

確率微分方程式の統計的線形化

京大 理 村上 力

§1. はじめに

気体-液体間の一次相転移に伴う核形成過程に代表されるような、系のゆらぎによつて引き起こされる特定の初期状態からより安定な定常状態への緩和過程の特性を調べることは、問題が非線形であること、さらに長時間にわたる系のふるまいをみなければならないため単純な摂動法はあまり有効でないなどの理由から、統計力学のむずかしい問題の一つになっている。したがつて、そのような緩和過程を確率微分方程式で記述する場合、方程式は非線形となるので何らかの近似法を用いて解くことになるが、その方法は十分長時間のふるまいに対してよい近似を与えるものでなければならない。

この小論では、そのような近似法を見出すという観点から、確率微分方程式の統計的線形化⁽¹⁾という考えの有効性について具体的な例によつて議論したい。§2で統計的線形化という考えの要点を述べ、§3でそれを具体的な例に適用して得られる結果について述べる。

§2. 統計的線形化について

$W = \{W_t; t \in [0, \infty)\}$ を Wiener 過程とするとき、確率微分方程式 (SDE)

$$dX_t = \alpha(t, X_t)dt + dW_t, \quad X_0 = x \quad (x \in \mathbb{R}) \quad (1)$$

の解 $X = \{X_t; t \in [0, \infty)\}$ の分布 (連続関数の空間上の確率測度) を μ_x とする。今、

$$a_t + b_t EX_t = E\alpha(t, X_t) \quad (2)$$

$$b_t \{EX_t^2 - (EX_t)^2\} = E[\alpha(t, X_t)X_t] - E\alpha(t, X_t)EX_t \quad (3)$$

をみたす t の関数 a_t, b_t に対し SDE

$$d\hat{X}_t = (a_t + b_t \hat{X}_t)dt + dW_t, \quad \hat{X}_0 = x \quad (4)$$

の解 \hat{X} を考えると、 μ_x が \hat{X} の分布 $\mu_{\hat{X}}$ に関して絶対連続となるとき、SDE (1) は "統計的線形化可能" であるということにする。以下ではこのことを仮定して話をすすめることにする。

ところで、 X_t の平均、分散を $m_t = EX_t, V_t = EX_t^2 - (EX_t)^2, \hat{X}_t$ のそれらを \hat{m}_t, \hat{V}_t と書くことにし、 $m_t, V_t, \hat{m}_t, \hat{V}_t$ の従う微分方程式を (1), (4) から導けば、 $G_t = \exp\{\int_0^t b_u du\}, \delta X_t = X_t - m_t, \phi_t(x) = \alpha(t, x) - a_t - b_t x$ とするとき、等式

$$m_t - \hat{m}_t = G_t \int_0^t G_u^{-1} E\phi_u(X_u) du \quad (5)$$

$$V_t - \hat{V}_t = 2G_t^2 \int_0^t G_u^{-2} E[\phi_u(X_u)\delta X_u] du \quad (6)$$

が成立することがわかる。ところが (2), (3) より $E\phi_t(X_t) = 0, E[\phi_t(X_t)\delta X_t] = 0$ であるから、 \hat{X} は $\hat{m}_t = m_t, \hat{V}_t = V_t$ となるような Gauss 過程であることがわかる。

一方、 μ_x が $\mu_{\hat{x}}$ に関して絶対連続だから、Radon-Nikodym導関数 $d\mu_x/d\mu_{\hat{x}}$ はGirsanovの公式⁽²⁾により \hat{x} の汎関数として

$$(d\mu_x/d\mu_{\hat{x}})(\hat{X}) = \exp\left\{\int_0^\infty \phi_u(\hat{X}_u) dW_u - \frac{1}{2} \int_0^\infty \phi_u(\hat{X}_u)^2 du\right\} \quad (7)$$

と与えられる。したがって、

$$p_t = \exp\left\{\int_0^t \phi_u(\hat{X}_u) dW_u - \frac{1}{2} \int_0^t \phi_u(\hat{X}_u)^2 du\right\} \quad (8)$$

