Langevin 方程式と

Fokker Planck 方程式

渡辺澄夫

東京工業大学

１　特性関数と分布収束

特性関数(フーリエ変換)

$(\Omega, \mathcal{B}, \mu)$ 確率空間

$X:\Omega\to\mathbf{R}^N$ 確率変数　確率分布 P を持つとする

$k\in\mathbf{R}^N$ 特性関数を $\phi(k) = E[\exp(ik\cdot X)]$ と

定義する(特性関数は必ず存在).

(例)　X の密度関数を p(x) とするとき

$$\phi(k) = \int \exp(ik\cdot x)\, p(x)\, dx$$

だから部分積分を用いて

$$-ik\phi(k) = \int \exp(ik\cdot x)\, (d/dx)\, p(x)\, dx$$

特性関数の例

例　D, t >0 とする。正規分布　$x \in \mathbf{R}^N$

$$p(x|t) = 1/(4\pi Dt)^{N/2} \exp(-\|x\|^2/(4Dt))$$

の特性関数は

$$\phi(k) = \exp(-Dt\|k\|^2)$$

特性関数は便利

X と Y が独立

$\Leftrightarrow E[\exp(it(X+Y))] = E[\exp(itX)]\, E[\exp(itY)]$

※ 3個以上の独立性についても同じ
※ 証明は本編で

$\{X_n\}$ 確率変数列の特性関数列を $\{\phi_n(t)\}$ とする。

$\{X_n\}$ が分布収束 $\Leftrightarrow$ $\{\phi_n(t)\}$ が原点近傍で一様収束

※ $\phi_n(t)$の収束先が特性関数なら各点収束で十分
※ 証明は本編で

例

例１　X の分布が $[0,1]$上の一様分布のときの特性関数を求めよ

例2　X_n の分布が $(1/n)\{\sum_{i=1}^{n} \delta(x-i/n)\}$ のとき特性関数を求めよ

例3　X_n は X に分布収束することを示せ

例4　Y_n の分布が $[0, n]$ 上の一様分布のとき特性関数を求めよ

例5　Z_nの分布が $[0, 1/n]$ 上の一様分布のとき特性関数を求めよ

例6　Y_n と Z_n が分布収束するかどうかを判定せよ

２　ブラウン運動

正規分布の性質

D, t >0 とする。正規分布　$x \in \mathbf{R}^N$

$$p(x|t) = 1/(4\pi Dt)^{N/2} \exp(-\|x\|^2/(4Dt))$$

これは平均0分散が 2Dt の正規分布である。

この分布は次の微分方程式を満たす

$$(\partial/\partial t)\ p(x|t) = D\ \Delta\ p(x|t) \qquad ①式$$

ここで $\Delta = \nabla \cdot \nabla = \sum (\partial/\partial x_i)^2$

①式を熱伝導の方程式と呼ぶ。

①式の確認

$p(x|t) = \exp(\ L(x|t)\ )$

$L(x|t) = -(N/2) \log (4\pi Dt) - ||x||^2/(4Dt)$

まず $(\partial / \partial t)\ p(x|t) = \exp(L(x|t))\ (\partial L / \partial t)$

$= \exp(L(x|t))\ \{-(N/2t) + ||x||^2/(4Dt^2)\}$

一方 $D\ \Delta\ p(x|t) = D \nabla \cdot (\nabla\ \exp(\ L(x|t)\ )\ )$

$= D \nabla \cdot \{\ \exp(\ L(x|t)\ )\ (-x/(2Dt)\ )\}$

$= \exp(\ L(x|t)\ )\ \{\ ||x||^2/(4Dt^2) - N/(2t)\ \}$

なので証明できた。

ブラウン運動の数学的な定義

確率変数の集合 $\{ B_t \, ; t>0 \}$ がブラウン運動であるとは

(a) 各 B_t の分布は $p(x|t)$ である。

(b) 任意の有限個の $0<t_1<t_2<\cdots<t_k$ について

確率変数の集合 $\{B_{t_{j+1}}-B_{t_j} \, ; j=1,2,\cdots,k-1\}$ は独立

（注意）$dB_t \,/dt$ は超関数に値をとる確率変数と考えることができる。これを白色雑音と呼ぶ。$dB_t \,/dt$ を t について積分するとブラウン運動が得られる。

