フォッカー・プランク方程式

時間依存する確率に対する方程式を作ります。高校数学で出てくる確率の話ぐらいは知っていることを前提にしています。
ここでの表記は人によっては違うのを使用している場合があるので注意してください。
「ブラウン運動」での結果も使っているので、導出や記号は「ブラウン運動」を見てください。

粒子が時間 t で位置 x にいる確率を $W(t,x)$ とします。確率の規格化は

$$\int W(t,x)dx = 1$$

積分の範囲をこれ以降も書きませんが、x の範囲は $-\infty \sim \infty$ とします。これだと 1 点にいる粒子の確率しか考えていないので、次々に動いていく場合に持っていきます。そのために、例えば、時間 t_1 で位置 x_1 に、時間 t_2 で位置 x_2 に粒子がいる確率を $W_2(t_2,x_2;t_1,x_1)$ と書きます。このように複数の現象が起きる確率 $W_n(t_n,x_n;\cdots;t_1,x_1)$ を同時確率や結合確率 (joint probability) と言います。ここでは、時間は右から増加していくとして書いていきます ($t_1 < t_2 < \cdots < t_n$)。また、同時に起こる確率を表しているので、$(t_n,x_n;\cdots;t_1,x_1)$ の並びは変えられます。そして、同時確率 W_n の積分

$$\int dx_{i+1}\cdots dx_n W_n(t_n,x_n;t_{n-1},x_{n-1};\cdots;t_1,x_1) = W_i(t_i,x_i;t_{i-1},x_{i-1};\cdots;t_1,x_1) \tag{1}$$

によって W_n の周辺確率 (marginal probability)W_i は定義されます。例えば、$W_1(t_1,x_1)$ は $W_2(t_2,x_2;t_1,x_1)$ の x_2 積分による周辺確率です。

W_n を考えるのは大変なので、W_1 と W_2 だけから必要な情報が取り出せるような状況を作ります。そのために、W_1 と W_2 を繋げるものを定義します。それを w_n として

$$W_2(t_2,x_2;t_1,x_1) = w_2(t_2,x_2|t_1,x_1)W_1(t_1,x_1)$$

この定義から分かるように、$w(t_2,x_2|t_1,x_1)$ は条件付き確率 (conditional probability) です。また、この形から推移確率 (transition probability) とも呼ばれます。同時確率では同時に起きている現象を「;」で区切り、条件付き確率では条件となる現象を「|」で区切っています。この場合で言えば、$W_2(t_2,x_2;t_1,x_1)$ は x_1,x_2 に時間 t_1,t_2 で粒子がいる確率で、$W_1(t_1,x_1)$ では t_1 で x_1 にいる確率が指定されているので、$w_2(t_2,x_2|t_1,x_1)$ と書いています。これの x_1 積分を実行してみると (1) から

$$\begin{aligned}
\int dx_1 W_2(t_2,x_2;t_1,x_1) &= \int dx_1 w_2(t_2,x_2|t_1,x_1)W_1(t_1,x_1) \\
W_1(t_2,x_2) &= \int dx_1 w_2(t_2,x_2|t_1,x_1)W_1(t_1,x_1)
\end{aligned}$$

また、(1) を変形すると

$$\begin{aligned}
W_1(t_1,x_1) &= \int dx_2 W_n(t_2,x_2|t_1,x_1) \\
&= \int dx_2 w_2(t_2,x_2|t_1,x_1)W_1(t_1,x_1)
\end{aligned}$$

から

$$\int dx_2 w_2(t_2, x_2|t_1, x_1) = 1 \tag{2}$$

となっています。この w_n も W_n と同じように、$w_n(t_n, x_n|t_{n-1}, x_{n-1}; \cdots ; t_1, x_1)$ とできます ($t_n > \cdots > t_1$)。これは t_1 で x_1、$\cdots$、t_{n-1} で x_{n-1} となっている確率に対応させるものです。しかし、ここでは、w_n は最後とその 1 個前の情報だけで表現できるとして

$$w_n(t_n, x_n|t_{n-1}, x_{n-1}; \cdots ; t_1, x_1) = w_2(t_n, x_n|t_{n-1}, x_{n-1})$$

