L^2-Wasserstein 距離と離散ダイナミクス

東京大学 物理学専攻
吉村 耕平

@ Workshop OT
Mar. 16, 2023

非平衡熱力学

Clausius の不等式

- 温度 T_i の熱浴に熱が Q_i 流れる
- S：系のエントロピー

$$\Delta S + \sum_i \frac{Q_i}{T_i} \geq 0$$

エントロピー生成

- Q_i/T_i：熱浴のエントロピー変化
- エントロピー生成 $\Sigma = \Delta S + \Delta S_{\mathrm{env}} \geq 0$

熱力学不等式

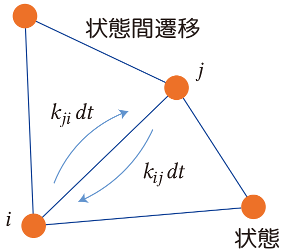
- $\Sigma \geq$（なにか） $\Longrightarrow$ ゆらぎ/速度と散逸のトレードオフ
  e.g., TUR $\langle J \rangle^2 / \mathrm{Var}(J)$, 速度限界 $L(p_0, p_\tau)^2 / (\bar{A}\tau)$

離散ダイナミクス

離散系

- 離散自由度で記述される系（$\leftrightarrow$ 連続系）
- 特に，Markov jump 過程を考える
  = 確率分布のダイナミクス

- 今日の内容は**化学反応ネットワーク**でも多く
  がパラレルに成り立つ　(see K. Yoshimura,
  A. Kolchinsky, A. Dechant & S. Ito, Phys. Rev. Res. 2023)



謝辞

- Artemy Kolchinsky（伊藤研 PD）

- Andreas Dechant（京大 佐々研）

- 伊藤創祐（東大）

- 永山龍那（伊藤研 M1）

Wasserstein 距離と熱力学

すでに触れられた関係

- エントロピー生成 $\geq L^2, L^1$-Wasserstein 距離

$\rightarrow$ 離散系でも成り立つ

触れられていない関係

- ゆらぐ連続系の基礎方程式（Fokker–Planck 方程式）
  $= L^2$-Wasserstein 距離に関する“勾配流方程式”（後述）
- L^2-Wasserstein 距離の測地線に関する不等式
  $\implies$ 緩和速度の下限，関数不等式

$\rightarrow$ こうした「幾何学的」関係は素朴には成り立たない

Maasによる拡張 J. Maas, Funct. Anal. (2011).

- Benamou–Brenier 公式

$$\mathscr{W}_{\text{連続}}(p_0, p_1) = \inf_{P,\psi}\left(\int_0^1 dt \int dx\, P(x,t)|\nabla\psi(x,t)|^2\right)^{1/2}$$

$$\text{with}\quad \partial_t P = -\nabla\cdot(P\nabla\psi),\quad P(0) = p_0,\quad P(1) = p_1$$

- 戦略: $\nabla\psi \to \psi_i - \psi_j$

$$\mathscr{W}_{\text{離散}}(p_0, p_1) := \inf_{P,\psi}\left(\int_0^1 dt \sum_{i,j} (\text{なにか})_{ij}(\psi_i - \psi_j)^2\right)^{1/2}$$

$$\text{with}\quad \frac{d}{dt}P_i = \frac{1}{2}\sum_j (\text{なにか})_{ij}(\psi_i - \psi_j),\quad P(0) = p_0,\quad P(1) = p_1$$

Maasによる拡張 J. Maas, Funct. Anal. (2011).

Markov jump 系

- $i \to j$ の遷移レート k_{ji} $\ (k_{ji} > 0 \iff k_{ij} > 0)$
- 平衡分布 π の存在を仮定 $\quad k_{ji}\pi_i = k_{ij}\pi_j$

- なにか $= k_{ij}\pi_j \, \Lambda(p_i/\pi_i, p_j/\pi_j)$

$$\Lambda(a,b) = \frac{a-b}{\ln a - \ln b} \quad \text{対数平均,} \quad \left(\sqrt{ab} \le \Lambda(a,b) \le \frac{a+b}{2}\right)$$

Maasによる拡張 J. Maas, Funct. Anal. (2011).

拡張のご利益

- kの与えるマスター方程式
  $=$ "Wasserstein 距離" に関する勾配流方程式 J. Maas, Funct. Anal. (2011).
- Wasserstein 距離の測地線に関する不等式
  $\Longrightarrow$ 緩和速度の下限など M. Erbar & J. Maas, Arch. Rational Mech. Anal. (2012).

