根据 Feynmann 的"路径积分"，我们一段一段来算这个概率。$p(\vec{x}|x_0) = \prod_{l=1}^{N} p(x_l ; t_{l-1}+\Delta t | x_{l-1} ; t_{l-1})$。$\Delta x_l = \mu_p \cdot F_l(x_{l-1}, t_{l-1})\Delta t + \sqrt{2D}\,\Delta W_t$.

从而 $p(x_l, t_l | x_{l-1}, t_{l-1}) \approx \frac{1}{\sqrt{4\pi D\Delta t}} \cdot \exp\left( - \frac{(x_l - x_{l-1} - \mu_p F(x_{l-1}, t_{l-1})\Delta t)^2}{4D\Delta t} \right)$ 　从而做个连乘，积分宽度变成：

$p(\vec{x};\vec{\lambda}) = \exp[-S(\vec{x};\vec{\lambda})] \cdot p(x_0, t_0)$. 　$S(\vec{x};\vec{\lambda}) = \int_{t_0}^{t_f} dt \cdot \frac{1}{4D} \cdot \left[ \frac{dx(t)}{dt} - \mu_p F_l[x(t); \lambda(t)] \right]^2$ 　路径积分中积分测度 $Dx = \lim_{\Delta t \to 0} \prod_{l=1}^{N} \frac{dx_{l-1}}{\sqrt{4\pi D\Delta t}} dx_f$

## → Fluctuation Relation for Langevin Eq.

我们希望将 被主方程控制的 系统中用正/反概率比表示熵产生这个结论推广到 Langevin 方程控制的系统。对于反向路径，同样有：$p(\hat{x}, \hat{\lambda}) = \exp[-S(\hat{x}, \hat{\lambda})]\, p(x_f, t_f)$.

其中，反向的作用 $S(\hat{x}, \hat{\lambda}) = \int_{t_0}^{t_f} dt \cdot \frac{1}{4D} \left[ \frac{d\hat{x}(t)}{dt} - \mu_p F_l(\hat{x}(t), \hat{\lambda}(t)) \right]^2$ → 这里 $t = t_0$ 处 是对应 $x(t_f)$、$\lambda(t_f)$ 的积分

$$= \int_{t_0}^{t_f} dt \cdot \frac{1}{4D} \left[ -\frac{dx(\hat{t})}{d\hat{t}} - \mu_p F_l(x(\hat{t}), \lambda(\hat{t})) \right]^2 \qquad \hat{t} = 1 - t$$

→ 这里把路径反向了，这里不用改 $dt$.

$$= \int_{t_0}^{t_f} dt \cdot \frac{1}{4D} \left[ \frac{dx(\hat{t})}{d\hat{t}} + \mu_p F_l(x(\hat{t}), \lambda(\hat{t})) \right]^2.$$

$$= \int_{t_0}^{t_f} dt \cdot \frac{1}{4D} \left[ \frac{dx(t)}{dt} + \mu_p F_l(x(t), \lambda(t)) \right]^2$$

注意：这在随机过程中是有意义的。所以有 $\Delta x_l = -\mu_p F_l(x_l, t_l) \cdot \Delta t + \sqrt{2D}\,\Delta W_t$ 　或 $\Delta x_l = \mu_p F_l(x_l, t_l) \cdot \Delta \hat{t} + \sqrt{2D}\, dW_t$. 　从这里也可以推出 作用量的形式

上面注意到，$\frac{\Delta x_l}{\Delta t} - \mu_p F_l(x_l, \hat{t}_l) = \sqrt{2D}\frac{\Delta W_t}{\Delta t}$ 　而 $\frac{\Delta x_l}{\Delta \hat{t}} = -\frac{\Delta x_l}{\Delta t}$. 　容易注意到正向测度和反向测度一样，即 $Dx = D\hat{x}$. 　从而我们有：

$$p(\vec{x}, \vec{\lambda}) / p(\hat{x}, \hat{\lambda}) = \frac{p(x_0, t_0)}{p(x_f, t_f)} \exp[-S(x, \lambda) + S(\hat{x}; \hat{\lambda})]$$

$$= \exp\left[ \frac{\Delta S^{sys}}{k_B} - S(x, \lambda) + S(\hat{x}, \hat{\lambda}) \right].$$