3　最急降下法と Langevin 方程式

最急降下法と離散化

E(x) を$x \in \mathbf{R}^N$ のある関数とする。最急降下法は

$$dx/dt = -\nabla E(x),$$

$$x(0) = 0.$$

これの離散化は 単位時間を$\eta > 0$ として $t = \eta, 2\eta, \cdots$

$$x(t+\eta) - x(t) = -\eta \nabla E(x(t)),$$

$$x(0) = 0.$$

雑音あり離散化最急降下法と Langevin 方程式

離散化最急降下法にブラウン運動 B_η を加えたもの

$$X(t+\eta) - X(t) = -\eta \nabla E(X(t)) + B_\eta \qquad ②式$$

※ B_η はの標準偏差は sqrt(η) に比例する
※ E=一定のときはランダムウォーク

ここで $\eta \to +0$ にしたものを考えて次の Langevin 方程式を得る(確率微分方程式の一種)。

$$dX_t = -\nabla E(X_t)\, dt + dB_t$$

4　Fokker-Planck 方程式

Fokker-Planck 方程式

方程式　$X(t+\eta) - X(t) = -\eta \nabla E(X(t)) + B_\eta$

に従う確率変数 $\{X(t)\}$ の確率密度関数は $\eta \to +0$ のとき次のFokker−Planck方程式を満たす関数に収束する。

$$(\partial / \partial t)\, p(x|t) - \nabla \cdot \{(\nabla E(x))\, p(x|t)\} = D\ \Delta\ p(x|t)$$

証明:

表記を簡単にするため N= 1の場合を書く。

$$(\partial / \partial t)\, p(x|t) - (d/dx)\{(d/dx)E(x))\, p(x|t)\} = D(d/dx)^2\, p(x|t)$$

を示せばよい。以下では↑を示す。

証明

特性関数の定義から

$$
\begin{cases}
\phi_{t+\eta}(k) = \int p(x|t+\eta)\exp\{ikx\}\,dx \\
\phi_t(k) = \int p(x|t)\exp\{ikx\}\,dx
\end{cases}
$$