とおけば、 X_t の関数 $Q(X_t)$ の期待値は、 μ_x による汎関数積分を(7)を用いて $\mu_{\hat{x}}$ による積分に書きなおし、さらに p_t のマルチンゲール性⁽²⁾を用いれば、

$$E Q(X_t) = E[Q(\hat{X}_t) p_t] \quad (9)$$

と \hat{x} の汎関数の期待値で与えられる。ゆえに、(2),(3)式は

$$a_t + b_t E[\hat{X}_t p_t] = E[\alpha(t, \hat{X}_t) p_t] \quad (2')$$

$$b_t \{E[\hat{X}_t^2 p_t] - (E[\hat{X}_t p_t])^2\} = E[\alpha(t, \hat{X}_t) \hat{X}_t p_t] - E[\alpha(t, \hat{X}_t) p_t] E[\hat{X}_t p_t] \quad (3')$$

と書くことができる。 p_t は \hat{X}_t , a_t , b_t の汎関数とみなせるので、(2'), (3'), (4)は \hat{x} , a , b に対する閉じた方程式になっていることがわかる。統計的線形化の具体的な手続きは、これらの方程式を解くことである。 \hat{x} , a , b が求めれば p_t が決まるので(9)式を用いて X_t の高次のモーメント等を計算することができる。特に Q として集合 $B \subset \mathbb{R}$ の定義関数をとれば、

$$P_{x,b}\{X_t \in B\} = \int_B E[p_t | \hat{X}_t = y] \hat{P}(t, y | x) dy$$

ただし、 $E[p_t | \hat{X}_t = y]$ は p_t の条件付期待値。

$$\hat{p}(t, \gamma | \alpha) = (2\pi \hat{V}_t)^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2} \hat{V}_t^{-1} (\gamma - \hat{m}_t)^2\right\}$$

は \hat{X}_t の確率密度関数 (p. d. f.)、となるので X_t の p. d. f. は

$$P(t, \gamma | \alpha) = E[\rho_t | \hat{X}_t = \gamma] \hat{p}(t, \gamma | \alpha) \quad (10)$$

から求めることができる。

§3. 具体例への適用

g を 1 よりも十分小さな正の数、 γ を任意の実数として、

$$dX_t = (\gamma X_t - g X_t^3) dt + dW_t, \quad X_0 = \alpha \quad (1)$$

なる SDE を例にとりて考える。このとき、解くべき \hat{X} , a , b に対する方程式は次のように書ける。

$$d\hat{X}_t = \{\gamma \hat{X}_t - g(a_t + b_t \hat{X}_t)\} dt + dW_t, \quad \hat{X}_0 = \alpha \quad (2)$$

$$a_t + b_t E[\hat{X}_t \rho_t] = E[\hat{X}_t^3 \rho_t] \quad (3)$$

$$b_t \{E[\hat{X}_t^2 \rho_t] - (E[\hat{X}_t \rho_t])^2\} = E[\hat{X}_t^4 \rho_t] - E[\hat{X}_t^3 \rho_t] E[\hat{X}_t \rho_t] \quad (4)$$

ただし、 $\rho_t = \exp\left\{g \int_0^t \phi_u dW_u - \frac{g^2}{2} \int_0^t \phi_u^2 du\right\}$, $\phi_t = a_t + b_t \hat{X}_t - \hat{X}_t^3$ である。

ところで、 ρ_t に対する展開式⁽³⁾

$$\rho_t = 1 + g \rho_t^{(1)} + g^2 \rho_t^{(2)} + \dots$$

$$\rho_t^{(n)} = \int_0^t \rho_u^{(n-1)} \phi_u dW_u, \quad n = 1, 2, \dots, \rho^{(0)} \equiv 1 \quad (5)$$

を用いれば、§2. (5), (6) に対応する等式は

$$m_t - \hat{m}_t = g G_t \int_0^t du G_u^{-1} \left[a_u + b_u \hat{m}_u - \hat{m}_u^3 - 3\hat{m}_u \hat{V}_u \right. \\ \left. + g (b_u f_u^{(1,1)} - 3\hat{m}_u^2 f_u^{(1,1)} - 3\hat{m}_u f_u^{(2,1)} - f_u^{(3,1)}) + O(g^2) \right] \quad (6)$$

$$V_t - \hat{V}_t = 2g G_t^2 \int_0^t du G_u^{-2} \left[b_u \hat{V}_u - 3\hat{m}_u^2 \hat{V}_u - 3\hat{V}_u^2 \right.$$

$$+g(b_u f_u^{(2,1)} + 3\hat{m}_u \hat{V}_u f_u^{(1,1)} - 3\hat{m}_u^2 f_u^{(2,1)} - 3\hat{m}_u f_u^{(3,1)} - f_u^{(4,1)}) + O(g^2)] \quad (7)$$