目標 1：**定義の物理的意味**を解き明かす

熱力学との関係

連結系で知られる結果

- エントロピー生成の下限　M. Nakazato & S. Ito, Phys. Rev. Res. (2021).
- エントロピー生成の分解　A. Dechant, S.-i. Sasa & S. Ito, Phys. Rev. Res. (2022), Phys. Rev. E (2022).

目標 2：これらの**熱力学的結果が成り立つか**を確かめる

注：平衡状態に緩和する系では既知　T. Van Vu & Y. Hasegawa, Phys. Rev. Lett. (2021).
　　一般の系ではどうか？

連続系ショートコース

ダイナミクス：熱的にゆらぐ系

- Langevin 方程式 $\dfrac{dx_t}{dt} = \mu F(x_t) + \sqrt{\mu T}\xi_t, \quad x_t \in \mathbb{R}^d$
- Fokker–Planck 方程式

$$\partial_t p(x,t) = -\nabla \cdot [p(x,t)v(x,t)], \quad v = \mu F - \mu T \nabla \ln p$$

- エントロピー生成率

$$\dot{\Sigma}(t) = \frac{1}{\mu T}\int_{\mathbb{R}^d} dx\, p(x,t)|v(x,t)|^2 \text{（= 全系のエントロピー変化）}$$

連続系ショートコース

L^2-Wasserstein 幾何

- $\mathscr{P}(\ni p)$: $\mathbb{R}^d$ 上の確率分布の空間
- 接空間 $T_p\mathscr{P} \ni w$ satisfies $\int dx\, w(x) = 0$ (cf. $\int dx\, \partial_t p(x,t) = \frac{d}{dt}\int dx\, p(x,t) = 0$)
- $w = -\nabla\cdot(p\nabla\phi)$, $w' = -\nabla\cdot(p\nabla\phi')$ を ϕ, ϕ' について解く

$$\to \langle w, w'\rangle_p := \underbrace{\int dx\, p(x)\nabla\phi(x)\cdot\nabla\phi'(x)}_{\text{“速度場の内積の平均”}}, \quad \mathscr{W}(p_0, p_1)^2 = \inf_P \int_0^1 dt\, \|\dot{P}(t)\|_{P(t)}^2$$

連続系ショートコース

grad 作用素

- $\mathscr{F} : \mathscr{P} \to \mathbb{R}, \quad \mathrm{grad}\,\mathscr{F} : \mathscr{P} \ni p \mapsto \mathrm{grad}\,\mathscr{F}[p] \in T_p\mathscr{P}$
- $p \in \mathscr{P}, w \in T_p\mathscr{P}$に対して，$P(0) = p, \dot{P}(0) = w$となる $P(t)$
- $\left.\dfrac{d}{dt}\mathscr{F}[P(t)]\right|_{t=0} =: \langle \mathrm{grad}\,\mathscr{F}[p], w \rangle_p \quad \text{cf. } \frac{d}{dt}f(x(t)) = \nabla f(x(t)) \cdot \frac{dx}{dt}$

例

- $P(0) = p, \partial_t P = -\nabla \cdot (P \nabla \psi)$
- $\mathscr{F}[p] = \int dx\, f(p(x)) \to \frac{d}{dt}\mathscr{F}[P(t)] = \int dx\, f'(P)\, \partial_t P = \int dx\, P \nabla f'(P) \cdot \nabla \psi$

  $\therefore \mathrm{grad}\,\mathscr{F}[p] = -\nabla \cdot (p \nabla f'(p))$

連続系ショートコース

勾配流方程式

- KL divergence $D(p\|q) = \int dx\, p(x) \ln[p(x)/q(x)]$
- $\mathrm{grad}\, D(p\|e^{-V}) = \nabla \cdot [p(-\nabla V - \nabla \ln p)]$ （V：“ポテンシャル”）