其中 $S(x, \lambda) - S(\hat{x}, \hat{\lambda}) = -\frac{1}{k_B T} \int_{t_0}^{t_f} dt \cdot \frac{dx(t)}{dt} \circ F_l(x(t), \lambda(t))$ 　其中 我们已使用 Einstein 关系化简了方程：$D = k_B T \cdot \mu_p$.

回顾一下 Langevin 方程的热力学：

$$\begin{cases} d\varepsilon = \frac{\partial \varepsilon(x, \lambda)}{\partial x} \circ dx + \frac{\partial \varepsilon(x, \lambda)}{\partial \lambda} \cdot \frac{d\lambda}{dt} \cdot dt. \\ dw = \frac{\partial \varepsilon(x, \lambda)}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{dt} \cdot dt + f(x, t) \cdot dt \end{cases} \Rightarrow dq = dw - d\varepsilon = \left[ -\frac{\partial \varepsilon}{\partial x} + f(x, t) \right] \circ dx = F_l(x, t) \cdot dx.$$

从而立刻有出：$S(x, \lambda) - S(\hat{x}, \hat{\lambda}) = -\frac{1}{k_B T} \int dq = -S^{res}/k_B$. 　从而立刻有：$p(\vec{x}, \vec{\lambda}) / p(\hat{x}, \hat{\lambda}) = \exp\left( \frac{1}{k_B} S^{tot} \right)$. 其他涨落关系都可以从这里导出

得到也，对于初始、终末分布都在平衡态上的情形 仍有 $S^{tot} = \frac{1}{T}(w(\vec{x}) - \Delta F)$.

## → Brownian Particle in a time-dependent harmonic potential. / 世界的本质是一个巨大的弹簧振子.

下面 我们考虑一个具有 manipulation 而无 driving 的情形：粒子处在一个时变简谐场中！$U(x, \lambda) = \frac{1}{2}\lambda x^2$.

怎么猜出此处F-P方程的解呢？首先，在这样的势场下，F-P方程对x是线性的，所以这时候初始是高斯，那么分布相当于对初始分布做了个线性变换，也是高斯的。不失一般性，我们考虑 $\langle x\rangle|_{t=0}=0$ 的情形。

从而可以将方程的解猜为：$p(x,t,\lambda)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\gamma(t)}}\exp\left(-\frac{x^2}{2\gamma(t)}\right)$。它应服从的方程为 $\frac{\partial p}{\partial t}=\mu_p\frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda(t)\, x\, p+k_BT\frac{\partial p}{\partial x}\right]$。为了使这个方程更简单一些，我们可以引入概率密度的特征函数进行处理。

$\phi(q,t)=\int dx\,\exp(q\cdot x)\cdot p(x,t)$。利用 $\phi(q,t)$ 的导数可以表示原随机变量的均值，方差：$\langle x\rangle_t=\partial\phi(q,t)/\partial q\,|_{q=0}$，$\sigma^2(t)=\partial^2\ln\phi(q,t)/\partial q^2\,|_{q=0}$。将F-P方程两侧乘 $\exp(q\cdot x)$，有：

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t}\exp(qx)=\mu_p\exp(qx)\frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda x\cdot p+k_BT\frac{\partial p}{\partial x}\right]$$

积分一下看看：

$$\int\mu_p\exp(qx)\cdot\frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda\, x\, p+k_BT\frac{\partial p}{\partial x}\right]dx$$

$$=\int\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\lambda x\, p+k_BT\frac{\partial p}{\partial x}\right)\mu_p\exp(qx)\right]dx-\int\mu_p\, q\exp(qx)\left[\lambda x\, p+k_BT\frac{\partial p}{\partial x}\right]dx$$

这两项两端都在边界上，所以这项等于0.