という制限をかけます。このような制限をかけたものをマルコフ過程 (Markov process) と言います。マルコフ過程は過去の情報が未来の状態と無関係とする過程なので、このような制限をかけることでマルコフ過程に対応します。マルコフ過程はランダムウォークにも対応します。

このように定義した w_n によって、W_n を W_1 と W_2 で書けます。例えば W_3 は

$$\begin{aligned}
W_3(t_3, x_3; t_2, x_2; t_1, x_1) &= w_2(t_3, x_3|t_2, x_2) W_2(t_2, x_2; t_1, x_1) \\
&= \frac{W_2(t_3, x_3; t_2, x_2)}{W_1(t_2, x_2)} W_2(t_2, x_2; t_1, x_1)
\end{aligned}$$

となります。正確には w_n の定義から、1 行目は $w_3(t_3, x_3|t_2, x_2; t_1, x_1) W_2(t_2, x_2; t_1, x_1)$ から始まります。これ以降も同様で、W_4 は

$$\begin{aligned}
W_4(t_4, x_4; t_3, x_3; t_2, x_2; t_1, x_1) &= w_2(t_4, x_4|t_3, x_3) W_3(t_3, x_3; t_2, x_2; t_1, x_1) \\
&= w_2(t_4, x_4|t_3, x_3) \frac{W_2(t_3, x_3; t_2, x_2)}{W_1(t_2, x_2)} W_2(t_2, x_2; t_1, x_1) \\
&= \frac{W_2(t_4, x_4; t_3, x_3)}{W_1(t_3, x_3)} \frac{W_2(t_3, x_3; t_2, x_2)}{W_1(t_2, x_2)} W_2(t_2, x_2; t_1, x_1)
\end{aligned}$$

W_3 を w_2 を使った形に変形すると

$$\begin{aligned}
W_3(t_3, x_3; t_2, x_2; t_1, x_1) &= \frac{W_2(t_3, x_3; t_2, x_2)}{W_1(t_2, x_2)} W_2(t_2, x_2; t_1, x_1) \\
&= \frac{w_2(t_3, x_3|t_2, x_2) W_1(t_2, x_2)}{W_1(t_2, x_2)} W_2(t_2, x_2; t_1, x_1) \\
&= w_2(t_3, x_3|t_2, x_2) W_2(t_2, x_2; t_1, x_1) \\
&= w_2(t_3, x_3|t_2, x_2) w_2(t_2, x_2|t_1, x_1) W_1(t_1, x_1)
\end{aligned}$$

そして、(1) を使うことで

$$\begin{aligned}
W_2(t_3, x_3; t_1, x_1) &= \int dx_2 W_3(t_3, x_3; t_2, x_2; t_1, x_1) \\
&= \int dx_2 w_2(t_3, x_3|t_2, x_2) w_2(t_2, x_2|t_1, x_1) W_1(t_1, x_1) \\
w_2(t_3, x_3|t_1, x_1) W_1(t_1, x_1) &= \int dx_2 w_2(t_3, x_3|t_2, x_2) w_2(t_2, x_2|t_1, x_1) W_1(t_1, x_1)
\end{aligned}$$

つまり

$$w_2(t_3,x_3|t_1,x_1)=\int dx_2 w_2(t_3,x_3|t_2,x_2)w_2(t_2,x_2|t_1,x_1) \tag{3}$$

これは、$w_2(t_3,x_3|t_1,x_1)$ は $w_2(t_3,x_3|t_2,x_2)w_2(t_2,x_2|t_1,x_1)$ の中間地点 x_2 の可能な全ての値に対して和を取ったものになっていることを示しています (積分は和の連続極限)。これを Chapman-Kolmogorov 方程式や Smoluchowski 方程式と呼びます。

次に w_2 が t_1,t_2 でなく時間の差 $t=t_2-t_1$ に依存しているとします。w_2 を $t\ll 1$ で

$$\begin{aligned}
w_2(t_2,x_2|t_1,x_1) &= (1-\xi t)\delta(x_2-x_1)+\frac{\partial w_2(t_2,x_2|t_1,x_1)}{\partial t}t+O(t^2)\\
&= (1-\xi t)\delta(x_2-x_1)+f(x_2|x_1)t+O(t^2) \qquad (4)
\end{aligned}$$