- Fokker–Planck 方程式 = 勾配流方程式

  $\partial_t p = -\mathrm{grad}\, D(p\|e^{-V})$

  （ただし拡散係数 $\mu T = 1$，保存的な力 $\mu F = -\nabla V$のみ）

離散系の表現

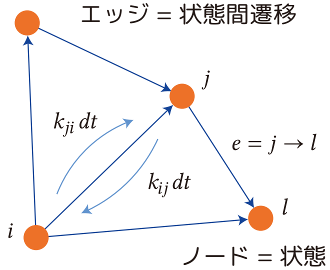
Markov jump とグラフ

- 状態 = ノード, 状態間遷移 = エッジ
- 遷移は可逆とし，ペアを 1 つの有向エッジとみなす

接続行列

- ノード i, エッジ $e = x \to y$ に対して，次で定義

$$B_{ie} = \delta_{iy} - \delta_{ix} = \begin{cases} 1 & \text{if} \quad i = y \\ -1 & \text{if} \quad i = x \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$



離散系の表現

接続行列

- $B_{ie} = \delta_{iy} - \delta_{ix}$ $(e = x \to y)$
- $J = (J_e)$ に対して
  $[BJ]_i = \sum_{e:*\to i} J_e - \sum_{e:i\to *} J_e$ ：i への流入
- $\phi = (\phi_i)$ に対して
  $[B^{\mathsf{T}}\phi]_e = \phi_y - \phi_x$ ：e 上での変化

	離散		連続	
接続行列	B	$\leftrightarrow$	$-\nabla\cdot$	負の発散
	$\updownarrow$		$\updownarrow$	共役
転置	B^{T}	$\leftrightarrow$	∇	勾配

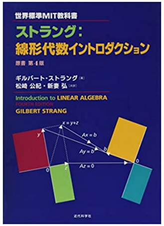
離散系の表現

マスター方程式

- $\frac{d}{dt}p(t) = BJ(p(t))$
- $J_e(p) = k_e p_x - k_{-e} p_y$ (when $e = x \to y$)
- 複数の浴によって $x \to y$ が媒介されていても良い

- グラフが連結 $\implies \operatorname{rank} B = \#(\text{node}) - 1$

  $\sum_i B_{ie} = 0$ ：確率の保存
- ストラング『線形代数イントロダクション』



離散系の熱力学

エントロピー生成

- 系のエントロピー　$-\ln p_i$
- 熱浴のエントロピー変化　$\ln \dfrac{k_e}{k_{-e}}$
  (If $k_e\, e^{-\epsilon_x/T} = k_{-e}\, e^{-\epsilon_y/T}$ for some ϵ, then $\ln(k_e/k_{-e}) = (\epsilon_x - \epsilon_y)/T$)
- 熱力学的力　$F_e(p) := \ln \dfrac{k_e p_x}{k_{-e} p_y}$
- エントロピー生成率　$\dot{\Sigma} = \sum_e J_e F_e$

離散系の熱力学

エッジオンサーガー係数 KY, A Kolchinsky, A. Dechant & S. Ito, Phys. Rev. Res. (2023).

- 定義 $L_{ee'}(p) := \delta_{ee'} \dfrac{k_e p_x - k_{-e} p_y}{\ln[k_e p_x/(k_{-e} p_y)]} \geq 0$
- 定義より $J = LF$
- $\langle f, g \rangle_L := f^\top L g$ とすると，$\dot{\Sigma} = J^\top F = F^\top L F = \|F\|_L^2$

- $k_e \pi_x \Lambda(p_x/\pi_x, p_y/\pi_y) = L_{ee}(p)$

$\to \mathscr{W}^2 = \inf_{P,\psi} \int_0^1 dt \|B^\top \psi\|_{L(P)}^2$, 連続の式 $\frac{d}{dt} P = BL(P)B^\top \psi$

証明

まず，$k_e \pi_x = k_{-e} \pi_y$ より

$$k_e \frac{\pi_x}{\pi_y} = k_{-e}, \qquad \frac{\pi_y}{\pi_x} = \frac{k_e}{k_{-e}}$$

よって，

$$k_e \pi_x \Lambda(p_x/\pi_x, p_y/\pi_y) = \frac{k_e \pi_x \left(\frac{p_x}{\pi_x} - \frac{p_y}{\pi_y} \right)}{\ln[\pi_y p_x/(\pi_x p_y)]} = \frac{k_e p_x - k_{-e} p_y}{\ln[k_e p_x/(k_{-e} p_y)]} = L_{ee}(p). \qquad \square$$