$$\mu_p\left[-\lambda(t)\, q\int x\, p\exp(qx)\,dx-k_BT\int\mu_p\, q\exp(qx)\frac{\partial p}{\partial x}dx\right]$$

这项可以再分部积分

$$\int\frac{\partial}{\partial x}(\quad)-\int\mu_p\, q^2\exp(qx)\, p\, dx$$

从而最终化简得到的方程为 $\frac{\partial\phi}{\partial t}=\mu_p\left[-\lambda(t)\, q\frac{\partial\phi}{\partial q}+k_BT\, q^2\phi\right]$。计算上，$\phi(q,t)=\exp\left(\frac{q^2}{2}\gamma(t)\right)$。回代。

$\frac{d\gamma}{dt}=2\mu_p\left[-\lambda(t)\gamma(t)+k_BT\right]$。从而求解此方程即可得解。

下面，我们导出Jarzynski等式。我们将非直接证明。我们先来考虑外界一段时间内对系统做的功：$w(t)=\int_{t_0}^{t}dt'\,\frac{d\lambda(t')}{dt'}\,\frac{\partial u}{\partial\lambda}\Big|_{\lambda=\lambda(t'),\,x=x(t')}$。

我们要给出 $p(x,w;t,\lambda)$ 的联合概率的演化方程。在原F-P方程给出的 $\frac{\partial p(x;\lambda,t)}{\partial t}$ 之后要再加一个修正。

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x,w;\lambda,t)=\mu_p\frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda(t)\, x\, p+k_BT\frac{\partial p}{\partial x}\right]-\dot\lambda(t)\frac{\partial u}{\partial\lambda}\Big|_{\lambda=\lambda(t),\,x=x(t)}\frac{\partial p}{\partial w}$$

$$=\mu_p\frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda(t)\, x\, p+k_BT\frac{\partial p}{\partial x}\right]-\frac{1}{2}\frac{d\lambda(t)}{dt}x^2\frac{\partial p}{\partial w}$$

通过与上面类似的方法，引入Generating Function。$\psi^{(x,w)}(q_1,q_2,t)=\int dx\,dw\,\exp(q_1x+q_2w)\, p(x,w;t,\lambda)$。

可以将方程改写作：$\frac{\partial\psi^{(x,w)}}{\partial t}=\mu_p\left[-\lambda(t)\, q_1\frac{\partial\psi^{(x,w)}}{\partial q_1}+k_BT\, q_1^2\psi^{(x,w)}\right]+\frac{1}{2}\frac{d\lambda(t)}{dt}\, q_2\frac{\partial^2\psi^{(x,w)}}{\partial q_1^2}$ 计算得到：$\psi^{(x,w)}(q_1,q_2,t)=\exp\left[\alpha(q_2,t)+\gamma(q_2,t)\frac{q_1^2}{2}\right]$

$$\begin{cases}\frac{\partial\alpha}{\partial t}=\frac{1}{2}q_2\frac{d\lambda(t)}{dt}\gamma(q_2,t)\\ \frac{\partial\gamma}{\partial t}=2\mu_p\left[-\lambda(t)\gamma(q_2,t)+k_BT\right]+q_2\frac{d\lambda(t)}{dt}\gamma^2(q_2,t)\end{cases}$$

由于 $\alpha(q_2,t)=\ln\langle\exp(q_2\, w(t))\rangle$，使用Jarzynski等式，$\alpha\left(-\frac{1}{k_BT}\right)=\ln\left\langle\exp\left(-\frac{w(t)}{k_BT}\right)\right\rangle=-\frac{F(\lambda(t))-F(\lambda(t_0))}{k_BT}$

⚠ 在后面这一段推导中，也许使用了x，w独立的假设，否则无法给出 $\psi^{(x,w)}(q_1,q_2,t)$ 的形式。

在独立性假设情形下，可以有：$\int\exp(q_2w)\, p(w)\,dw\int\exp(q_1x)\, p(x)\,dx=\int\exp(q_2w)\cdot\exp(\gamma\, q_1^2/2)\, p(w)\,dw=\underline{\exp\left(\alpha+\gamma\frac{q_1^2}{2}\right)}$。

