非平衡科学　後半レポート

05-211525　齋藤駿一

2023 年 1 月 9 日

1

Fokker-Planck 方程式

$$\partial_t P_X(x;t) = -\partial_x \left[\nu_X(x;t) P_X(x;t)\right], \tag{1}$$

$$\nu_X(x;t) = -\mu \partial_x \left[U(x) + \beta^{-1} \ln P_X(x;t)\right], \tag{2}$$

$$U(x) = \frac{1}{2} k x^2 \tag{3}$$

を考える．加えて，確率分布はガウス分布

$$P_X(x;t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \mathrm{Var}_t[x]}} \exp\left\{-\frac{(x - \mathbb{E}_t[x])^2}{2\mathrm{Var}_t[x]}\right\} \tag{4}$$

で与えられるとする．

このとき，

$$\mathbb{E}_t[x] = \int \mathrm{d}x\, x P_X(x;t) \tag{5}$$

$$\mathrm{Var}_t[x] = \int \mathrm{d}x \left(x - \mathbb{E}_t[x]\right)^2 P_X(x;t) = \int \mathrm{d}x\, x^2 P_X(x;t) - \mathbb{E}_t^2[x] \tag{6}$$

が成り立つ．以下では，関数の引数は基本的に省略する．

1.1

x の期待値 $\mathbb{E}_t[x]$ の時間微分は，

$$\begin{aligned}\partial_t \mathbb{E}_t[x] &= \partial_t \int \mathrm{d}x\, x P_X = \int \mathrm{d}x\, x\, \partial_t P_X = -\int \mathrm{d}x\, x\, \partial_x \left(\nu_X P_X\right) \\ &= -\left[x \nu_X P_X\right]_{x=-\infty}^{\infty} + \int \mathrm{d}x\, \nu_X P_X = \int \mathrm{d}x\, \nu_X P_X\end{aligned} \tag{7}$$

となる．さらに，

$$\nu_X P_X = -\mu \left[(\partial_x U) P_X + \beta^{-1} \partial_x P_X\right] = -\mu \left[k x P_X + \beta^{-1} \partial_x P_X\right] \tag{8}$$

より，

$$
\begin{aligned}
\int \mathrm{d}x\,\nu_X P_X &= -\mu k \int \mathrm{d}x\,x P_X - \mu\beta^{-1}\int \mathrm{d}x\,\partial_x P_X \\
&= -\mu k \mathbb{E}_t[x] - \mu\beta^{-1}\left[P_X\right]_{x=-\infty}^{x=\infty} = -\mu k \mathbb{E}_t[x]
\end{aligned} \tag{9}
$$

が分かる．したがって，

$$
\partial_t \mathbb{E}_t[x] = -\mu k \mathbb{E}_t[x] \tag{10}
$$

が成り立つ．

1.2

x の分散 $\mathrm{Var}_t[x]$ の時間微分は，

$$
\begin{aligned}
\partial_t \mathrm{Var}_t[x] &= \partial_t\left[\int \mathrm{d}x\,(x-\mathbb{E}_t[x])^2\,P_X\right] \\
&= \int \mathrm{d}x\,2\,(x-\mathbb{E}_t[x])\,(-\partial_t\mathbb{E}_t[x])P_X + \int \mathrm{d}x\,(x-\mathbb{E}_t[x])^2\,\partial_t P_X \\
&= 2\mu k \mathbb{E}_t[x]\int \mathrm{d}x\,(x-\mathbb{E}_t[x])\,P_X - \int \mathrm{d}x\,(x-\mathbb{E}_t[x])^2\,\partial_x\left(\nu_X P_X\right) \\
&= 0 - \left[(x-\mathbb{E}_t[x])^2\,\nu_X P_X\right]_{x=-\infty}^{\infty} + \int \mathrm{d}x\,2\,(x-\mathbb{E}_t[x])\,\nu_X P_X \\
&= 2\int \mathrm{d}x\,(x-\mathbb{E}_t[x])\,\nu_X P_X
\end{aligned} \tag{11}
$$

