

# 非平衡定常状態における揺動応答 関係と時間反転対称な物理量

---


白石直人 (学習院)  
(4月から東大総合文化(駒場))

N. Shiraishi, arXiv:2111.09477

N. Shiraishi, J. Stat. Phys. 185, 19 (2021)



---




# アウトライン


---

ゆらぐ系の熱力学：レビュー

ストール状態の揺動応答関係

熱力学不確定性関係の最適化





# アウトライン

---

## ゆらぐ系の熱力学：レビュー

ストール状態の揺動応答関係

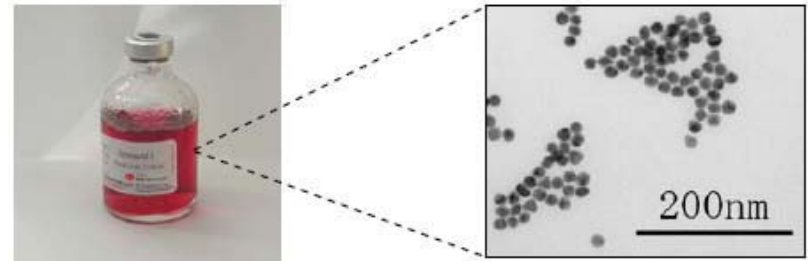
熱力学不確定性関係の最適化



---

# ゆらぐ系の熱力学の設定

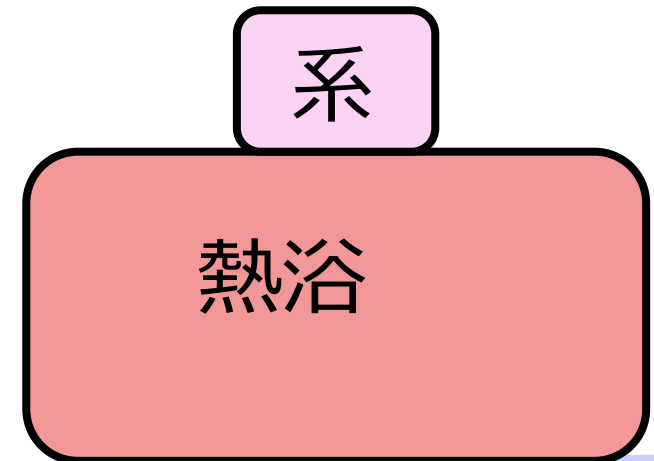
系：熱浴の熱ゆらぎを受けて確率的に時間発展



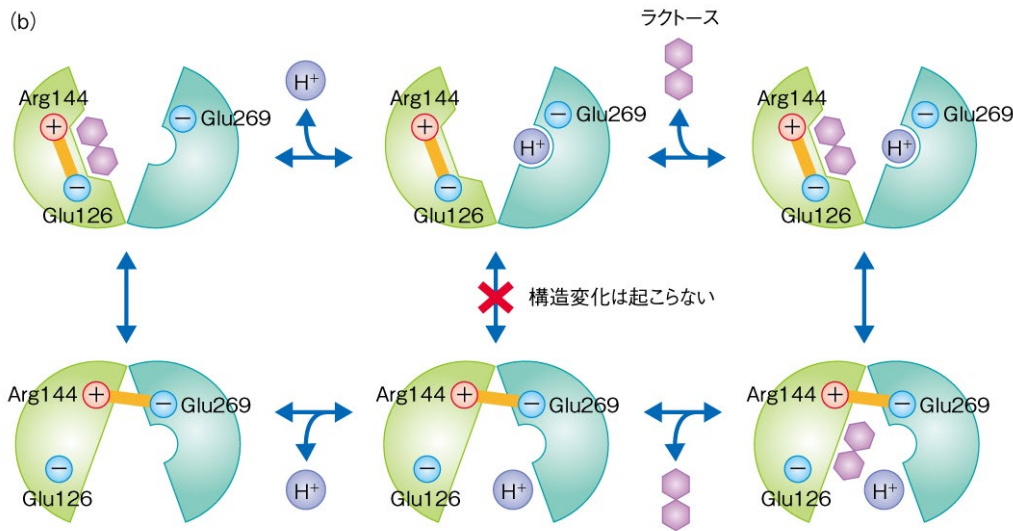
コロイド粒子

本講演を通しての設定

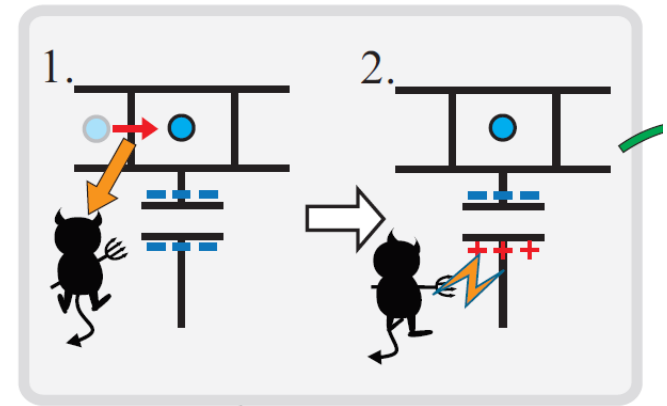
- ・ 熱浴は常に平衡状態  
→ **マルコフ過程**で系を記述
- ・ 古典系を対象とする



# 状況設定 (例：イメージ)



(<http://leading.lifesciencedb.jp/2-e009>)