且有 $\alpha=\int p(w)\exp(q_2w)\,dw$。

借助此式，取 $q_2=-1/k_BT$，立刻解出：

$$\begin{cases}\gamma(t)=k_BT/\lambda(t)\\ \alpha(t)=-\frac{1}{2}\ln\frac{\lambda(t)}{\lambda(t_0)}=-\Delta F(t)/k_BT\end{cases}$$

$$F(\lambda)=-k_BT\ln\int dx\,\exp\left(\frac{1}{2k_BT}\cdot(-\lambda x^2)\right)=-\frac{k_BT}{2}\ln\frac{2\pi k_BT}{\lambda}$$

## Brownian Motion with Inertia.

之前，我们讨论的系统都是一阶动力系统，这是 Brownian Motion 在过阻尼情形下的形式。现在我们要考虑一个正常的情形，因此考虑如下二阶方程：

$m\cdot\frac{d^2r}{dt^2} = -\partial_r U(r,\lambda) - \mu_p\frac{dr}{dt} + \sqrt{2D}\,\xi(t)$，它可以被写成两个一阶方程：
$$\begin{cases} \frac{dr}{dt} = p_r/m \\ dp_r/dt = -\partial_r U(r,\lambda) - \frac{\mu_p}{m}p_r + \sqrt{2D}\,\xi(t). \end{cases}$$

在这个情形下，我们求出 $p(p_r,r,t)$ 的演化方程。当然，这里可以严格地求，但也可以"不用推求"，考虑到动量和位置相应，可以猜出：

$$\frac{\partial p(p_r,r,t)}{\partial t} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial r}\left[-\frac{p_r}{m}p(p_r,r,t)\right]}_{\text{关于}r\text{的流守恒}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial p_r}\left[\left(\frac{\partial U}{\partial r}+\frac{\mu_p}{m}p_r\right)p(p_r,r,t) + D\frac{\partial p(p_r,r,t)}{\partial p_r}\right]}_{\text{关于}p_r\text{的F-P.}}$$

可验证其解为 $p^{eq}(p_r,r) = \exp\left[\frac{1}{k_BT}\left(F(\lambda) - H(p_r,r;\lambda)\right)\right]$
$$\begin{cases} H(p_r,r,\lambda) = \frac{p_r^2}{2m} + U(r,\lambda) \\ F(\lambda) = -k_BT\ln\int dp_r dr\, \exp(-H/k_BT). \end{cases}$$
* 力不足以做功... [illegible]

可以看到，此时 $r$ 的演化方程是完全确定的，随机性来源于 $p_r$。所以在做路径积分的时候，有：

$p(x_{i},p_{r,i},t_i \mid x_{i-1},p_{r,i-1},t_{i-1}) \approx \frac{1}{\sqrt{(\ )}}\cdot\underbrace{\exp(-(\ \ )^2)}_{p_r\text{的随机性}}\cdot\underbrace{\delta\left(\Delta x - \frac{p_r}{m}\Delta t\right)}_{x_i\text{的确定性}}$。在默认 $\frac{dx}{dt} = \frac{p_r}{m}$ 这一确定的情形下（即：只考虑一些满足的 $x(t)$ 路径），则 $p_r$ 中其不会移到。

此时可以将 $\delta(\ )$ 移除，将路径概率与作用量联系在一起：

$S(p_r,r;\lambda) = \int_{t_0}^{t_f} dt\,\frac{1}{4D}\left[\frac{dp_r(t)}{dt} + \frac{\partial}{\partial r}U(x(t),\lambda(t)) + \frac{\mu_p}{m}p_r(t)\right]^2$ 在时间反演后，对时间的导数全部反号，$x$ 不反号但 $p_r$ 反，从而反演作用量为：