となる。ただし、 $G_t = \exp(\gamma t - g \int_0^t b_u du)$ であり、 $f_t^{(m,n)} = E[(\delta \hat{X}_t)^m \rho_t^{(n)}]$ は $f_0^{(m,n)} = 0$ かつ次の方程式に従うことが(5)式からわかる。

$$\begin{aligned} \frac{1}{m} \frac{d}{dt} f_t^{(m,n)} &= (\gamma - g b_t) f_t^{(m,n)} + \frac{m-1}{2} f_t^{(m-2,n)} + (a_t + b_t \hat{m}_t - \hat{m}_t^3) f_t^{(m-1,n-1)} \\ &\quad + (b_t - 3\hat{m}_t^2) f_t^{(m,n-1)} - 3\hat{m}_t f_t^{(m+1,n-1)} - f_t^{(m+2,n-1)} \end{aligned} \quad (8)$$

$f_t^{(m,n)}$ に対するこれらの方程式は、 a_t, b_t, \hat{m}_t を別にして、任意の m, n に対して $\{f_t^{(k,l)}; 1 \leq k \leq m+2n-2l, 1 \leq l \leq n\}$ で閉じている。

(3),(4)式は(6),(7)式の右辺が常に0となるように a, b を決めるということであらう。だが、今の場合もう少し扱いやすい、(6),(7)の右辺がなるべく g の高次なるという条件から a, b を決めるという方法が考えられる。以下では、最も簡単な場合として、(6),(7)の右辺で g の最低次の項が消えるように a, b を決めることを考えてみることにする。すなわち、

$$a_t = -2\hat{m}_t^3, \quad b_t = 3\hat{m}_t^2 + 3\hat{V}_t \quad (9)$$

とする。したがって、この場合、 $\delta \hat{X}_t = \hat{X}_t - \hat{m}_t$, \hat{m}_t, \hat{V}_t は

$$d\delta \hat{X}_t = \{\gamma - 3g(\hat{m}_t^2 + \hat{V}_t)\} \delta \hat{X}_t dt + dW_t, \quad \delta \hat{X}_0 = 0 \quad (10)$$

$$\frac{d}{dt} \hat{m}_t = (\gamma - 3g\hat{V}_t) \hat{m}_t - g\hat{m}_t^3, \quad \hat{m}_0 = \alpha \quad (11)$$

$$\frac{d}{dt} \hat{V}_t = 2\{\gamma - 3g(\hat{m}_t^2 + \hat{V}_t)\} \hat{V}_t + 1, \quad \hat{V}_0 = 0 \quad (12)$$

という方程式から求まる。

ところで、方程式(11),(12)は X_t の平均、分散に対する方程式

$$\frac{d}{dt} m_t = \gamma m_t - g\{m_t^3 + 3m_t V_t + E\delta X_t^3\}, \quad m_0 = \alpha$$

$$\frac{d}{dt}V_t = 2\gamma V_t - 2g(3\hat{m}_t^2 V_t + 3\hat{m}_t E\delta X_t^3 + E\delta X_t^4) + 1, \quad V_0 = 0$$

から、 δX_t が Gaussianであるかのように思、て $E\delta X_t^3$ を0で、 $E\delta X_t^4$ を $3V_t^2$ でおきかえるという手続きによ、て得られる方程式に一致する。ゆえに、上述の方法はこのような手続きによ、て得られる結果の近似としての意味をは、きりさせるばかりでなく、近似過程 \hat{X} の従う SDEをも与えているので、 f_t と §2 (9), (10)式から X_t のモーメント、p.d.f等を計算することができ、る。ただし、 f_t の表式に現われる ϕ_t は今の場合

$$\phi_t = 3\hat{m}_t \hat{V}_t + 3\hat{V}_t \delta \hat{X}_t - 3\hat{m}_t^2 \delta \hat{X}_t^2 - \delta \hat{X}_t^3 \quad (13)$$