と展開します。ここで導入した $f(x_2|x_1)$ は単位時間あたりの w_2 と言えます。第一項は $t=0$ で何も変化しない部分を表しています。ξ の項は第二項を消すようにすることで (2) を満たすように入れています (t^2 以降は $t\ll 1$ なので無視します)。なので、

$$\xi(x_1)=\int dy f(y|x_1)$$

となっています。(3) に (4) を入れると ($t=t_2-t_1, t'=t_3-t_2$)

$$\begin{aligned}
w_2(t_3,x_3|t_1,x_1) =& \int dx_2\big((1-\xi(x_2)t')\delta(x_3-x_2)+f(x_3|x_2)t'\big)w_2(t_2,x_2|t_1,x_1)\\
=& \int dx_2\big[w_2(t_2,x_2|t_1,x_1)\delta(x_3-x_2)\\
&\qquad -\xi(x_2)w_2(t_2,x_2|t_1,x_1)\delta(x_3-x_2)t'+f(x_3|x_2)w_2(t_2,x_2|t_1,x_1)t'\big]\\
=& w_2(t_2,x_3|t_1,x_1)-\xi(x_3)w_2(t_2,x_3|t_1,x_1)t'+\int dx_2 f(x_3|x_2)w_2(t_2,x_2|t_1,x_1)t'\\
=& w_2(x_3|x_1;t)-\int dy f(y|x_3)w_2(x_3|x_1;t)t'+\int dx_2 f(x_3|x_2)w_2(x_2|x_1;t)t'\\
w_2(x_3|x_1;t+t')-w_2(x_3|x_1;t) =& -\int dy f(y|x_3)w_2(x_3|x_1;t)t'+\int dx_2 f(x_3|x_2)w_2(x_2|x_1;t)t'\\
\frac{w_2(x_3|x_1;t+t')-w_2(x_3|x_1;t)}{t'} =& \int dx_2\big(f(x_3|x_2)w_2(x_2|x_1;t)-f(x_2|x_3)w_2(x_3|x_1;t)\big)
\end{aligned}$$

途中で $w_2(t_2,x_3|t_1,x_1)=w_2(x_3|x_1;t)$ という表記を使っています。見やすくするために「;」で時間 t を区切っています。t' は t_3-t_2 です。ここで、t' が十分小さいとすれば左辺は微分の定義になるので

$$\frac{\partial w_2(x_3|x_1;t)}{\partial t}=\int dx_2(f(x_3|x_2)w_2(x_2|x_1;t)-f(x_2|x_3)w_2(x_3|x_1;t))$$

この Chapman-Kolmogorov 方程式の微分形をマスター (master) 方程式と言います。この式の w_2 は (W_1 を W で書きます)

$$
\begin{aligned}
W(y,t_2) &= \int dx W_2(y,t_2;x,t_1) \\
&= \int dx w(y,t_2|x,t_1) W(x,t_1) \\
\frac{\partial W(y,t_2)}{\partial t_2} &= \int dx \frac{\partial w(y,t_2|x,t_1)}{\partial t_2} W(x,t_1)
\end{aligned} \tag{5}
$$

と、w_2 での t_1 は任意定数とみなせることから、確率 $W(x,t)$ に置き換えることもできて

$$
\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = \int dy \big(f(x|y)W(y,t) - f(y|x)W(x,t) \big)
$$

x_2 を y、x_3 を x に置き換えて、W_1 を W と書いています。こうするとマスター方程式の意味が分かりやすく、第一項が時間変化に対する確率の増加、第二項が減少を表しています。

さらに、マスター方程式を x, y の差に依存する形に変えます。そのために $f(x|y)$ を最初の位置 y と $x-y$ の関数とします。そうすると、第一項は $l = y - x$ として

$$
\int dy f(x|y)W(y,t) = \int dy f(y,-l)W(y,t) = \int d\alpha f(x+l,-l)W(x+l,t)
$$

