理論物理学特論[1] 龍谷大学理工学部数理情報学科2002年06月19日樋口さぶろお[2]

9 フォッカー-プランク方程式

問題の W の定義で, $x' = x + r$ と置き直すと,

$$W(x+r|x) = \begin{cases} p & (0 \le r \le 1) \\ q & (-1 \le r < 0) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \tag{1}$$

となるので,

$$C_1(x) = \int_{-\infty}^{\infty} rW(x+r|x)\mathrm{d}r = q\int_{-1}^{0} r\mathrm{d}r + p\int_{0}^{+1} r\mathrm{d}r = \frac{1}{2}(p-q). \tag{2}$$

$$C_2(x) = \int_{-\infty}^{\infty} r^2W(x+r|x)\mathrm{d}r = q\int_{-1}^{0} r^2\mathrm{d}r + p\int_{0}^{+1} r^2\mathrm{d}r = \frac{1}{3}(p+q). \tag{3}$$

フォッカープランク方程式は,

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = -\frac{1}{2}(p-q)\frac{\partial}{\partial x}P(x,t) + \frac{1}{6}(p+q)\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,t). \tag{4}$$

10 モンテカルロ法のメトロポリスアルゴリズム

マルコフ連鎖 (離散時間, 離散空間 (状態)) の CK 方程式は,

$$P(x,t+1) = \sum_{x'} T_1(x|x')P(x',t) \tag{5}$$

である. 遷移確率 $T_1(x|x')$ を行列 $M = (M_{xx'}) = (T_1(x|x'))$ (遷移行列といわれる), $P(x,t)$ をベクトル $\vec{u}(t) = {}^{\mathrm{t}}(P(1,t), P(2,t), \dots)$ と思うと, 行列とベクトルの積を使って,

$$\vec{u}(t+1) = M\vec{u}(t), \quad \text{すなわち} \quad \vec{u}(t) = M^t\vec{u}(0) \tag{6}$$

と書き直せる.

次の遷移行列に従う $x = 1, 2, 3$ の 3 状態 (3 点) からなるマルコフ連鎖を考えよう.

$$T_1(x|x') = M_{xx'} = \begin{array}{c|ccc} x\backslash x' & 1 & 2 & 3 \\ \hline 1 & 7/10 & 1/10 & 1/30 \\ 2 & 1/5 & 3/5 & 1/5 \\ 3 & 1/10 & 3/10 & 23/30 \end{array} \tag{7}$$

M の固有値固有ベクトルは

$$\lambda = \tfrac{2}{5}, \tfrac{2}{3}, 1, \qquad \vec{v} = \begin{pmatrix} 1 \\ -4 \\ 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} \tag{8}$$

である. 極限 $t \to \infty$ での確率 $\vec{u}(\infty) = \begin{pmatrix} P(1,+\infty) \\ P(2,+\infty) \\ P(3,+\infty) \end{pmatrix}$ を求めよう. この場合, 詳細釣り合いが成り立っていることを示そう. 詳細釣り合いから極限が予測できただろうか?

[1] `http://sparrow.math.ryukoku.ac.jp/~hig/theorphys/`

[2] `mailto:hig@math.ryukoku.ac.jp`, `http://www.math.ryukoku.ac.jp/~hig/`,
へや 1-508, でんわ 077-543-7501