となる。

そこで、次に X_t の p.d.f.を計算してみることにする。そのためには $E[f_t | \hat{X}_t = x]$ をもう少し具体的な形に書き表わすことが必要となる。まず次の関数を考える。

$$\Phi_t(z|x) = 3\hat{m}_t \hat{V}_t z + \frac{3}{2} \hat{V}_t z^2 - \hat{m}_t^2 z^3 - \frac{1}{4} z^4 \quad (14)$$

ここで x は \hat{m}_t の初期値である。 $\frac{\partial \Phi_t}{\partial z}(\delta \hat{X}_t|x) = \phi_t$ に注意して、 $\Phi_t(\delta \hat{X}_t|x)$ に Itoの公式⁽²⁾を適用すれば、

$$g \int_0^t \phi_u dW_u - \frac{g^2}{2} \int_0^t \phi_u^2 du = g \Phi_t(\delta \hat{X}_t|x) - g \int_0^t \Gamma_u(\delta \hat{X}_u|x) du$$

なる等式を得る。ただし、

$$\Gamma_t(z|x) = \frac{\partial \Phi_t}{\partial t}(z|x) + \frac{\partial \Phi_t}{\partial z}(z|x) \{ \gamma - 3g(\hat{m}_t^2 + \hat{V}_t) \} z + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi_t}{\partial z^2}(z|x) + \frac{g}{2} \left\{ \frac{\partial \Phi_t}{\partial z}(z|x) \right\}^2$$

である。さらに、 $\hat{V}_{u,t} = E[\delta \hat{X}_u \delta \hat{X}_t]$ とするとき、 $\zeta_{u,t} = \delta \hat{X}_u - \hat{V}_{u,t} \hat{V}_t^{-1} \delta \hat{X}_t$ が $\delta \hat{X}_t$ と独立な Gaussianであることを用いれば、

$$\begin{aligned}
 E[P_t | \hat{X}_t = \gamma] &= E\left[\exp\left\{g\Phi_t(\delta\hat{X}_t | \alpha) - g\int_0^t \Gamma_u(\delta\hat{X}_u | \alpha) du\right\} | \delta\hat{X}_t = \gamma - \hat{m}_t\right] \\
 &= e^{g\Phi(\gamma - \hat{m}_t | \alpha)} E\left[\exp\left\{-g\int_0^t \Gamma_u(\xi_{u,t} + \hat{V}_{u,t} \hat{V}_t^{-1}(\gamma - \hat{m}_t) | \alpha) du\right\}\right] \quad (15)
 \end{aligned}$$

となる。最後の表式における第一の因子は時刻 t における $\delta\hat{X}$ の値のみに依存する部分であり、第二の因子は時刻 t よりも前の $\delta\hat{X}$ の値に依存する部分である。

まず粗い近似として、(15)の第二の因子の γ 依存性を無視した場合に得られる結果について調べてみよう。このとき、 X_t

の p.d.f. $P(t, \gamma | \alpha)$ の近似として、§2の(10)式より

$$P^{(0)}(t, \gamma | \alpha) = e^{\Psi_t(\gamma - \hat{m}_t | \alpha)} / \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} e^{\Psi_t(z | \alpha)} dz \right\} \quad (16)$$

$$\Psi_t(z | \alpha) = -\frac{1}{2} \hat{V}_t^{-1} z^2 + g \Phi_t(z | \alpha)$$

$$= 3g \hat{m}_t \hat{V}_t z - \frac{1}{2} \hat{V}_t^{-1} (1 - 3g \hat{V}_t^2) z^2 - g \hat{m}_t^2 z^3 - \frac{g}{4} z^4 \quad (17)$$

が得られる。 \hat{m}_t, \hat{V}_t は(11), (12)の解であるが、特に $\alpha = 0$ の場合は変数分離によつて解くことができ、 $\hat{m}_t \equiv 0$ 、

$$\hat{V}_t = \frac{\gamma - \sqrt{\gamma^2 + 6g}}{6g} + \frac{\sqrt{\gamma^2 + 6g}}{3g} \left(1 - \frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 6g}}{\gamma - \sqrt{\gamma^2 + 6g}} e^{-2\sqrt{\gamma^2 + 6g} t} \right)^{-1} \quad (18)$$