第二項は

$$
\int dy f(y|x)W(x,t) = \int dy f(x,l)W(x,t) = \int d\alpha f(x,l)W(x,t)
$$

第一項の積分は積分範囲を書いて変形すると

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} d\alpha f(x+l,-l)W(x+l,t) &= -\int_{\infty}^{-\infty} d\alpha' f(x-l',l')W(x-l',t) \quad (l' = -l) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dl f(x-l,l)W(x-l,t)
\end{aligned}
$$

なので、マスター方程式は

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} &= \int dl \big(f(x-l,l)W(x-l,t) - f(x,l)W(x,t) \big) \\
&= \int dl (G(x-l,l) - G(x,l))
\end{aligned}
$$

そして、l が十分小さいとして $G(x-l,l)$ を展開した

$$
G(x-l,l) = G(x,l) + \sum_{n=1} \frac{1}{n!}(-l)^n (\frac{\partial}{\partial x})^n G(x,l)
$$

これを入れれば

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t}=\int dl\sum_{n=1}\frac{1}{n!}l^n(-\frac{\partial}{\partial x})^nG(x,l)=\sum_{n=1}\frac{1}{n!}(-\frac{\partial}{\partial x})^na_n(x)W(x,t)$$

$a_n(x)$ は

$$a_n(x)=\int dl\ l^nf(x,l)$$

これを Kramers-Moyal 展開と言います。$a_n(x)$ は $f(x_2|x_1)$ が単位時間あたりの w_2 であることから

$$f(x_2|x_1)=\lim_{\Delta t=0}\frac{1}{\Delta t}w_2(x_2,t+\Delta t|x_1,t)$$

と書くこともできるので

$$\begin{aligned}a_n(x)=&\lim_{\Delta t=0}\frac{1}{\Delta t}\int dl\ l^nw_2(y,t+\Delta t|x,t)\\=&\lim_{\Delta t=0}\frac{1}{\Delta t}\int dy\ (y-x)^nw_2(y,t+\Delta t|x,t)\\=&\lim_{\Delta t=0}\frac{1}{\Delta t}\langle(y-x)^n\rangle\end{aligned}$$

この $\langle\ \rangle$ は確率付き条件 $w_2(y,t+\Delta t|x,t)$ による平均です。ここで $X(t)=x$ とすれば、$X(t+\Delta t)=y$ なので

$$a_n(x)=\lim_{\Delta t=0}\frac{1}{\Delta t}\langle(X(t+\Delta t)-X(t))^n\rangle \tag{6}$$

つまり、$a_n(x)$ は確率分布を指定することで決まります。

具体的に決めるために「ブラウン運動」で出てきたランジュバン方程式を持ち出します。ランジュバン方程式は

$$\frac{dv(t)}{dt}=A(v)+F(t)$$

v は速度、$A(v)$ は速度依存する摩擦力、$F(t)$ は揺動力です。質量 m は A と F の中に入れています。揺動力の平均は

$$\langle F(t)\rangle=0\ ,\ \langle F(t_1)F(t_2)\rangle=B\delta(t_1-t_2)$$

となっているとします (「ブラウン運動」での B とは違った定義で、「ブラウン運動」でのを B' とすれば $B'=m^2B/2$)。ランジュバン方程式を t から $t+\Delta t$ の範囲で積分すると

$$v(t+\Delta t)-v(t)=\int_t^{t+\Delta t}dt'A(v(t'))+F(t'))$$

v は時間依存していることを明確にするために $A(v(t'))$ と書いています。Δt が小さければ、A の積分を A' としたとき

$$A'(v(t+\Delta t))-A'(v(t))=A'(v(t))+A(v(t))\Delta t-A'(v(t))=A(v(t))\Delta t$$

となるので

$$v(t+\Delta t)-v(t)\simeq A(v)\Delta t+\int_t^{t+\Delta t}dt'F(t')$$

そして、(6) を位置でなく速度とすれば

$$a_n(x)=\lim_{\Delta t=0}\frac{1}{\Delta t}\langle(A(v)\Delta t+\int_t^{t+\Delta t}dt'F(t'))^n\rangle$$

$n=1$ では

$$a_1(x)=\lim_{\Delta t=0}\frac{1}{\Delta t}\langle A(v)\Delta t+\int_t^{t+\Delta t}dt'F(t')\rangle=A(v)$$

