非平衡科学　前半レポート

05-211525　齋藤駿一

2022 年 12 月 27 日

1

以下の 2 次元 Fokker-Planck 方程式（引数は省略した）を考える．

$$\partial_t P_{X,Y} = -\partial_x \left(\nu_X P_{X,Y}\right) - \partial_y \left(\nu_Y P_{X,Y}\right), \tag{1}$$
$$\nu_X = \mu F_X - \mu\beta^{-1}\partial_x \ln P_{X,Y}, \tag{2}$$
$$\nu_Y = \mu F_Y - \mu\beta^{-1}\partial_y \ln P_{X,Y}. \tag{3}$$

1.1

平衡とは，任意の場所で確率の流れがゼロとなる定常状態のことである．つまり，任意の (x,y) について

$$\nu_X(x,y;t) = \nu_Y(x,y;t) = 0 \tag{4}$$

が成り立つことである．

1.2

定常とは，任意の場所で確率分布が時刻によらない状態のことである．つまり，任意の (x,y) について

$$\partial_t P_{X,Y}(x,y;t) = 0 \tag{5}$$

が成り立つことである．

1.3

講義資料によると，Fokker-Planck 方程式

$$\partial_t P_X(x;t) = -\partial_x[A^{(1)}(x;t)P_X(x;t)] + \frac{1}{2}\partial_x^2[A^{(2)}(x;t)P_X(x;t)] \tag{6}$$

には Langevin 方程式

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = A^{(1)}(x(t);t) + \sqrt{A^{(2)}(x(t);t)} \cdot \xi(t) \tag{7}$$

が対応する．今回の系は x 成分と y 成分を独立に扱えるので，それぞれについて上のような対応を考えると，x 成分については

$$A^{(1)} = \mu F_X, \qquad A^{(2)} = 2\mu\beta^{-1}, \tag{8}$$

y 成分については

$$A^{(1)} = \mu F_Y, \qquad A^{(2)} = 2\mu\beta^{-1} \tag{9}$$

となる．したがって，Fokker-Planck 方程式 (1) に対応する Langevin 方程式は

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \mu F_X + \sqrt{2\mu\beta^{-1}} \cdot \xi(t) \tag{10}$$

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = \mu F_Y + \sqrt{2\mu\beta^{-1}} \cdot \xi(t) \tag{11}$$

と与えられる．

1.4

式 (1) に式 (2) および式 (3) を代入すると，

$$\partial_t P_{X,Y} = -\mu\partial_x(F_X P_{X,Y}) + \mu\beta^{-1}\partial_x^2 P_{X,Y} - \mu\partial_y(F_Y P_{X,Y}) + \mu\beta^{-1}\partial_y^2 P_{X,Y} \tag{12}$$

が得られる．この右辺の第 1 項は x 方向に働く力 F_X による駆動を表し，第 2 項は x 方向の拡散を表す．これらはそれぞれ式 (10) の右辺第 1 項，第 2 項に対応する．同様に，上式の第 3 項と第 4 項は，y 方向の駆動と拡散なので，それぞれ (11) の右辺第 1 項，第 2 項に対応する．

1.5

力を次のように与える．

$$F_X = -\partial_x U(x,y), \tag{13}$$

$$F_Y = -\partial_y U(x,y), \tag{14}$$

$$U(x,y) = \frac{k}{2}\left(x^2 + y^2\right). \tag{15}$$

このとき，

$$\nu_X = -\mu\partial_x\left(U(x,y) + \beta^{-1}\ln P_{X,Y}(x,y;t)\right), \tag{16}$$

$$\nu_Y = -\mu\partial_y\left(U(x,y) + \beta^{-1}\ln P_{X,Y}(x,y;t)\right), \tag{17}$$

となるので，平衡の条件 (4) から，平衡分布 $P^{\mathrm{eq}}_{X,Y}$ に対して

$$\partial_x\left(U(x,y) + \beta^{-1}\ln P^{\mathrm{eq}}_{X,Y}(x,y)\right) = \partial_y\left(U(x,y) + \beta^{-1}\ln P^{\mathrm{eq}}_{X,Y}(x,y)\right) = 0 \tag{18}$$

が成り立つ．よって，$U + \beta^{-1} \ln P^{\mathrm{eq}}_{X,Y}$ は (x,y,t) のいずれにもよらない関数となるので，

$$U(x,y) + \beta^{-1} \ln P^{\mathrm{eq}}_{X,Y}(x,y) = \mathrm{const.} =: c \tag{19}$$

となる．したがって，

$$P^{\mathrm{eq}}_{X,Y}(x,y) = e^c e^{-\beta U(x,y)} \tag{20}$$

が成り立つ．この両辺を x, y について積分すると，規格化条件より，

$$\begin{aligned} 1 &= e^c \int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}y \, e^{-\beta U(x,y)} \\ \therefore e^c &= \left[\int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}y \, e^{-\beta U(x,y)} \right]^{-1} \end{aligned} \tag{21}$$

となる．具体的な U の表式を代入して計算すると，

$$\int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}y \, e^{-\beta U(x,y)} = \frac{2\pi}{\beta k} \tag{22}$$