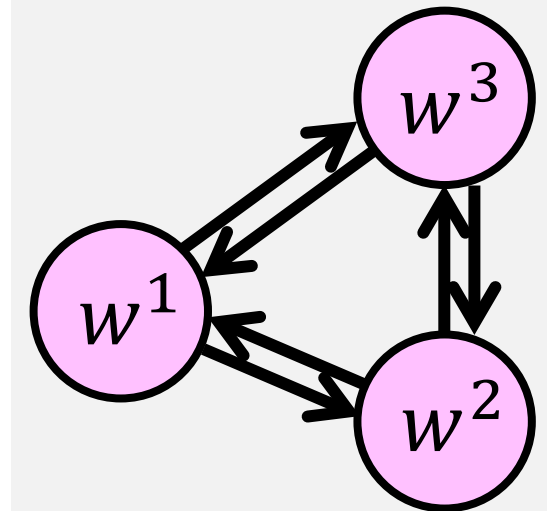
(<https://phys.org/news/2016-01-maxwell-demon-self-contained-information-powered-refrigerator.html>)

状態は離散的。安定な状態が複数ある。  
(連続空間中を動く粒子が対象の場合は、空間を離散化する)

# 古典確率過程での記述

状態は**確率分布** $p$ で指定される  
 $p$ の時間発展は**マスター方程式**で与えられる

$$\frac{d}{dt} p_{w,t} = \sum_{w'} R_{ww'} p_{w',t}$$



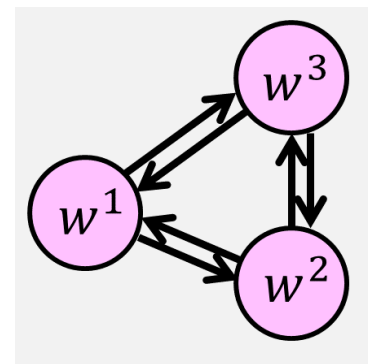
遷移レートの規格化条件  $\sum_w R_{ww'} = 0$   
( $R_{w/w'}$ のみ負、他は非負)

# 局所詳細釣り合い

## 局所詳細釣り合い(LDB)

分布がカノニカル分布ならば、ミクロにも流れが一切生じないこと

$$\frac{R_{ww'}}{R_{w'w}} = e^{-\beta(E_w - E_{w'})}$$



(熱浴が複数ある場合には、個々の熱浴ごとに上の条件式を課す)