比較

	連続系	離散系
エントロピー生成率	$\dot{\Sigma} = \frac{1}{\mu T}\int p\lvert v\rvert^2 dx$	$\dot{\Sigma} = \lVert F\rVert_L^2$
Wasserstein 距離	$\mathscr{W}^2 = \inf_{P,\psi}\int_0^1 dt \int P\lvert\nabla\psi\rvert^2 dx$	$\mathscr{W}^2 = \inf_{P,\psi}\int_0^1 dt \lVert B^\mathsf{T}\psi\rVert_{L(P)}^2$
連続の式	$\partial_t P = -\nabla\cdot[P\nabla\psi]$	$\frac{d}{dt}P = BL(P)B^\mathsf{T}\psi$

結論 1：Maas の拡張 = 連続系の p を $L(p)$ で代替したもの（熱力学的に合理的）

拡張のご利益

詳細釣り合い $k_e \pi_x = k_{-e} \pi_y$ を満たす平衡分布 π が存在

$\implies D(p \| \pi)$ の勾配流方程式 = マスター方程式

Wasserstein 幾何

- $\mathscr{P} \ni p$: 確率分布の空間
- 接空間 $T_p\mathscr{P} \ni w$ satisfies $\sum_i w_i = 0$ (cf. $\sum_i \frac{d}{dt} p_i(t) = \frac{d}{dt} \sum_i p_i(t) = 0$)
- $w = BL(p)B^\top \phi,\ w' = BL(p)B^\top \phi'$ を ϕ, ϕ' について解く

$$\to \langle w, w' \rangle_p := \langle B^\top \phi, B^\top \phi' \rangle_{L(p)}, \quad \mathscr{W}(p_0, p_1)^2 = \inf_P \int_0^1 dt \|\dot{P}(t)\|^2_{P(t)}$$

拡張のご利益

grad 作用素

- $\mathscr{F} : \mathscr{P} \to \mathbb{R}, \quad \operatorname{grad} \mathscr{F} : \mathscr{P} \ni p \mapsto \operatorname{grad} \mathscr{F}[p] \in T_p\mathscr{P}$
- $p \in \mathscr{P}, w \in T_p\mathscr{P}$に対して，$P(0) = p, \dot{P}(0) = w$となる $P(t)$
- $\left.\dfrac{d}{dt}\mathscr{F}[P(t)]\right|_{t=0} =: \langle \operatorname{grad} \mathscr{F}[p], w\rangle_p \quad$ cf. $\frac{d}{dt} f(x(t)) = \nabla f(x(t)) \cdot \dfrac{dx}{dt}$

例

- $P(0) = p, \partial_t P = BL(P)B^{\mathsf{T}}\psi$
- $\mathscr{F}[p] = \sum_i f(p_i)$

  $\to \frac{d}{dt}\mathscr{F}[P(t)] = \sum_i f'(P_i) \frac{d}{dt} P_i = [B^{\mathsf{T}} f'(P)]^{\mathsf{T}} LB^{\mathsf{T}}\psi \quad (f'(P) = (f'(P_i))_i)$

  $\therefore \operatorname{grad} \mathscr{F}[p] = BL(p)B^{\mathsf{T}} f'(p)$

拡張のご利益

勾配流方程式

- KL divergence $D(p\|q) = \sum_i p_i \ln[p_i/q_i]$
- $\mathrm{grad}\, D(p\|\pi) = BL(p)B^{\mathsf{T}} \ln[p/\pi] = -BL(p)F(p)$
  $([B^{\mathsf{T}} \ln[p/\pi]]_e = -\ln[\pi_y p_x/(\pi_x p_y)],\ k_e\pi_x = k_{-e}\pi_y)$

- マスター方程式 = 勾配流方程式　J. Maas, Funct. Anal. (2011).

$$\frac{d}{dt}p = -\mathrm{grad}\, D(p\|\pi)$$

（π が存在するときのみ
cf. 保存的な力 $F = -\nabla U \implies p(t) \to e^{-U/T}$ in Fokker–Planck 方程式）

拡張のご利益

- L を用いた表現は，平衡状態を用いていない　YKDI, Phys. Rev. Res. (2023).

$$\mathscr{W}(p_0, p_1)^2 = \inf_{P,\psi} \int_0^1 dt \|B^\mathsf{T}\psi\|_{L(P)}^2, \quad \frac{d}{dt}P = BL(P)B^\mathsf{T}\psi$$

$$= \inf_{P,f} \int_0^1 dt \|f\|_{L(P)}^2, \quad \frac{d}{dt}P = BL(P)f \quad \text{も成立}$$

- 一般の状況（定常状態で $J = 0$ が成立しない）でも定義可能

熱力学との関係 KY, A. Kolchinsky, A. Dechant, S. Ito, Phys. Rev. Res. (2023).