となるので、 $P^{(0)}(t, \gamma | 0)$ は具体的に求まる。したがって、例えば $P^{(0)}(t, \gamma | 0)$ の最大値を与える γ の値を γ_t とするとき、 γ_t の時間変化を調べることができる。結果は、 $\gamma \leq \frac{1}{2}\sqrt{3g}$ のとき $\gamma_t = 0$ 、 $0 \leq t < \infty$ 、であり、 $\gamma > \frac{1}{2}\sqrt{3g}$ のとき

$$\gamma_t = \begin{cases} 0, & 0 \leq t \leq t_0 \\ \pm \left(-\frac{1}{g\hat{V}_t} + 3\hat{V}_t \right)^{\frac{1}{2}}, & t_0 \leq t < \infty \end{cases}$$

となる。ただし

$$t_0 = \frac{1}{2\sqrt{\gamma^2+6g}} \ln \left[\frac{(\gamma+\sqrt{\gamma^2+6g})(2\sqrt{3g}-\gamma+\sqrt{\gamma^2+6g})}{(\gamma-\sqrt{\gamma^2+6g})(2\sqrt{3g}-\gamma-\sqrt{\gamma^2+6g})} \right]$$

である。特に $g \rightarrow 0+$ のときは $t_0 \sim -\frac{1}{4\gamma} \ln g$ である。また $t \rightarrow t_0+0$ とすれば

$$y_t \sim \pm \left[6 \left(\frac{2\gamma}{\sqrt{3g}} - 1 \right) \right]^{\frac{1}{2}} (t-t_0)^{\frac{1}{2}}$$

となる。すなわち、 $\gamma > \frac{1}{2}\sqrt{3g}$ の場合、 $P^{(0)}(t, y | 0)$ の形は $t=t_0$ をさかいに一山から二山に変わることがわかる。

図1、2は、 $\gamma=1.0, g=0.4$ の場合に微分方程式 $\frac{d}{dt}x =$

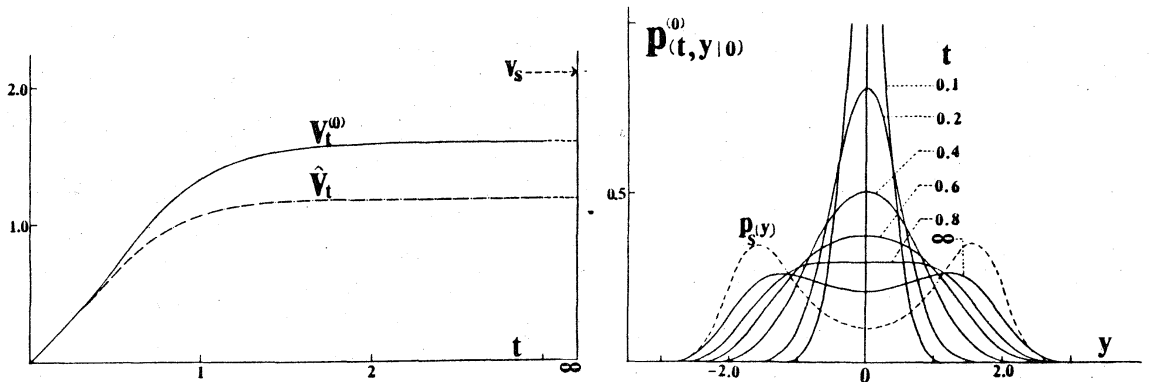


図 1.

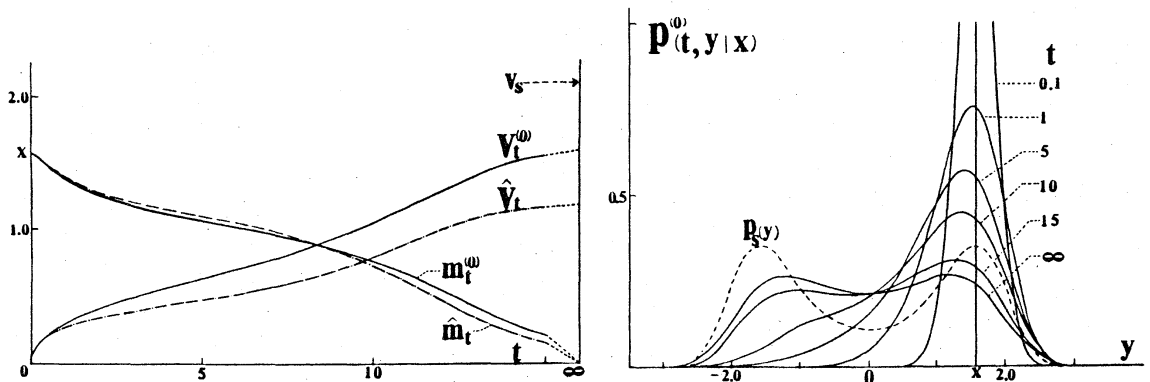


図 2.