$S(\hat{p}_r,\hat{r};\hat{\lambda}) = \int_{t_0}^{t_f} dt\,\frac{1}{4D}\left[\frac{dp_r(t)}{dt} + \frac{\partial}{\partial r}U(x(t),\lambda(t)) - \frac{\mu_p}{m}p_r(t)\right]^2$ 正反路径概率比为：

$$\frac{p(\vec{x}\mid x_0,\lambda)}{p(\hat{x}\mid x_f,\hat{\lambda})} = \exp\left[-\frac{1}{k_BT}\left(S(\vec{x};\vec{\lambda}) - S(\hat{x};\hat{\lambda})\right)\right],\quad S(\vec{x};\vec{\lambda}) - S(\hat{x};\hat{\lambda}) = \frac{1}{k_BT}\int_{t_0}^{t_f} dt\,\frac{p_r(t)}{m}\left(\frac{dp_r(t)}{dt} + \partial_r U(r(t),\lambda(t))\right)$$

$\frac{p_r}{m}\frac{dp_r(t)}{dt}\cdot dt = d\left(\frac{p_r^2}{2m}\right)$，$dt\cdot\frac{p_r(t)}{m}\partial_r U(r(t),\lambda(t)) = dr\cdot\partial_r U(r(t),\lambda(t)) = dU - d\lambda\cdot\partial_\lambda U$

$= dH - dw = -dq$。 补上初态概率比后，可知 $S^{tot}(\vec{x}) = k_B\ln\left[\frac{P(\vec{x})}{\hat{P}(\hat{x})}\right]$ 仍然满足。

## Hamilton Systems

我们考虑这样的系统：在 $t_0$ 时刻之前，系统与热浴在温度为 $T$ 的热库中。在 $[t_0,t_f]$ 中系统被操纵，且与热库断开隔离。系统状态由 $n$ 对广义坐标/动量描述，$\vec{\xi} = (\vec{p},\vec{r})$。

换言之，系统初态位于 $p^{eq}(\xi,\lambda_0) = \exp\left[(F(\lambda_0) - H(\xi,\lambda_0))/k_BT\right]$ 其中 $F(\lambda) = -k_BT\ln\int d\xi\,\exp[-H(\xi,\lambda)/k_BT]$

热浴解除后，系统按正则方程进行确定性演化。
$$\begin{cases} dp_{r,i}/dt = -\partial H/\partial r_i \\ dr_i/dt = \partial H/\partial p_{r,i} \end{cases}$$

然后一下哈密顿量的全导数：$\frac{d}{dt}H(\xi(t),\lambda(t))$

$= \sum_{i=1}^{n}\left[\frac{dp_{r_i}}{dt}\frac{\partial H}{\partial p_{r_i}} + \frac{dr_i}{dt}\frac{\partial H}{\partial r_i}\right] + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial\lambda}\cdot\frac{d\lambda}{dt}$ 从而系统演化的哈密顿量全导数恰等于偏导。

$\Rightarrow H(\xi(t);\lambda(t)) = H(\xi_0,\lambda_0) + \int_{t_0}^{t} dt'\,\frac{d\lambda(t')}{dt'}\frac{\partial}{\partial\lambda}H(\xi(t'),\lambda(t'))$.

而求 $\langle\exp(-w(t,\xi_0)/k_BT)\rangle$，其中对初态取平均，有：

$$\left\langle \exp\left(-W(t;\xi_0)/k_BT\right)\right\rangle = \int d\xi_0 \, \exp\left(-W(t;\xi_0)/k_BT\right) p^{eq}(\xi_0)$$

使用哈密顿，内能变化作为做功

$$= \int d\xi_0 \, \exp\left(-\frac{1}{k_BT}\left(\underbrace{H(\xi(t;\xi_0);\lambda(t)) - H(\xi_0,\lambda(0))}\right)\right) \cdot \exp\left(\frac{1}{k_BT}\left(F(\lambda_0) - H(\xi_0,\lambda_0)\right)\right)$$

$$= \int d\xi_0 \, \exp\left(-\frac{1}{k_BT}\left(H(\xi(t;\xi_0);\lambda(t)) + F(\lambda_0)\right)\right)$$

