B4 ゼミ #1

大上由人

2025 年 4 月 14 日

2　確率過程

この章では、離散状態に対する確率分布の時間発展を考える。[*1]例えば、(これは連続なものの例だが) ブラウン運動を考えると、環境の水分子の運動によって、ランダムに位置が変化する。したがって、粒子の位置の時間発展を正確に予言することはできない。そこで、粒子の位置についての確率分布を考え、その時間発展を追うことにする。初めに、時間も離散的な場合についてその時間発展を議論する。次に、その極限として、連続時間についての時間発展を議論する。

2.1　Markov 過程と離散時間 Markov 連鎖

N step の確率過程、すなわち、N 回状態が変わりうるような時間発展を考える。初期状態を ω_0、i 番目の step の状態を ω_i とする。このとき、N step を経ることで状態の列 $(\omega_0, \omega_1, \cdots, \omega_N)$ が得られる。

一般の確率過程においては、n 番目の状態は、それ以前のすべての状態に陽に依存しうる。すなわち、

$$P(\omega_n|\omega_{n-1}, \omega_{n-2}, \cdots, \omega_0) \neq P(\omega_n|\omega_{n-1}) \tag{2.1}$$

である。[*2] しかし、Markov 過程においては、

$$P(\omega_n|\omega_{n-1}, \omega_{n-2}, \cdots, \omega_0) = P(\omega_n|\omega_{n-1}) \tag{2.2}$$

が成立する。すなわち、Markov 過程は、現在の状態 ω_n が次の状態 ω_{n+1} に影響を与えるが、過去の状態 $\omega_{n-1}, \omega_{n-2}, \cdots, \omega_0$ は (陽には) 影響を与えない。

[*1] 連続なものについては chapter4 で議論する。

[*2] 例えば、1 次元ランダムウォークについて、初めの step で右に一歩進んだ場合、それ以降は 1step で 2 歩進み、初め左に一歩進んだ場合は、1step で 1 歩進む、というルールを作ると、以降の状態は 1step 目に陽に依存することになる。物理的なモデルとしても、例えばブラウン粒子が bath のすべての粒子とバネで結ばれているようなモデルを考える (調和振動子熱浴)。このとき、過去のバネとの衝突が、少し時間がたってからブラウン粒子に返ってくる。したがって、ブラウン粒子の位置の確率分布は過去の履歴に依存することになる。

特に、時間を離散的に区切った Markov 過程は、Markov 連鎖と呼ばれる。以下では、状態 ω_i を、簡単に i と表記することにする。

Markov 連鎖における確率分布の時間発展は、遷移行列によって記述される。

Def. 確率遷移行列

行列 T が確率遷移行列であるとは、その要素 T_{ij} が、以下の二つの性質を満たすときに言う。

- $\forall i,j \quad T_{ij} \geq 0$ (非負性)
- $\sum_j T_{ij} = 1$ (規格化条件)

Def.Markov 連鎖における時間発展

Markov 連鎖における時間発展は、遷移行列 T を用いて、以下のように表される。

$$p^n = Tp^{n-1} \tag{2.3}$$

ここで、p^n は、n ステップ目における状態の確率分布を表すベクトルである。成分を用いて書くと、

$$p_j^n = \sum_i T_{ji} p_i^{n-1} \tag{2.4}$$

となる。

すなわち、遷移行列が確率分布の時間発展を特徴づけることとなる。

例えば 3 状態をとるような系の遷移の仕方は以下の図のように表される。TODO: 図を作成する。すなわち、T_{ij} は、状態 i から状態 j に遷移する確率を表している。

確率遷移行列の定義の妥当性を確かめる。遷移行列の各成分が非負であることは、その成分が状態間の遷移確率を表していることから妥当である。[*3] 二つ目の性質は、遷移後の確率分布が規格か条件を満たしていることを確かめればよい。

$$\begin{aligned}
\sum_j p_j^n &= \sum_j \sum_i T_{ji} p_i^{n-1} && (2.5)\\
&= \sum_i p_i^{n-1} \sum_j T_{ji} && (2.6)\\
&= \sum_i p_i^{n-1} && (2.7)\\
&= 1 && (2.8)
\end{aligned}$$