# 平均エントロピー生成率の定義

平均エントロピー生成率（一熱浴の場合）

$$\langle \dot{\sigma} \rangle = - \sum_w \beta E_w \frac{dp_w}{dt} + \frac{d}{dt} \left( - \sum_w p_w \ln p_w \right)$$

熱浴のエントロピー増加  
( $dQ/T$ )

系の（シャノン）エ  
ントロピー増加



# 平均エントロピー生成率の定義

平均エントロピー生成率（一熱浴の場合）

$$\langle \dot{\sigma} \rangle = - \sum_w \beta E_w \frac{dp_w}{dt} + \frac{d}{dt} \left( - \sum_w p_w \ln p_w \right)$$

$$= \sum_{w,w'} R_{w'w} p_w \ln \frac{R_{w'w} p_w}{R_{ww'} p_{w'}}$$

局所詳細釣り合いを仮定すると

## 第二法則（確認）

エントロピー生成率を積分すると、エントロピー生成（エントロピー増加量）になる。

$$\langle \sigma \rangle = \int_0^\tau dt \langle \dot{\sigma} \rangle$$

$\langle \dot{\sigma} \rangle \geq 0$ なので $\langle \sigma \rangle \geq 0$ も成り立つ。  
（どちらも第二法則と呼ばれる）

# 確率的エントロピー生成

一つ一つの確率的な軌道ごとに、エントロピー生成を定義する。

(確率的) エントロピー生成  $\sigma$   
遷移  $w \rightarrow w'$  が起きるごとに

$$\beta(E_w - E_{w'}) + \ln \frac{p_w}{p_{w'}} = \ln \frac{R_{w'w} p_w}{R_{ww'} p_{w'}}$$

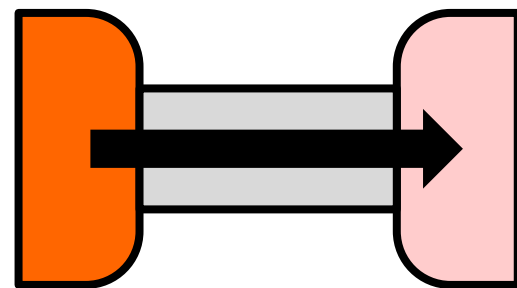
を足したものの(局所詳細釣り合いを仮定)

二項目は (シャノンと対比して) 確率的エントロピーとも呼ばれる量の寄与を与える

# エントロピー生成：定常な場合

定常かつ長時間の場合

積算カレント  $\mathcal{J} = \int J(t)dt$ 、共役駆動力  $h$  に対し  
$$\sigma = h\mathcal{J}$$

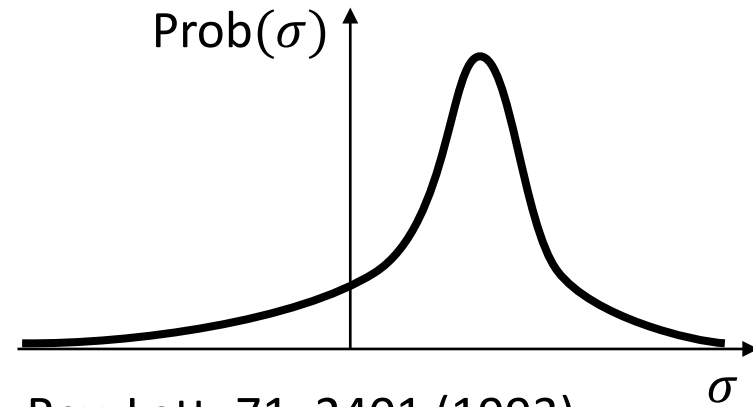


例：  $\mathcal{J} = \int J_Q(t)dt$  (熱流),  $h = \Delta\beta$  (逆温度差)