次の式を二通りの方法で計算して$\eta\to+0$で
等しくなることを用いて証明する。まず

$$[\phi_{t+\eta}(k) - \phi_t(k)]/\eta$$

$$= \int \{p(x|t+\eta) - p(x|t)\}/\eta \exp\{ikx\}\,dx$$

$$\to \int (d/dt)\,p(x|t)\exp\{ikx\}\,dx \qquad \text{式☆}$$

証明

次に

Lengevin 方程式 $X(t+\eta) = X(t) - \eta E'(X(t)) + B_\eta$

と特性関数の定義 $\phi_t(k) = \int p(x|t) \exp\{ ikx \} \, dx$

X(t) と R_η が独立と正規分布の特性関数を用いると

$$(\phi_{t+\eta}(k) - \phi_t(k))/\eta$$

$$= \int p(x|t) \exp\{ ikx \} [\exp(-i\eta kE'(x) - D\eta k^2) - 1]/\eta \, dx$$

$$= \int p(x|t) \exp\{ ikx \} [-ikE'(x) - Dk^2] \, dx + O(\eta)$$

$$= \int p(x|t) \exp\{ ikx \} [-ikE'(x) - Dk^2] \, dx + O(\eta)$$

証明

フーリエ変換に(−ik) をかける＝元関数に(d/dx)をかける　なので

$$[\ \phi_{t+\eta}(k) - \phi_t(k)\ ] / \eta$$

$$= \int (-ik) \exp\{ ikx \}\, p(x|t)\ \ E'(x)\, dx$$

$$+ D \int (-ik)^2 \exp\{ ikx \}\, p(x|t)\, dx + O(\eta)$$

$$= \int \exp\{ ikx \}\, (d/dx)\, \{p(x|t)\ \ E'(x)\}\ \ dx$$

$$+ \int \exp\{ ikx \}\, D\, (d/dx)^2\, p(x|t)\, dx + O(\eta)$$

この式と式☆とが同じこととフーリエ変換が逆変換を持つこ

とから　赤字の部分が等しく、定理が証明された。

定常分布

$t \to$無限大で $p(x|t) \to p(x)$ を仮定すると

$$-\nabla \cdot \{(\nabla E(x))\, p(x)\} = D\ \Delta\ p(x)$$

$\|x\| \to$無限大で $p(x) \to 0$, $\nabla\ p(x) \to 0$ であることを仮定すると

$$-(\nabla E(x))\, p(x) = D\ \nabla\ p(x)$$

$$-(\nabla E(x)) = D\ \nabla\ \log p(x)$$

定常分布があるとすれば温度 D/k のボルツマン分布

$$p(x) = C \exp(-E(x)/D)$$

５　実験例

どの図か当ててください。

例１　$E(x,y)=x^{12}+y^{12}$

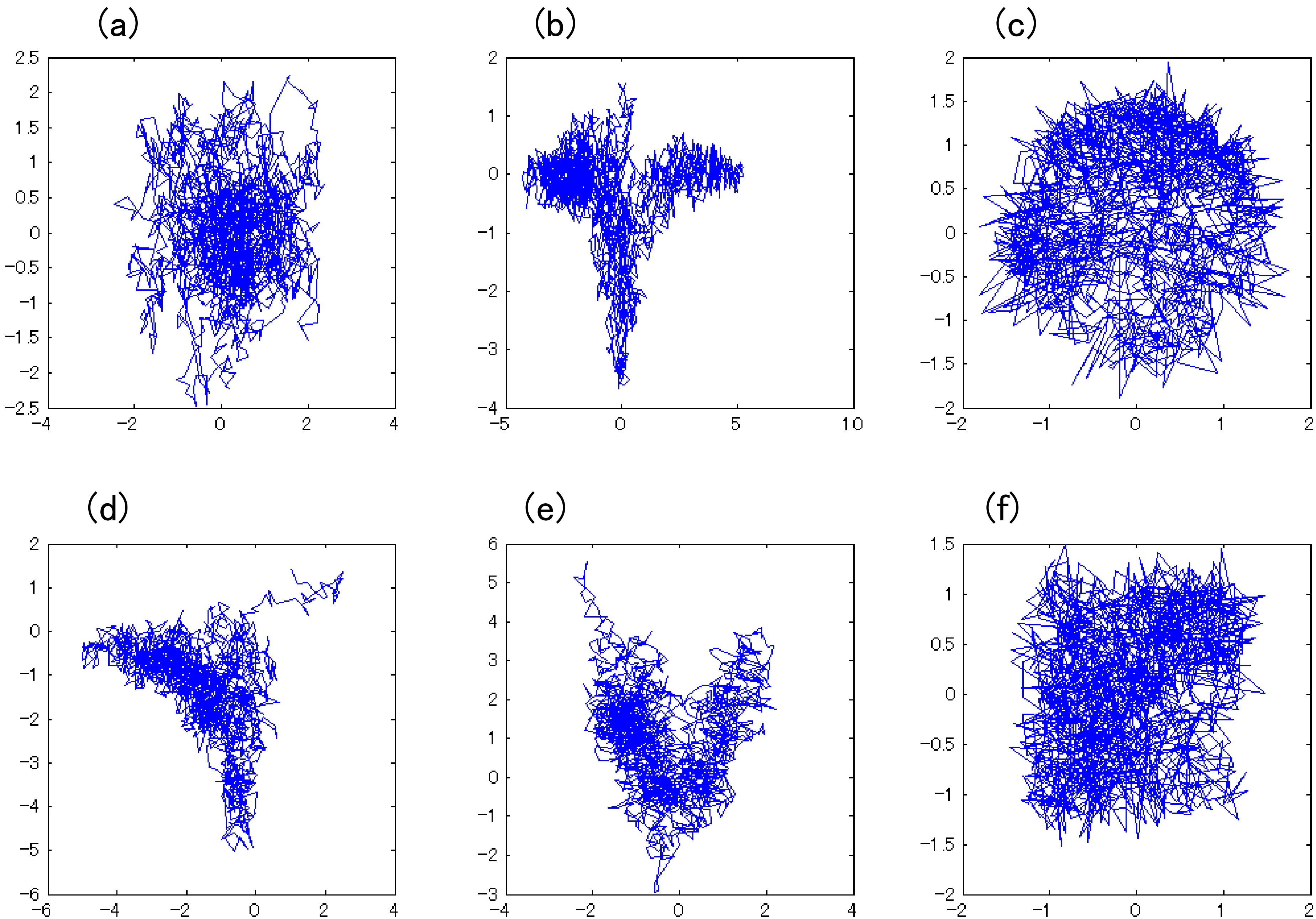
例2　$E(x,y)=(x^2-y)^2$

例3　$E(x,y)=(xy-2)^2$

例4　$E(x,y)=x^2+y^2$

例5　$E(x,y)=x^2y^2$

例6　$E(x,y)=r^4/4-3r^2/2$,　$r=(x^2+y^2)$



(a)
2.5 2 1.5 1 0.5 0 −0.5 −1 −1.5 −2 −2.5
−4 −2 0 2 4
(b)
2 1 0 −1 −2 −3 −4
−5 0 5 10
(c)
2 1.5 1 0.5 0 −0.5 −1 −1.5 −2
−2 −1 0 1 2
(d)
2 1 0 −1 −2 −3 −4 −5 −6
−6 −4 −2 0 2 4
(e)
6 5 4 3 2 1 0 −1 −2 −3
−4 −2 0 2 4
(f)
1.5 1 0.5 0 −0.5 −1 −1.5 −2
−2 −1 0 1 2