[*3] 確率分布の時間発展がある行列を用いて表されることを認めるならば、背理法によってもこれを示すことができる。もし、$T_{ij} < 0$ であった場合、例えば $p_j^{n-1} = 1$ であったとき、$p_i^n = \sum_k T_{ik} p_k^{n-1} = T_{ij} p_j^{n-1} = T_{ij} < 0$ となり、確率分布が負の値をとることになるが、これは矛盾である。

となることから、遷移後の確率分布は規格化条件を満たす。[*4]

特に、上での議論は遷移行列が時間に依らないとしたが、時間に依存する場合も同様に議論できる。n step 目の遷移行列を T^n とすると、

$$T^n_{ij} = P((\omega_i, n)|(\omega_j, n-1)) \tag{2.12}$$

と定義すればよい。

2.2　連続時間 Markov jump 過程

Markov 連鎖においては、時間が離散的に区切られているが、連続時間 Markov 過程では、時間が連続的に変化する。Markov 連鎖を Markov 過程に拡張するためには、離散的に区切った時間について、その幅を 0 に近づけばよい。

時間 $0 \leq t \leq \tau$ における確率過程について考える。この時間を、Δt ごとに区切り、$N\Delta t = \tau$ とする。このように区切ってあげると、これは、N step の Markov 連鎖の形になっている。ここで、遷移確率行列の成分を、以下のように定義する。

$$T^n_{ij} = \begin{cases} R_{ij}(n\Delta t)\Delta t & (i \neq j) \\ 1 - \sum_{k(\neq j)} R_{kj}(n\Delta t)\Delta t & (i = j) \end{cases} \tag{2.13}$$

ただし、$R_{ij}(t)$ は、以下のように定義される。

Def. 遷移レート行列

行列 R が遷移レート行列であるとは、その要素 R_{ij} が、以下の二つの性質を満たすときに言う。

- $\forall i, j \quad (i \neq j) \quad R_{ij} \geq 0$ (非負性)
- $\sum_i R_{ij} = 0$ (規格化条件)

遷移レート行列を用いることで、連続時間 Markov 過程における確率分布の時間発展を以下のように表すことができる。

[*4] 仮に仮に、ある i に対して、$\sum_j T_{ij} = c \neq 1$ であるとする。このとき、$p_i^{n-1} = 1$ かつ $p_{k(\neq i)}^{n-1} = 0$ であったとき、

$$\sum_j p_j^n = \sum_j T_{ji} p_i^{n-1} \tag{2.9}$$

$$= \sum_j T_{ji} \cdot 1 \tag{2.10}$$

$$= c \neq 1 \tag{2.11}$$

となるが、、これは矛盾である。したがって、$\sum_j T_{ij} = 1$ であることがわかる。

Def.master 方程式

連続時間 Markov 過程における確率分布の時間発展は、以下のように表される。

$$\frac{\mathrm{d}p_i(t)}{\mathrm{d}t} = \sum_j R_{ij} p_j(t) \tag{2.14}$$

この微分方程式は、master 方程式と呼ばれる。

Prf.

$$p_i^n = \sum_j T_{ij} p_j^{n-1} \tag{2.15}$$

のもとで、

$$\begin{aligned}
p_i^n - p_i^{n-1} &= \sum_j T_{ij} p_j^{n-1} - p_i^{n-1} && (2.16)\\
&= \sum_{j(\neq i)} T_{ij} p_j^{n-1} + T_{ii} p_i^{n-1} - p_i^{n-1} && (2.17)\\
&= \sum_{j(\neq i)} R_{ij}(n\Delta t)\Delta t p_j^{n-1} + (1 - \sum_{k(\neq i)} R_{ki}(n\Delta t)\Delta t) p_i^{n-1} - p_i^{n-1} && (2.18)\\
&= -\sum_{k(\neq i)} R_{ki}(n\Delta t)\Delta t p_i^{n-1}\Delta t + \sum_{j(\neq i)} R_{ij}(n\Delta t) p_j^{n-1}\Delta t && (2.19)\\
&= R_{ii}(n\Delta t) p_j^{n-1}\Delta t + \sum_{j(\neq i)} R_{ij}(n\Delta t) p_j^{n-1}\Delta t && (2.20)\\
&= \sum_j R_{ij}(n\Delta t) p_j^{n-1}\Delta t && (2.21)
\end{aligned}$$

