従って (19) の右辺の第 2 項は

$$\begin{aligned} & \int \rho(x, u, t) (u - \bar{u}) (\theta - \bar{\theta}) du \\ &= - \int \dots \int \rho(x, u, t; \xi, u', \tau) (u - \bar{u}) \left(-\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial \tau} + u' \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial \xi} \right) du du' d\xi d\tau \\ &= - \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} \left(U \frac{\partial}{\partial \tau} \bar{\theta} + R \frac{\partial}{\partial \xi} \bar{\theta} \right) \rho(x, t) \psi(\xi, \tau/x, t) d\xi d\tau, \end{aligned} \quad (23)$$

と書き換えられる。ただしここに

$$\begin{aligned} U &= U(\xi, \tau; x, t) = \left\langle \int \int (u - \bar{u})_{x,t} \rho(x, u, t; \xi, u', \tau) du du' \right\rangle \\ & \quad \int \int \rho(x, u, t; \xi, u', \tau) du du', \\ R &= R(\xi, \tau; x, t) = \left\langle \int \int (u - \bar{u})_{x,t} (u')_{\xi, \tau} \rho(x, u, t; \xi, u', \tau) du du' \right\rangle \\ & \quad \int \int \rho(x, u, t; \xi, u', \tau) du du', \end{aligned}$$

また (14) より

$$\int \int \rho(x, u, t; \xi, u', \tau) du du' = \rho(x, t) \psi(\xi, \tau/x, t).$$

(16) から

$$\bar{\theta}(\xi, \tau/x_0, 0) = \psi(\xi, \tau/x_0, 0) \rho(x_0, 0) / \rho(\xi, \tau) \quad (24)$$

(24) を (23) に代入し, (18) から $\psi(x, t/x_0, 0)$ の連続の式として

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial}{\partial t} \psi + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \bar{u} \psi - \int_0^t \int \left(U \frac{\partial \psi}{\partial \tau} + R \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right) \phi d\xi d\tau \right. \\ & \quad \left. + \int_0^t \int \psi \left(U \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial \tau} + R \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial \xi} \right) \phi d\xi d\tau \right\} = 0, \end{aligned} \quad (25)$$

ただしここに

$$\phi = \phi(\xi, \tau; x, t) = \rho(x, t) \psi(\xi, \tau/x, t) / \rho(\xi, \tau)$$

を得る。

4. 力学過程と確率過程

以上式 (25) の導出に当っては $x(t, \omega)$ の速度 $u(t, \omega)$ の存在を仮定しているのみであり, 他に何等の制限条件を付していない。従って (25) は速度が存在する確率過程 $x(t, \omega)$ における条件付確率

密度または遷移確率密度の連続の式に関する一般的な恒等式である。すなわち遷移確率密度の時間的変化は一般に速度の相関函数によって導かれることが示されている。またとくに二次以下のモーメントのみにより表わされていることは興味がある。

前報においては $6N$ 次元位相空間における力学的過程について (25) を導いたが、上述のようにもつと一般的な条件の下に導き得ることはその意味を知る上で重要である。とくに Fokker-Planck の式で記述される連続マルコフ過程 $(x, u, \dot{u}, t)$ についてその部分空間 (x, u, t) での過程はもはやマルコフ過程ではないが、これについても (25) は成立する。

非可逆過程の統計力学では R の相関領域の大きさ Δt 程度の時間経過による x の変化量 Δx の一次および二次モーメントのみを用い、 ψ の時間的変化を Fokker-Planck の式を用いて近似しようとするものであるが、一般的な式 (25) とこの近似の関係を論じることは興味ある課題であるがこれについては前報においても論じた。

運動方程式との関連については、 x を運動量に取れば u は力となり運動方程式に結ばれる。

最後にか u 離散的な値 (整数値など) を取る場合についても速度の定義を適当に取り、積分の意味を一般的に (ルベーク積分) とれば (25) が適用できる。

参 考 文 献

- 1) J. G. Kirkwood, J. Chem. Phys. 14 (1946) 180. R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan, 12 (1957) 570, 1203.
- 2) K. Kitajima, Proc. 10th Intern. Cong. Appl. Mech., Stresa, 1960.
- 3) K. Kitajima, Rep. Res. Inst. Appl. Mech., Kyushu Univ., Vol. X No. 39 (1962) 95.
- 4) 伊藤 清, 確率論の基礎, (岩波, 昭和 19)

(昭和 57 年 5 月 31 日 受理)