利用刘维尔定理，Hamilton 方程演化保相空间体积，从而 $d\xi_0$ 可以被直接替换为 $d\xi$。从而 $\left\langle \exp\left(-W(t;\xi_0)/k_BT\right)\right\rangle = \exp\left(\frac{1}{k_BT}\left(F(\lambda_0) - F(\lambda(t))\right)\right)$ 取 $t = t_f$ 时，我们还可得到之前的不等式。同时还可得 $W^{diss} = \langle W(\xi,\lambda)\rangle - \Delta F \geq 0$。对于孤立系统，我们能否讨论其路径相关与熵产生关系：路径是确定的，根据刘维尔，系统熵不变。我们在 $t_f$ 时刻将其再次接触热库直至平衡。此时，系统将向热库放热。

$q(\xi,\lambda) = H(\xi_f,\lambda_f) - \langle H(\xi,\lambda_f)\rangle_{eq} = H(\xi_0,\lambda_0) + W(t_f,\xi_0;\lambda) - (F(\lambda_f) + TS(\lambda_f)) = (W(t_f,\xi_0;\lambda) - \Delta F) + T(S(\xi_0) - S(\xi_f))$。从而该过程的总熵产生为：

$$S^{tot}(\xi,\lambda) = \frac{q(\xi,\lambda)}{T} + S_f - S(\xi_0) = (W(t_f,\xi_0) - \Delta F)/T$$

下面考虑反向，在反向中，系统先在 $\lambda_f$ 处与热库达平衡，再例向运行。令 $\tilde{t} = t_f - t$，则 $\tilde{\lambda}(t) = \lambda(\tilde{t})$。$\tilde{\xi}(t) = \tilde{\xi}(\tilde{t})$，$\tilde{\xi} = (-p_i, q_i)$。

由于初始中间运行的过程完全确定性，所以正反向概率之比与初始状态有关（我们默认在 $(t_0, t_f)$ 之间是绝热，除了初态，其余都确定性）。

$$\Rightarrow \frac{p(\xi;\lambda)}{p(\tilde{\xi};\tilde{\lambda})} = \frac{p^{eq}(\xi_0;\lambda_0)}{p^{eq}(\xi_f;\lambda_f)} = \exp\left(-\frac{1}{k_BT}\left(-W(\xi,\lambda) - \Delta F\right)\right) = \exp\left(\frac{-S^{tot}(\xi,\lambda)}{k_B}\right)$$

→这熵产生并非在 $(t_0,t_f)$ 内产生，而是在 $t_f$ 后与热库接触过程中产生

（用了 $H$ 在时间反演下不变性）。

正向做功 $W$ 的路径反向做功 $-W$（接着说，由于动力学确定，做功 $-W$ 的过程可被视为反向）。$\Rightarrow \frac{p(W,\lambda)}{p(-W,\tilde{\lambda})} = \exp\left(\frac{1}{k_BT}(W - \Delta F)\right)$

现在我们要把正/反过程概率与耗散功联系起来。由于 $p(\xi_f, t_f;\lambda)$ 可由 $p(\xi_0, t_0;\lambda)$ 唯一确定，所以可以有：$p(\xi_f, t_f;\lambda)/p(\tilde{\xi}_f, t_f;\tilde{\lambda}) = \exp\left(\frac{1}{k_BT}\left(W(\xi,\lambda) - \Delta F\right)\right)$，取对数后求平均功：

$$W = \Delta F + k_BT \int d\xi_f \, p(\xi_f;\lambda) \ln \frac{p(\xi_f, t_f;\lambda)}{p(\tilde{\xi}_f, t_f;\tilde{\lambda})} = \Delta F + k_BT \, D_{KL}\left(p(\xi_f, t_f;\lambda) \,\|\, p(\tilde{\xi}_f, t_f;\tilde{\lambda})\right)$$