# ゆらぎの定理

第二法則： $\langle \sigma \rangle \geq 0$

**ゆらぎの定理： $\langle e^{-\sigma} \rangle = 1$**

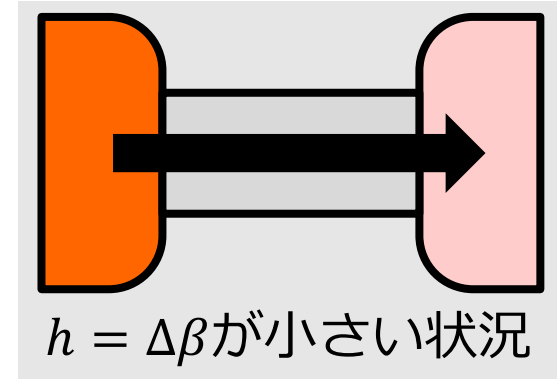


(D. J. Evans, E. G. D. Cohen, and G. P. Morriss, Phys. Rev. Lett. 71, 2401 (1993),  
C. Jarzynski, Phys. Rev. Lett. 78, 2690 (1997), J. Kurchan, J. Phys. A: Math. Gen.  
31, 3719 (1998)など.)

ゆらぎの定理からは、第二法則や揺動応答関係  
などの様々な関係式を導出できる

# 揺動応答関係の導出

$$\begin{aligned} 1 &= \langle e^{-hJ} \rangle \\ &= 1 - h\langle J \rangle + \frac{h^2}{2} \langle J^2 \rangle + O(h^3) \end{aligned}$$



確率分布 $\langle \cdot \rangle$ 自体も $h$ に依存しているので、

$$\langle J \rangle = \langle J \rangle_0 + \left. \frac{d\langle J \rangle_h}{dh} \right|_{h=0} h + O(h^2) \quad \text{等が成立}$$

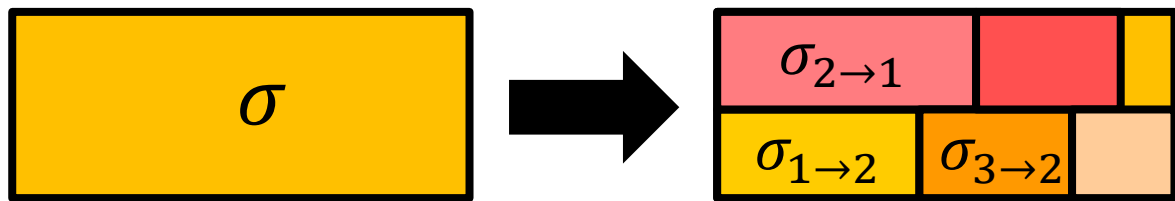
$h^2$ の係数比較より

$$\frac{1}{2} \langle J^2 \rangle_0 = \left. \frac{\partial \langle J \rangle_h}{\partial h} \right|_{h=0}$$



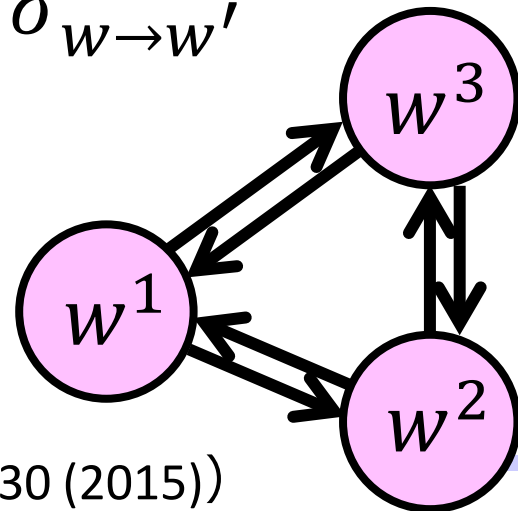
# 部分エントロピー生成の導入

**部分エントロピー生成**：エントロピー生成を熱力学的性質を保ったまま遷移ごとに分割



遷移の集合  $\Omega$  に対し  $\sigma_\Omega := \sum_{w \rightarrow w' \in \Omega} \sigma_{w \rightarrow w'}$