となる．ただし，3 番目の等号で前問の結果を用いた．さらに，式 (8) より，

$$
\begin{aligned}
\int \mathrm{d}x\,(x-\mathbb{E}_t[x])\,\nu_X P_X &= -\mu k\int \mathrm{d}x\,x\,(x-\mathbb{E}_t[x])\,P_X - \mu\beta^{-1}\int \mathrm{d}x\,(x-\mathbb{E}_t[x])\,\partial_x P_X \\
&= -\mu k\left[\int \mathrm{d}x\,x^2 P_X(x;t) - \mathbb{E}_t^2[x]\right] \\
&\qquad - \mu\beta^{-1}\left[(x-\mathbb{E}_t[x])\,P_X\right]_{x=-\infty}^{\infty} + \mu\beta^{-1}\int \mathrm{d}x\,P_X \\
&= -\mu k \mathrm{Var}_t[x] + \mu\beta^{-1}
\end{aligned} \tag{12}
$$

が分かる．したがって，

$$
\partial_t \mathrm{Var}_t[x] = -2\mu k \mathrm{Var}_t[x] + 2\mu\beta^{-1} \tag{13}
$$

が成り立つ．

1.3

Kullback-Leibler ダイバージェンスの定義式

$$
D_{\mathrm{KL}}(P_X(t)||P_X^{\mathrm{eq}}) = \int \mathrm{d}x\,P_X \ln\frac{P_X}{P_X^{\mathrm{eq}}(x)} \tag{14}
$$

に式 (4) および

$$P_X^{\mathrm{eq}}(x) = \frac{e^{-\beta U(x)}}{\int \mathrm{d}y\, e^{-\beta U(y)}} = \frac{e^{-\beta k x^2/2}}{\int \mathrm{d}y\, e^{-\beta k y^2/2}} = \sqrt{\frac{\beta k}{2\pi}} e^{-\beta k x^2/2} \tag{15}$$

を代入すると，

$$\begin{aligned} D_{\mathrm{KL}}(P_X(t)||P_X^{\mathrm{eq}}) &= \int \mathrm{d}x\, P_X \ln \left[\sqrt{\frac{2\pi}{\beta k}} e^{\beta k x^2/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi \mathrm{Var}_t[x]}} \exp\left\{ -\frac{(x - \mathbb{E}_t[x])^2}{2\mathrm{Var}_t[x]} \right\} \right] \\ &= \ln \sqrt{\frac{2\pi/\beta k}{2\pi \mathrm{Var}_t[x]}} \int \mathrm{d}x\, P_X + \int \mathrm{d}x\, P_X \left[-\frac{(x - \mathbb{E}_t[x])^2}{2\mathrm{Var}_t[x]} + \frac{\beta k x^2}{2} \right] \\ &= -\frac{1}{2} \ln\left(\beta k \mathrm{Var}_t[x]\right) - \frac{1}{2} + \frac{\beta k}{2} \left(\mathrm{Var}_t[x] + \mathbb{E}_t^2[x] \right) \end{aligned} \tag{16}$$

が得られる．ただし，最後の変形で式 (6) を用いた．

1.4

時刻 t でのエントロピー生成率は

$$\sigma(t) = \partial_t H - \beta \dot{Q} \tag{17}$$

で与えられる．ここで，シャノンエントロピー

$$H = -\int \mathrm{d}x\, P_X \ln P_X \tag{18}$$

および熱の流入率

$$\dot{Q} = \int_x \mathrm{d}x\, U \partial_t P_X \tag{19}$$

を用いた．

まず，式 (17) の第 1 項は

$$\begin{aligned} \partial_t H &= -\int \mathrm{d}x\, (\partial_t P_X) \ln P_X = \int \mathrm{d}x\, (\partial_x P_X) \ln P_X \\ &= [\nu_X P_X \ln P_X]_{x=-\infty}^{\infty} - \int \mathrm{d}x\, \nu_X P_X \frac{\partial_t P_X}{P_X} \\ &= \mu \int \mathrm{d}x\, \left(kx + \beta^{-1} \partial_x \ln P_X \right) \partial_x P_X \\ &= \mu \left[\left(kx + \beta^{-1} \partial_x \ln P_X \right) P_X \right]_{x=-\infty}^{\infty} - \mu \int \mathrm{d}x\, \left(k + \beta^{-1} \partial_x^2 \ln P_X \right) P_X \\ &= -\mu k - \mu \beta^{-1} \int \mathrm{d}x\, P_X \partial_x^2 \ln P_X \end{aligned} \tag{20}$$