同理，由于轨道是完全确定性的，所以甚至可以有：$\forall t \in [t_0, t_f]$ 有：$\frac{p(\xi, t;\lambda)}{p(\tilde{\xi}, t;\tilde{\lambda})} = \frac{p(\xi_f, t_f;\lambda)}{p(\tilde{\xi}_f, t_f;\tilde{\lambda})}$。所以我们只要在任一时间点上求正、反向分布的 KL-Div 就能得到耗散功联系。

下面，我们来研究一个比较不像样的设定。一个系统与热库一起沿 Hamilton 方程运动，在最细致的描述下，系统完全没有随机性，所有的随机性来自于粗化（例如在研究理想气体时，我们会有 $p_{eq} \propto \exp(-E_x/k_BT)$），这是由于我们将热库的一些状态"打包"了，而只是以系统的不同能量的状态。接下来，我们将相空间 $\Omega = \{all\ \xi\}$ 做了一个划分 $\Omega_x$，将每一个划分为一个介观态，可以计算每个介观态上的 $\exp(-W(\xi,\lambda)/k_BT)$ 均值：

$$\left\langle \exp\left(-W(\xi,\lambda)/k_BT\right)\right\rangle = \frac{1}{P_x(t,\lambda)} \int_{\Omega_x} d\xi \, p(\xi, t;\lambda) \exp\left(-\frac{1}{k_BT}\left(-W(\xi,\lambda)\right)\right)$$

$$= \frac{\int_{\Omega_x} d\xi \, p(\xi, t;\lambda) \cdot \exp\left(-\frac{1}{k_BT}\left(-W(\xi,\lambda)\right)\right)}{\int_{\Omega_x} d\xi \, p(\xi, t;\lambda)}$$

代入 $p(\xi, t;\lambda) = p(\tilde{\xi}, t;\tilde{\lambda}) \cdot \exp\left(\frac{1}{k_BT}\left(W(\xi,\lambda) - \Delta F\right)\right)$，则有：

$$\left\langle \exp\left(-\frac{W(\xi,\lambda)}{k_BT}\right)\right\rangle = \frac{p_x(t;\hat\lambda)}{p_x(t;\lambda)}\exp(-\Delta F/k_BT)$$

利用Jensen不等式有

$$\begin{cases} \langle W(\xi,\lambda)\rangle_\lambda \geq \Delta F + k_BT \ln \dfrac{p_x(t;\lambda)}{p_x(t;\hat\lambda)} \\ \langle W(\hat\xi,\hat\lambda)\rangle_{\hat\lambda} \geq -\Delta F - k_BT \ln \dfrac{p_x(t;\lambda)}{p_x(t;\hat\lambda)} \end{cases}$$

解一个平均，我们就可以有前向、后向做功和相应过程间的建立关系： 对于 $\forall t\in[t_0,t_f]$.

$$\begin{cases} W_F \geq \Delta F + k_BT\cdot D_{KL}\left(p_x(t;\lambda)\,\|\,p_x(t;\hat\lambda)\right) \\ W_B \geq -\Delta F + k_BT\cdot D_{KL}\left(p_x(t;\hat\lambda)\,\|\,p_x(t;\lambda)\right) \end{cases}$$

作为一个例子，我们考虑过阻尼振子。其概率密度演化服从方程 $\frac{\partial\rho}{\partial t} = \mu\cdot\frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda(t)\cdot x\rho + k_BT\cdot\frac{\partial\rho}{\partial x}\right]$. 按之前的方法，应有方差随时间的变化有：$d\sigma(t)/dt = 2\mu\left[-\lambda(t)\cdot\sigma(t) + k_BT\right]$，$\Delta F = \frac{k_BT}{2}\ln\frac{\lambda_f}{\lambda_0}$

而正向过程做功：$dW(t)/dt = \frac{1}{2}\cdot d\lambda(t)/dt\,\langle x^2\rangle_t = \frac{1}{2}d\lambda(t)/dt\cdot\sigma(t)$. 可以从任何一个特定的过程来看这个问题。e.g. 考虑 quench. 则 $W^{quench} = \frac{1}{2}k_BT\left(\lambda_f/\lambda_0 - 1\right)$.