第二法則： $\langle \sigma_\Omega \rangle \geq 0$   
 ゆらぎの定理： $\langle e^{-\hat{\sigma}_\Omega} \rangle = 1$

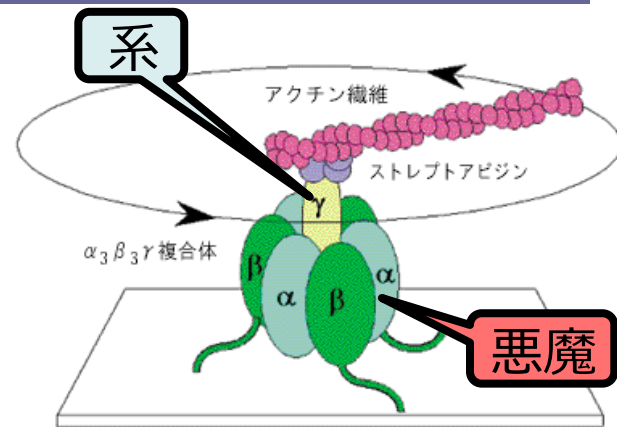




# 部分エントロピー生成の応用

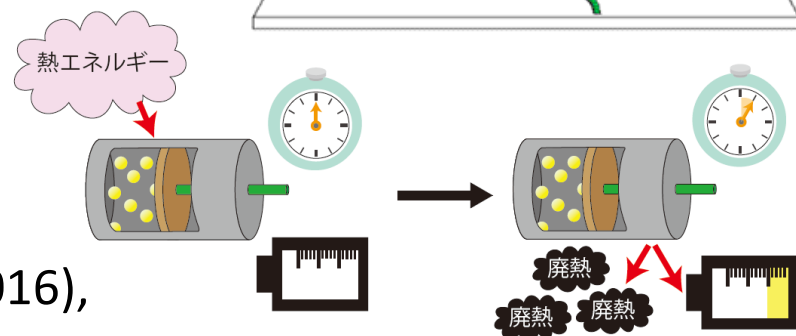
## 情報熱力学の問題（自律的なマクスウェルの悪魔）の解決

(NS, *et al.*, NJP. 17, 045012 (2015),  
NS, *et al.*, NJP 18, 013044 (2016) )



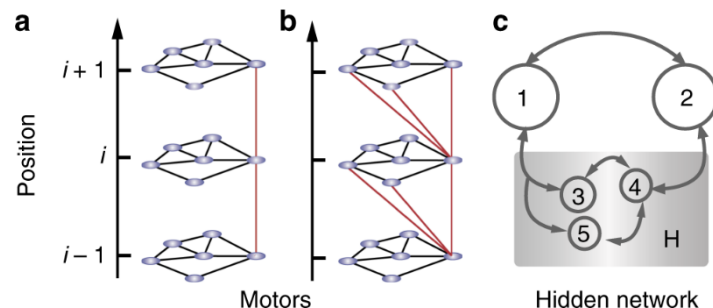
## 熱機関のパワーと効率のトレードオフ

(NS, K. Saito, and H. Tasaki, PRL 117, 190601 (2016),  
NS and K. Saito, JSP 174, 433 (2019))



## 散逸の大きさの推定

(G. Bisker, *et al.*, J. Stat. Mech. 093210 (2017),  
I. A. Martinez, *et al.*, Nat. Comm.10, 3542 (2019))