$\gamma x - g x^3$ の不安定平衡点 $x=0$ と安定平衡点 $x=g^{-\frac{1}{2}}$ を初期値にとったときの $\hat{m}_t, \hat{V}_t, P^{(0)}(t, \gamma|x)$ および

$$m_t^{(0)} = \int_{-\infty}^{\infty} \gamma P^{(0)}(t, \gamma|x) d\gamma, \quad V_t^{(0)} = \int_{-\infty}^{\infty} (\gamma - m_t^{(0)})^2 P^{(0)}(t, \gamma|x) d\gamma$$

の時間変化を数値計算によって求めた結果である。図中 $P_s(\gamma), V_s$ で示してあるのは Fokker - Planck 方程式の定常解とそれに関する分散の値であり、 $P(t, \gamma|x), V_t$ は $t \rightarrow \infty$ でこれらに近づくはずである。今の場合、 \hat{V}_∞ より $\hat{V}_\infty^{(0)}$ の方が V_s に近い値になっていること、 $\hat{P}(\infty, \gamma|x)$ は Gauss 型であるが $P^{(0)}(\infty, \gamma|x)$ は $P_s(\gamma)$ に近い二山の関数になっていることは注目すべきであり、(10) ~ (12) できまる \hat{X} を用いて X_t のふるまいに対するより良い近似を得ることができたといえる。図に示した場合は $\gamma^2 \leq 3g$ であり、このときは (\hat{m}_t, \hat{V}_t) のアトラクタは一点 $(0, \frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 6g}}{6g})$ からなる (ただし、 $\hat{V} \geq 0$ の領域で)。したがって $P^{(0)}(\infty, \gamma|x)$ は x によらず一定の関数となる。しかし、 $\gamma^2 > 3g$ の場合には、前記のもの他に二個のアトラクタが現われ、初期値によつて $P^{(0)}(\infty, \gamma|x)$ は $\gamma = -g^{-\frac{1}{2}}$ または $g^{-\frac{1}{2}}$ の付近にピークをもつ Gauss 型に近い密度関数となる。このような漸近密度の出現は、(11), (12) で決まる \hat{m}_t, \hat{V}_t が m_t, V_t のよい近似とみなせる時間 ($0 \leq t \leq g^{-2}$) よりも長い寿命をもった準定常状態が存在することを意味していると思われる。したがって、その様な準定常状態の崩壊過程を正しくみるためには、(6), (7) の右辺が g のさらに高次

になるよう a, b を決めるなど、次の近似に進まなければならない。一方、(15)式で与えられる $E[p_t | X_t = y]$ のもう少し精確な表式を用いれば、 $p^{(0)}(t, y | x)$, $V_t^{(0)}$, $m_t^{(0)}$ のよりよい近似値を得ることができると思われる。

§4. おまわり

以上述べてきた統計的線形化という考えは、 X_t が \mathbb{R}^d -値である場合⁽¹⁾に限らず、もっと一般の空間に値をとる場合のSDEに対しても適用できると思われる。ただしその際に、はたして応用上十分といえる広いクラスの $\alpha(t, x)$ に対して統計的線形化が可能かという問題が解決されなければならない。しかし、一度与えられた $\alpha(t, x)$ に対してそのことが可能であるとわかれば、 X の分布が、例えば §3 (2), (3), (4) でなく (2), (19) などからきまる \bar{X} の分布に関しても絶対連続となることか、Gauss 過程の同等性⁽⁴⁾に関する事実からわかるであろう。§3ではこれらを仮定していることをつけ加えておかねばならないだろう。

[参考文献] (1) 村上力、講究録 405 (1980), p94 及びその中の参考文献。
 (2) (1)の参考文献, A. Friedman, *Stochastic Differential Eq. and Applications*, Academic Press (1975) など。
 (3) H. P. McKean, *Stochastic Integrals*, Academic Press (1969)。
 (4) 飛田武幸, 櫃田倍之, *ガウス過程*, 紀伊國屋書店 (1976)