速度限界

- 任意の $\tau > 0$ に対して

$$\mathscr{W}(p_0, p_1)^2 = \inf_{P,f} \tau \int_0^\tau dt \|f\|_{L(P)}^2, \qquad \frac{d}{dt}P = BL(P)f$$

- マスター方程式の解 $p(t)$ $\quad \frac{d}{dt}p = BL(p)F(p)$
- $\tau \int_0^\tau dt\,\dot{\Sigma}(t) \geq \mathscr{W}(p(0), p(\tau))^2 \implies \tau \geq \dfrac{\mathscr{W}(p(0), p(\tau))^2}{\int_0^\tau dt\,\dot{\Sigma}(t)}$ ：速度限界

熱力学との関係　KY, A. Kolchinsky, A. Dechant, S. Ito, Phys. Rev. Res. (2023).

エントロピー生成率の分解

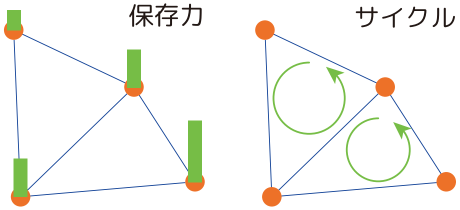
- マスター方程式の解 $p(t)$

$$\lim_{\Delta t\to 0}\frac{\mathcal{W}(p(t),p(t+\Delta t))^2}{\Delta t^2}=\inf_{\psi}\|B^{\mathsf{T}}\psi\|^2_{L(p(t))},\qquad \frac{dp}{dt}=BL(p(t))B^{\mathsf{T}}\psi$$

$$=:\dot{\Sigma}^{\mathrm{ex}}(t)\le\dot{\Sigma}(t)$$

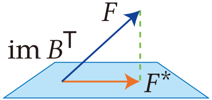
物理的意味

- 保存力による散逸を表現
- $\dot{\Sigma}^{\mathrm{hk}}:=\dot{\Sigma}-\dot{\Sigma}^{\mathrm{ex}}$ ：「無駄」な運動による散逸



結論 2：熱力学と（当然）結びつく

熱力学との関係　KY, A. Kolchinsky, A. Dechant, S. Ito, Phys. Rev. Res. (2023).



数理構造

- $\dfrac{dp}{dt} = BL(p(t))B^{\mathsf{T}}\psi$ を満たす $B^{\mathsf{T}}\psi$ は一意（F^* とする）
- $\langle F(p) - F^*(p), F^*(p)\rangle_{L(p)} = 0$　（F^* は F の L に関する $\mathrm{im}\, B^{\mathsf{T}}$ への直交射影）

$\because\ BL(p)F(p) = BL(p)F^*(p) \quad \therefore\ L(p)(F(p) - F^*(p)) \in \ker B$ ：サイクル

サイクルによる分解

- $\dot{\Sigma}^{\mathrm{hk}} = \|F - F^*\|_L^2 = F^{\mathsf{T}}L(F - F^*) = \sum_e F_e \sum_\mu S_e(\mathscr{C}_\mu)\mathscr{J}_\mu = \sum_\mu \mathscr{J}_\mu \mathscr{F}_\mu$
- $S_e(\mathscr{C}_\mu)$：サイクル $\mathscr{C}_\mu$ 上のエッジ e の向き (± 1 or 0)

  $\mathscr{J}_\mu$：サイクル上の「無駄」なカレント，$\mathscr{F}_\mu$：サイクル上の力

まとめ

結果

- 数学 driven の距離関数の意味が，物理的な道具によって明快になる
- パラレルな物理的構造が明らかになり，熱力学不等式などが導けた

Future perspective

- 平衡分布はどこまで必要か？（勾配流には必要そうだが，双対公式には不要） $\mathscr{W}(p_0, p_1)^2 = 2\sup_\psi[\langle\psi(1)\rangle_{p_1} - \langle\psi(0)\rangle_{p_0}],\ \forall q, \forall t \in [0,1],\ q d_t\psi(t) + \frac{1}{2}\|B^\mathsf{T}\psi(t)\|^2_{L(q)} \leq 0$
- k の支配をもう少し緩められないか？

詳細　KY, A. Kolchinsky, A. Dechant, S. Ito, Phys. Rev. Res. (2023).