$n=2$ では

$$\begin{aligned}a_2(x)=\lim_{\Delta t=0}\frac{1}{\Delta t}\langle(A(v)\Delta t+\int_t^{t+\Delta t}dt'F(t'))^2\rangle &= \lim_{\Delta t=0}\frac{1}{\Delta t}\langle(\int_t^{t+\Delta t}dt'F(t'))^2\rangle\\ &= \lim_{\Delta t=0}\frac{1}{\Delta t}\int_t^{t+\Delta t}dt'dt''\langle F(t')F(t'')\rangle\\ &= B\lim_{\Delta t=0}\frac{1}{\Delta t}\int_t^{t+\Delta t}dt'dt''\delta(t'-t'')\\ &= B\lim_{\Delta t=0}\frac{1}{\Delta t}\int_t^{t+\Delta t}dt'\\ &= B\end{aligned}$$

同様にやっていけば、$a\geq 3$ では $a_n=0$ です。というわけで、速度 v による Kramers-Moyal 展開にこの結果を入れることで、速度分布 $W(v,t)$ に対する方程式として

$$\frac{\partial W(v,t)}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial v}(A(v)W(v,t))+\frac{1}{2}B\frac{\partial^2}{\partial v^2}W(v,t)$$

この方程式をフォッカー・プランク (Fokker-Plank) 方程式と言います。ここではランジュバン方程式とホワイトノイズの兼ね合いから出てきたことから分かるように、これはブラウン運動用のフォッカー・プランク方程式です。なので、A と B は

$$A=-\frac{\gamma}{m}v(t)=-\gamma'v(t)\ ,\ B=2B'/m^2=\frac{2\gamma'k_BT}{m}$$

となっています。ブラウン運動用にしていないフォッカー・プランク方程式は補足で求めています。重要なこととして、ホワイトノイズを使うと Kramers-Moyal 展開は 2 次までで止まるという点です。これを導出過程から見るために、今のような方法でフォッカー・プランク方程式を導きました。

　フォッカー・プランク方程式の $W(v,t)$ は速度分布に対応しているので、この方程式を解けばブラウン運動の速度分布が分かります。特に時間無限大の極限ではマクスウェル分布

$$W(v,t=\infty)=C\exp[-\frac{mv^2}{2k_BT}]$$

になっています。簡単に求めます。時間無限大の極限なので、$W(v,t)$ は時間独立になっているとして、フォッカー・プランク方程式は

$$\frac{\partial W(v)}{\partial t}=0\ ,\ -\frac{\partial}{\partial v}(A(v)W(v))+\frac{1}{2}B\frac{\partial^2}{\partial v^2}W(v)=0$$

時間微分からは定数になることしか出てきません。v 微分の方から (C は定数)

$$\begin{aligned}\frac{d}{dv}(A(v)W(v))&=\frac{1}{2}B\frac{d^2}{dv^2}W(v)\\ A(v)W(v)&=\frac{1}{2}B\frac{d}{dv}W(v)\\ \frac{dW}{W}&=dv\frac{2A(v)}{B}\\ \log W&=\int dv\frac{2A(v)}{B}\\ W&=C\exp[\int dv\frac{2A(v)}{B}]\\ &=C\exp[-\frac{m\gamma'}{\gamma' k_BT}\int dv\ v]\\ &=C\exp[-\frac{mv^2}{2k_BT}]\end{aligned}$$

となります。

・補足

フォッカー・プランク方程式を別のルートで導きます。といっても、そんなに違う方法ではないです。

$w_2(x_2,t_2|x_1,t_1)$ の時間微分を見ていきます。このとき、w_2 は t_2-t_1 に依存しているとして、$t=t_2-t_1$ とします。そうすると、t 微分は微分の定義から

$$\begin{aligned}\frac{\partial w_2(x_2,t_2|x_1,t_1)}{\partial t}&=\frac{w_2(x_2,t_2+\Delta t|x_1,t_1)-w_2(x_2,t_2|x_1,t_1)}{\Delta t}\\ &=\frac{1}{\Delta t}\Big(\int dyw_2(x_2,t_2+\Delta t|y,t_2)w_2(y,t_2|x_1,t_1)-w_2(x_2,t_2|x_1,t_1)\Big)\\ &=\frac{1}{\Delta t}\Big(\int dyw_2(x_2|y;\Delta t)w_2(y|x_1;t)-w_2(x_2|x_1;t)\Big)\end{aligned}$$

