

確率過程の漸近評価と W K B

東工大理 北原和夫 (Kazuo KITAHARA)

巨視的体系の状態は巨視的変数 X で表される。巨視的変数とは微視的変数の和として表される。例えば、磁化 $\mathbf{M}$ は各原子の磁気モーメント $\mathbf{m}$ の和である。よって系の大きさ Ω に比例する。 $X = \Omega x$ と書くと、 x は 1 のオーダーの量となる。時刻 t において X が実現する確率分布を $P(X, t)$ で表す。 $X \rightarrow X + r$ の変化は微視的過程であり、変化量 r は微視的変数であるとする。また、系の大きさが大きくなれば、単位時間に $X \rightarrow X + r$ の起こる頻度は大きくなる。なぜなら、系の各部分で微視的過程が同等に可能であると考えられるからである。以上のような系に限定すると、確率分布の従うマスター方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} P(X, t) = \sum_r [W(X - r \rightarrow X) P(X - r, t) - W(X \rightarrow X + r) P(X, t)]$$

において

$$W(X \rightarrow X + r) = \Omega w(x; r)$$

とおくことができる。[1] よって $P(X, t) = \Psi(x, t)$ と表すと、

$$\frac{1}{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -H(x, \frac{1}{\Omega} \frac{\partial}{\partial x}) \Psi(x, t), \quad H(x, p) \equiv \sum_r (1 - e^{-rp}) w(x, r)$$

と書くことができる。 $i/\hbar$ を Ω で置き換えると Schrödinger 方程式となる。

ちょうど量子力学における Schrödinger 方程式と同じ形になる。よって WKB 近似に対応して

$$P(x, t) \sim \exp[\Omega \phi(x, t)]$$

とおくと、 $\phi(x, t)$ に対して Hamilton-Jacobi 方程式が得られる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + H(x, \frac{\partial \phi}{\partial x}) = 0$$

この方程式は正準方程式の方法で解ける。まず、初期値問題として $\phi(x, 0) = f(x)$ が与えられているとき、

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial x} \end{aligned}$$

を初期値問題として解く。すなわち、 $x(0) = x_0$ に対応して $p(0) = f'(x_0)$ とおき、解を初期条件の関数として

$$x(t) = x(t; x_0), \quad p(t) = p(t; x_0)$$

と書く。また、解曲線にそって作用積分を求める。

$$J(t; x_0) = \int_0^t d\tau \{ \dot{x}(\tau) p(\tau) - H(x(\tau), p(\tau)) \}$$

解を $x(t; x_0) = x$ を逆に解くと、 $x_0 = x_0(t; x)$ が得られる。これより Hamilton-Jacobi 方程式の解は

$$\phi(x, t) = J(t; x_0(t; x)) + f(x_0(t; x))$$

で与えられる。

マスター方程式の基本解は経路積分で表される。

$$P(x_1, t_1 | x_2, t_2) = \int_{x(t_1)=x_1}^{x(t_2)=x_2} D(x) \int D(k) \exp\{-\Omega \int_{t_1}^{t_2} dt [H(x(t), p(t)) - ik(t)\dot{x}(t)]\}$$

ここで、経路についての束縛条件は $x(t_1) = x_1$, $x(t_2) = x_2$ であり、経路 $k(t)[t_1 \leq t \leq t_2]$ については束縛条件はない。これを導くには、まず、

$$\begin{aligned} & \langle x' | \exp[-\Delta t \Omega H(x', \frac{1}{\Omega} \frac{\partial}{\partial x})] | x'' \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp[-\Delta t \Omega H(x', \frac{ik}{\Omega}) + ik(x' - x'') + O(\Delta t)^2] \\ &= \Omega \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp\{-\Delta t \Omega [H(x', ik) + ik(\frac{x' - x''}{\Delta t})] + O(\Delta t)^2\} \end{aligned}$$

となることに注意する。よって有限の時間間隔については、

$$\begin{aligned} & P(x'', t'' | x', t') \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int dx_1 \dots \int dx_{n-1} \int dk_1 \dots \int dk_{n-1} \int dk_n \Omega^n \\ & \times \exp\{-\Omega \sum_{j=1}^n \Delta t [H(x_j, ik_j) - ik_j \frac{x_j - x_{j-1}}{\Delta t}]\} \end{aligned}$$

ここで、 $x_n = x'$, $x_0 = x''$, $t_j = t'' + j\Delta t$, $\Delta t = (t' - t'')/n$ とおいた。 Ω が大きいとき、 k_j に関する積分については漸近評価が可能である。 $H(x_j, ik_j, t_j) - ik_j(x_j - x_{j-1})/\Delta t$ の鞍点を $p_j = ik_j^*$ と書くと、つまり、 $p(t_j) = p_j$ は $x(t_j)$, $\dot{x}(t_j)$ の関数として

$$\frac{\partial H}{\partial p}(x(t), p(t)) = \dot{x}(t)$$

で決まる。

$$ik_j = p_j + ik'_j$$

とおいて k'_j について積分すると、

$$\begin{aligned} & P(x'', t'' | x', t') \\ & \simeq \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^n \left[\frac{2\pi}{-\frac{\partial^2 H}{\partial p^2}(x(t_j), p(t_j)) \Delta t \Omega} \right]^{1/2} \\ & \times \int dx_1 \dots \int dx_{n-1} \exp\{\Omega \sum_{j=1}^n \Delta t L(x_j, \frac{x_j - x_{j-1}}{\Delta t})\} \end{aligned}$$

と表される。ここで Lagrangian は

$$L(x, \dot{x}) = \dot{x}p - H(x, p)$$

で与えられる。

マスター方程式を Kramers-Moyal 展開する。

$$H(x, p) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} p^n C_n(x), \quad C_n(x) = \sum_r r^n w(x; r)$$

ここで $z = x - y(t)$ とおき、

$$S(xt|x_0t_0) = a_0(t) + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{a_n(t)}{n} z^n$$

と展開すると、

$$\dot{y}(t) = C_1(y(t)), \quad \dot{a}_2(t) = -2C_1'(y(t))a_2(t) + C_2(y(t))[a_2(t)]^2, \dots$$

のように、順次解いてゆくことができる。その場合、平均値、分散は

$$\langle x \rangle_t \simeq y(t), \quad \langle (x - \langle x \rangle_t)^2 \rangle_t \simeq \frac{1}{\Omega a_2(t)}$$

で与えられる。しかしながら、この漸近評価は一般にはある時間以内でしか有効でない。つまり、二つの極限、 $\Omega \rightarrow \infty$ と $t \rightarrow \infty$ は交換しない。[3]

文献

1. N. G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*(North Holland, 1981)
2. R. Kubo, K. Matsuo and K. Kitahara, *J. Stat. Phys.* 9, 51(1973)
3. M. Suzuki, *Adv. Chem. Phys.* 46, 195(1981)