となるので，

$$e^c = \frac{\beta k}{2\pi} \tag{23}$$

が分かる．よって，平衡分布は

$$P^{\mathrm{eq}}_{X,Y}(x,y) = \frac{\beta k}{2\pi} e^{-\frac{\beta k}{2}\left(x^2+y^2\right)} \tag{24}$$

と求まる．

1.6

解けなかったが，分かったところまで書く．

定常分布を $P^{\mathrm{st}}_{X,Y}$ とおき，さらに

$$\nu^{\mathrm{st}}_X := \mu F_X - \beta^{-1} \partial_x \ln P^{\mathrm{st}}_{X,Y} = \mu(-kx + ay) - \mu\beta^{-1} \partial_x \ln P^{\mathrm{st}}_{X,Y} \tag{25}$$

$$\nu^{\mathrm{st}}_Y := \mu F_Y - \beta^{-1} \partial_y \ln P^{\mathrm{st}}_{X,Y} = \mu(-ax - ky) - \mu\beta^{-1} \partial_y \ln P^{\mathrm{st}}_{X,Y} \tag{26}$$

とおくと，

$$\partial_x(\nu^{\mathrm{st}}_X P^{\mathrm{st}}_{X,Y}) + \partial_x(\nu^{\mathrm{st}}_X P^{\mathrm{st}}_{X,Y}) = 0 \tag{27}$$

が成り立つ．代入して整理すると，

$$(\partial_x^2 + \beta k x \partial_x) P^{\mathrm{st}}_{X,Y} + (\partial_y^2 + \beta k y \partial_y) P^{\mathrm{st}}_{X,Y} = -2\beta k P^{\mathrm{st}}_{X,Y} - \beta a (x\partial_y - y\partial_x) P^{\mathrm{st}}_{X,Y} \tag{28}$$

となる．ここで，関数 $F(x,y)$ を

$$P^{\mathrm{st}}_{X,Y} = e^{-\frac{\beta k}{2}(x^2+y^2)} F(x,y) \tag{29}$$

とおいて，上式を整理すると，

$$(\partial_x^2+\partial_y^2)F(x,y)=-\beta a(x\partial_y-y\partial_x)F(x,y) \tag{30}$$

が得られる．さらに，直交座標 (x,y) の代わりに極座標 (r,θ) を用いると，

$$F(r,\theta):=F(x=r\cos\theta,y=r\sin\theta) \tag{31}$$

として，

$$\left(\partial_r^2+\frac{1}{r}\partial_r+\frac{1}{r^2}\partial_\theta^2\right)F(r,\theta)=-\beta a\partial_\theta F(r,\theta) \tag{32}$$

が分かる．これを変数分離して解こうとしたがうまくいかなかった．

問題の解答にはならないが，確率の非負性を満たさない定常分布は次のように求まった．問題を簡単にするため

$$\partial_\theta F(r,\theta)=0 \tag{33}$$

と仮定すると，

$$\left(\partial_r^2+\frac{1}{r}\partial_r\right)F(r,\theta)=0 \tag{34}$$

となる．この解は任意定数 c を用いて

$$F(r,\theta)=c\ln r \tag{35}$$

と書ける．したがって，

$$P_{X,Y}^{\mathrm{st}}=ce^{-\frac{\beta kr^2}{2}}\ln r \tag{36}$$

と書ける．これは確率の非負性を満たさないが，規格化条件を満たすように c を

$$c=\left[\int_0^\infty e^{-\frac{\beta kr^2}{2}}\ln r\cdot 4\pi r^2\,\mathrm{d}r\right]^{-1} \tag{37}$$

ととることはできる．この積分は，$u=\beta kr^2/2$ と変数変換し，積分の公式を用いると，

$$\begin{aligned}\int_0^\infty e^{-\frac{\beta kr^2}{2}}\ln r\cdot 4\pi r^2\,\mathrm{d}r &= \frac{2\sqrt{2}\pi}{(\beta k)^{3/2}}\left[\ln\frac{2}{\beta k}\cdot\int_0^\infty u^{1/2}e^{-u}\,\mathrm{d}u+\int_0^\infty u^{1/2}e^{-u}\ln u\,\mathrm{d}u\right]\\ &= \frac{2\sqrt{2}\pi}{(\beta k)^{3/2}}\left[\frac{\sqrt{\pi}}{2}\ln\frac{2}{\beta k}+\frac{\sqrt{\pi}}{2}(2-\gamma-\ln 4)\right]\\ &= \sqrt{\frac{2\pi^3}{(\beta k)^3}}\,[2-\gamma-\ln(2\beta k)]\end{aligned} \tag{38}$$

と書き直せる[*1]．ただし，γ はオイラー定数である．以上より，確率の非負性を満たさない定常分布

$$P_{X,Y}^{\mathrm{st}}=\frac{1}{2-\gamma-\ln(2\beta k)}\sqrt{\frac{(\beta k)^3}{2\pi^3}}e^{-\frac{\beta k}{2}(x^2+y^2)}\ln\sqrt{x^2+y^2} \tag{39}$$

が得られる．

[*1] 実際には Wolfram Alpha を用いた．