最後に $w_2(x_2,t_2|x_1,t_1)=w_2(x_2|x_1;t)$ の表記に変えています。これに x_2 に依存する関数 $F(x_2)$ をかけて x_2 積分した

$$\int dx_2F(x_2)\frac{\partial w_2(x_2|x_1;t)}{\partial t}=\frac{1}{\Delta t}\int dx_2dyF(x_2)\big(w_2(x_2|y;\Delta t)w_2(y|x_1;t)-w_2(x_2|x_1;t)\big)$$

こんなのを考えます。$F(x_2)$ は y 周りでテーラー展開できるとして

$$
\begin{aligned}
&\int dx_2 F(x_2)\frac{\partial w_2(x_2|x_1;t)}{\partial t}\\
&=\frac{1}{\Delta t}\Big(\int dx_2 dy F(x_2) w_2(x_2|y;\Delta t) w_2(y|x_1;t)-\int dx_2 F(x_2) w_2(x_2|x_1;t)\Big)\\
&=\frac{1}{\Delta t}\Big(\int dx_2 dy \big(F(y)+\frac{\partial F(x_2)}{\partial x_2}|_{x_2=y}(x_2-y)+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 F(x_2)}{\partial x_2^2}|_{x_2=y}(x_2-y)^2+\cdots\big) w_2(x_2|y;\Delta t) w_2(y|x_1;t)\\
&\qquad -\int dx_2 F(x_2) w_2(x_2|x_1;t)\Big)\\
&=\frac{1}{\Delta t}\Big(\int dx_2 dy F(y) w_2(x_2|y;\Delta t) w_2(y|x_1;t)\\
&\qquad +\int dx_2 dy \frac{\partial F(x_2)}{\partial x_2}|_{x_2=y}(x_2-y) w_2(x_2|y;\Delta t) w_2(y|x_1;t)\\
&\qquad +\frac{1}{2}\int dx_2 dy \frac{\partial^2 F(x_2)}{\partial x_2^2}|_{x_2=y}(x_2-y)^2 w_2(x_2|y;\Delta t) w_2(y|x_1;t)\\
&\qquad +\cdots\\
&\qquad -\int dx_2 F(x_2) w_2(x_2|x_1;t)\Big)
\end{aligned}
$$

さらに、$(x_2-y)^n w_2(x_2|y;\Delta t)$ 部分を Δt で展開して

$$
\begin{aligned}
&\int dx_2 (x_2-y) w_2(x_2|y;\Delta t)=C_1(y)\Delta t+O(\Delta t^2)\\
&\int dx_2 (x_2-y)^2 w_2(x_2|y;\Delta t)=C_2(y)\Delta t+O(\Delta t^2)\\
&\int dx_n (x_2-y)^n w_2(x_2|y;\Delta t)=O(\Delta t^2)+\cdots \qquad (n>2)
\end{aligned}
$$

とします。ここで、$n>2$ では Δt^2 以上のオーダがいると仮定しています。これは $\Delta t\to 0$ となる微小な時間間隔では位置の差も十分小さいだろうとして、$n\leq 2$ までの寄与を拾うという仮定です (上での導出と同じようにホワイトノイズを仮定すれば $n>2$ は消える)。

　Δt^{-1} がいるので、Δt^2 以上のオーダは $\Delta t\to 0$ で消えます。これによって

$$
\begin{aligned}
\int dx_2 F(x_2)\frac{\partial w_2(x_2|x_1;t)}{\partial t}&=\frac{1}{\Delta t}\Big(\int dy F(y) w_2(y|x_1;t)\int dx_2 w_2(x_2|y;\Delta t)\\
&\qquad +\int dy\frac{\partial F(y)}{\partial y}C_1(y) w_2(y|x_1;t)\Delta t+\frac{1}{2}\int dy \frac{\partial^2 F(y)}{\partial y^2}C_2(y) w_2(y|x_1;t)\Delta t\\
&\qquad -\int dx_2 F(x_2) w_2(x_2|x_1;t)\Big)\\
&=\int dy\frac{\partial F(y)}{\partial y}C_1(y) w_2(y|x_1;t)+\frac{1}{2}\int dy \frac{\partial^2 F(y)}{\partial y^2}C_2(y) w_2(y|x_1;t)
\end{aligned}
$$