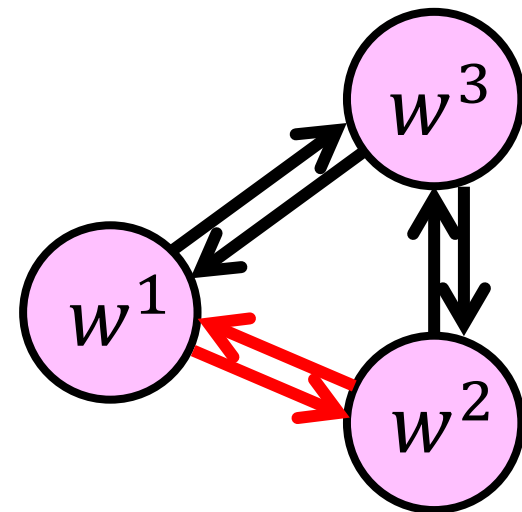




# 部分エントロピー生成：定義

1  $\leftrightarrow$  2を着目遷移 $\Omega$ とする。

部分エントロピー生成 $\sigma_{12}$ は以下の積算で定義される



- 12間を遷移したら  $\pm \ln \frac{R_{12}p_2}{R_{21}p_1}$  をカウント
- 状態1に滞在中  $\int \frac{J_{12}}{p_1} dt$  をカウント (2も同様)




# 別の部分エントロピー生成

全エントロピー生成 $\sigma$ の分割という特徴づけを捨てれば、別の定義も可能

I-部分エントロピー生成 $\sigma_{12}^I$ は以下の積算で定義

- 12間を遷移したら  $\pm \ln \frac{R_{12}p_2^*}{R_{21}p_1^*}$  をカウント  
( $p_i^*$ :12間の遷移をなくした際の定常分布)