となる。最後に、$N\Delta t = \tau$ を保ちながら、$\Delta t \to 0, N \to \infty$ の極限をとることで、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} p_i(t) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{p_i^n - p_i^{n-1}}{\Delta t} = \sum_j R_{ij} p_j(t) \tag{2.22}$$

が得られる。*5 □

遷移レートの定義の妥当性を確かめる。遷移レート行列の非対角成分が非負であることは、その成分が状態間の単位時間当たりの遷移の頻度を表していることからわかる。また、規格化条件につ

*5 式 (2.19) の右辺が特にわかりやすく、第 1 項は、状態 i からほかの状態に遷移する確率を表しており、第 2 項は、逆に、状態 i に遷移してくる確率を表している。全体としては、正味の確率の増分を表していることとなる。

いては、

$$\sum_i \sum_j R_{ij} p_j(t) = \sum_j \left(\sum_i R_{ij} \right) p_j(t) \tag{2.23}$$
$$= \sum_j 0 \cdot p_j(t) \tag{2.24}$$
$$= 0 \tag{2.25}$$

が成り立つことから、

$$\sum_i p_i(t) = \text{const} \tag{2.26}$$

が成り立つことがわかる。特に、初期状態で 1 に規格化されていれば、時間発展しても 1 に規格化され続ける。

今後の便宜のため、現在の状態以外の状態に遷移する確率に対する記号を定義しておく。

Def. エスケープレート

時刻 t における状態 j でのエスケープレートは、以下のように定義される。

$$e_{j,t} \coloneqq \sum_{i(\neq j)} P_{j \to i;t} = \sum_{i(\neq j)} R_{ij}(t) = -R_{jj}(t) \tag{2.27}$$

このとき、$e_{j,t}\Delta t$ は、$[t, t+\Delta t]$ において、状態 j から他の状態に遷移する確率を表す。
逆に、1 から $e_{j,t}\Delta t$ を引くことで、状態 j にとどまる確率を表すことができる。

Thm. 残留確率

時間 $[0,\tau]$ において、状態 j にとどまる確率 $P_{\mathrm{rem}(j;0,\tau)}$ は、以下のように表される。

$$P_{\mathrm{rem}}(j;0,\tau) = \exp\left(-\int_0^\tau e_{j,t} dt \right) \tag{2.28}$$

ただし、$e_{j,t}$ は、状態 j におけるエスケープレートである。

Prf.

離散化して考える。時間 τ を N 分割し、$N\Delta t = \tau$ とし、最後に $\Delta t \to 0$ なる極限をとる。この

とき、

$$
\begin{aligned}
P_{\mathrm{rem}}(j;0,\tau) &= \prod_{n=0}^{N-1} T_{jj}^{n}(n\Delta t) && (2.29)\\
&= \prod_{n=0}^{N-1} \left(1 - e_{j,n\Delta t}\Delta t + O(\Delta t^2)\right) && (2.30)\\
&= \prod_{n=0}^{N-1} \left(e^{-e_{j,n\Delta t}\Delta t} + O(\Delta t^2)\right) && (2.31)\\
&= \exp\left[-\sum_{n=0}^{N-1} e_{j,n\Delta t}\Delta t\right] + O(\Delta t) && (2.32)\\
&\underset{\Delta t\to 0}{\longrightarrow} \exp\left[-\int_0^{\tau} e_{j,t}dt\right] + O(\Delta t) && (2.33)\\
& && (2.34)
\end{aligned}
$$

となる。ただし、最後の等号では、$O(\Delta t^2)$ の項[*6]を N 回掛けているので、

$$
N \cdot O(\Delta t^2) = O(\Delta t) \tag{2.35}
$$

が成り立つことを用いた。[*7] □

[*6] ここでの $O(\Delta t^2)$ は、

- Δt の間でのエスケープレートの変動 (上の証明では、時間 $[n\Delta t, (n+1)\Delta t]$ におけるエスケープレートを $e_{j,n\Delta t}$ としていた。)
- Δt の間にジャンプが 2 回以上起こる確率の寄与

の効果を表している。

[*7] $N\Delta t = \tau$ であった。