最初に (2) を使っています。見やすくするために微分を y 微分としてます。$F(y)$ は勝手に導入した関数なので積分の上限と下限で消えるとすれば、部分積分によって

$$
\begin{aligned}
&\int dy \frac{\partial F(y)}{\partial y} C_1(y) w_2(y|x_1;t) + \frac{1}{2}\int dy \frac{\partial^2 F(y)}{\partial y^2} C_2(y) w_2(y|x_1;t) \\
&= \int dy F(y)(-\frac{\partial}{\partial y} C_1(y) w_2(y|x_1;t) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} C_2(y) w_2(y|x_1;t))
\end{aligned}
$$

よって

$$
\int dy F(y) \frac{\partial w_2(y|x_1;t)}{\partial t} = \int dy F(y)(-\frac{\partial}{\partial y} C_1(y) w_2(y|x_1;t) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} C_2(y) w_2(y|x_1;t))
$$

なので

$$
\frac{\partial w_2(y|x_1;t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y}\big(C_1(y) w_2(y|x_1;t)\big) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\big(C_2(y) w_2(y|x_1;t)\big)
$$

このようにフォッカー・プランク方程式が出てきます。(5) を使えば W による形に持って行けます。
速度にするには

$$
\begin{aligned}
&\int dx_2 (x_2 - y) w_2(x_2|y;\Delta t) = C_1(y)\Delta t + O(\Delta t^2) \\
&\Rightarrow \int dv (v - v_0) w_2(v,t|v_0,t_0) = C_1(y)\Delta t + O(\Delta t^2)
\end{aligned}
$$

t_0 で v_0 となっている速度依存する関数 $g(v)$ の v による平均は、条件付き確率 $w_2(v,t|v_0,t_0)$ によって

$$
\langle g(v)\rangle = \int dv g(v) w_2(v,t|v_0,t_0)
$$

なので、$v - v_0$ の平均はランジュバン方程式から

$$
\begin{aligned}
\langle v - v_0\rangle &= \int dv (v - v_0) w_2(v,t|v_0,t_0) \\
&= e^{-\gamma\Delta t/m} v_0 - v_0 \quad (\langle v(t)\rangle = e^{-\gamma t/m} v_0)
\end{aligned}
$$

Δt が小さければ $v \simeq v_0$ と近似できるので

$$
\langle v - v_0\rangle \simeq v_0 - \frac{\gamma}{m} v_0 \Delta t - v_0 \simeq -\frac{\gamma}{m} v \Delta t
$$

よって

$$
C_1(y) = -\frac{\gamma}{m} v = -\gamma' v = A
$$

$(v - v_0)^2$ では

$$
\langle v^2\rangle = e^{-2\gamma'\Delta t} v_0^2 + \frac{B'}{\gamma m}(1 - e^{-2\gamma'\Delta t})
$$

を使うことで

$$
\begin{aligned}
\langle (v-v_0)^2 \rangle &= \langle v^2 + v_0^2 - 2v_0 v \rangle \\
&= e^{-2\gamma' \Delta t} v_0^2 + \frac{B'}{\gamma m}(1 - e^{-2\gamma' \Delta t}) + v_0^2 - 2e^{-\gamma' \Delta t} v_0^2 \\
&= v_0^2 - 2\gamma' v_0^2 \Delta t + \frac{2B'}{m^2}\Delta t + v_0^2 - 2v_0^2 + 2\gamma' v_0^2 \Delta t \\
&= \frac{2B'}{m^2}\Delta t \\
&= \frac{2\gamma' k_B T}{m}\Delta t
\end{aligned}
$$

よって

$$
C_2 = \frac{2\gamma' k_B T}{m} = B
$$

というわけで、同じフォッカー・プランク方程式になります。