となる．さらに，式 (4) より，

$$\partial_x \ln P_X = -\frac{x - \mathbb{E}_t[x]}{\mathrm{Var}_t[x]}, \qquad \partial_x^2 \ln P_X = -\frac{1}{\mathrm{Var}_t[x]} \tag{21}$$

が分かる．よって，

$$\partial_t H = -\mu k + \frac{\mu\beta^{-1}}{\mathrm{Var}_t[x]} \int \mathrm{d}x \, P_X = -\mu k + \frac{\mu\beta^{-1}}{\mathrm{Var}_t[x]} \tag{22}$$

が成り立つ．

一方，式 (17) の第 2 項は

$$\begin{aligned}\beta\dot{Q} &= -\beta \int \mathrm{d}x \, U\partial_x \left(\nu_X P_X\right) = -\beta \left[U\nu_X P_X\right]_{x=-\infty}^{\infty} + \beta \int \mathrm{d}x \left(\partial_x U\right) \nu_X P_X \\ &= \beta k \int \mathrm{d}x \, x\nu_X P_X \end{aligned}\tag{23}$$

となる．さらに，式 (9)，式 (12) より，

$$\begin{aligned}\int \mathrm{d}x \, x\nu_X P_X &= \int \mathrm{d}x \left(x - \mathbb{E}_t[x]\right) \nu_X P_X + \mathbb{E}_t[x] \int \mathrm{d}x \, \nu_X P_X \\ &= -\mu k \mathrm{Var}_t[x] + \mu\beta^{-1} - \mu k \mathbb{E}_t^2[x] \end{aligned}\tag{24}$$

が分かる．よって，

$$\beta\dot{Q} = -\mu\beta k^2 \left(\mathrm{Var}_t[x] + \mathbb{E}_t^2[x]\right) + \mu k \tag{25}$$

が成り立つ．

したがって，式 (17) は

$$\sigma(t) = \frac{\mu\beta^{-1}}{\mathrm{Var}_t[x]} + \mu\beta k^2 \left(\mathrm{Var}_t[x] + \mathbb{E}_t^2[x]\right) - 2\mu k \tag{26}$$

と計算できる．

1.5

式 (16) より，

$$\beta k \left(\mathrm{Var}_t[x] + \mathbb{E}_t^2[x]\right) = 2D_{\mathrm{KL}}(P_X(t)||P_X^{\mathrm{eq}}) + \ln\left(\beta k \mathrm{Var}_t[x]\right) + 1 \tag{27}$$

が分かる．これを式 (26) に代入すると，

$$\begin{aligned}\sigma(t) &= \frac{\mu\beta^{-1}}{\mathrm{Var}_t[x]} + \mu k \left[2D_{\mathrm{KL}}(P_X(t)||P_X^{\mathrm{eq}}) + \ln\left(\beta k \mathrm{Var}_t[x]\right) + 1\right] - 2\mu k \\ &= 2\mu k D_{\mathrm{KL}}(P_X(t)||P_X^{\mathrm{eq}}) + \mu k \left[\frac{1}{\beta k \mathrm{Var}_t[x]} - 1 - \ln \frac{1}{\beta k \mathrm{Var}_t[x]}\right] \end{aligned}\tag{28}$$

となる．ここで，KL ダイバージェンスの非負性より

$$2\mu k D_{\mathrm{KL}}(P_X(t)||P_X^{\mathrm{eq}}) \geq 0 \tag{29}$$

がいえる．さらに，実数 $z > 0$ に対して関数 $f(z)$ を

$$f(z) = z - 1 - \ln z \tag{30}$$

と定義すると，

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z} = \frac{z-1}{z}, \qquad \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}z^2} = \frac{1}{z^2} > 0 \tag{31}$$

となるので，任意の $z > 0$ に対して

$$f(z) \geq f(1) = 0 \tag{32}$$

が成り立つ．よって，$z = 1/(\beta k \mathrm{Var}_t[x])$ ととることで

$$\mu k \left[\frac{1}{\beta k \mathrm{Var}_t[x]} - 1 - \ln \frac{1}{\beta k \mathrm{Var}_t[x]}\right] = \mu k f\left(\frac{1}{\beta k \mathrm{Var}_t[x]}\right) \geq 0 \tag{33}$$

がいえる．

したがって，式 (28) の第 1 項と第 2 項はそれぞれ式 (29)，式 (33) より非負なので，エントロピー生成率の非負性 $\sigma(t) \geq 0$ が示される．