これもゆらぎの定理 $\langle e^{-\sigma_{12}^I} \rangle = 1$ を満たす




# アウトライン

---

ゆらぐ系の熱力学：レビュー

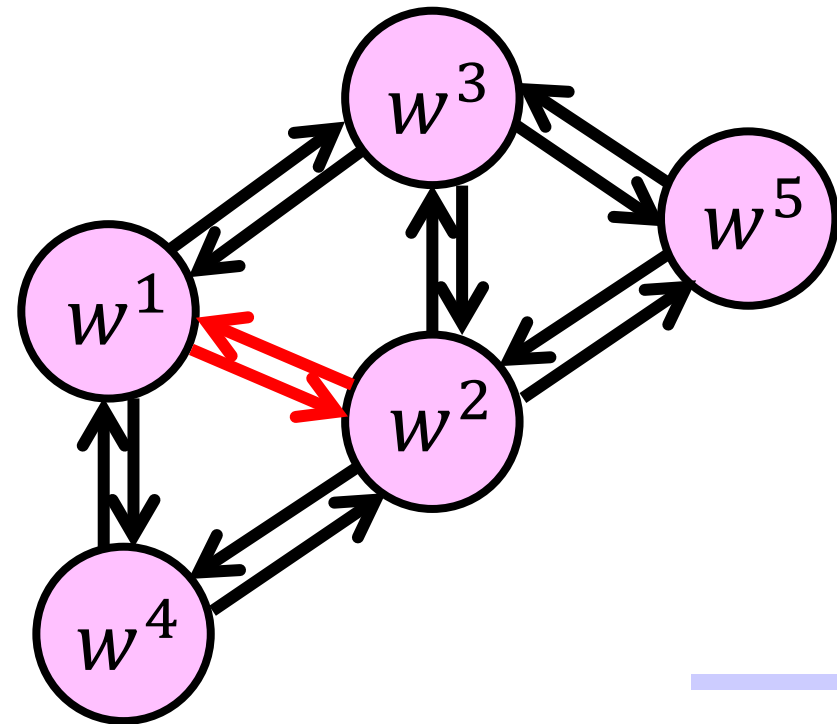
**ストール状態の揺動応答関係**

熱力学不確定性関係の最適化



# ストール状態

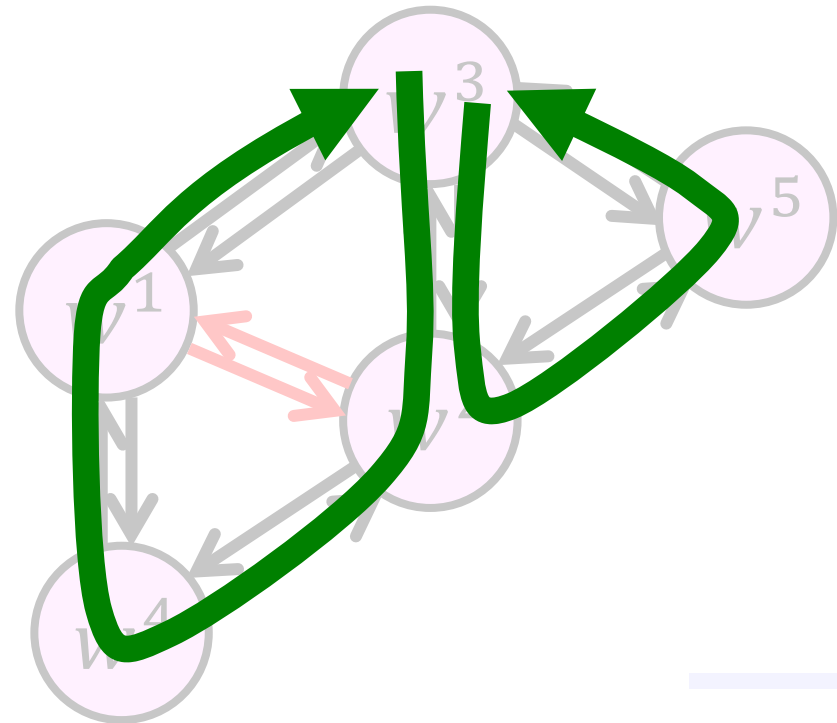
全体としては非平衡定常状態だが、着目しているエッジ(図の12)の確率流はゼロのとき、**ストール状態**と呼ぶ



# ストール状態

全体としては非平衡定常状態だが、着目しているエッジ(図の12)の確率流はゼロのとき、**ストール状態**と呼ぶ

以後しばらくストール状態の着目エッジについて議論をする





# ストール状態の揺動応答関係

12間のI-部分エントロピー生成 $\sigma_{12}^I$ は

$$\sigma_{12}^I = \ln \frac{R_{12} p_2^*}{R_{21} p_1^*} \mathcal{J}_{12} = (x_{12} - x_{12}^*) \mathcal{J}_{12}$$

と書ける ( $x_{12} := \ln \frac{R_{12}}{R_{21}}$  は共役な熱力学力)

$\langle e^{-\sigma_{12}^I} \rangle = 1$  を  $\Delta x_{12} := x_{12} - x_{12}^*$  で展開すると、ストール状態 $x_{12}^*$ の周りで

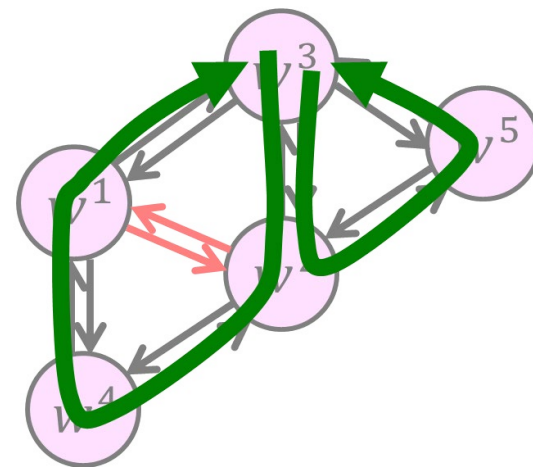
$$\frac{1}{2} \langle \mathcal{J}_{12}^2 \rangle_{x=x^*} = \left. \frac{\partial \langle \mathcal{J}_{12} \rangle_x}{\partial x_{12}} \right|_{x=x^*}$$





# ストール揺動応答関係の意味

$$\frac{1}{2} \langle \mathcal{J}_{12}^2 \rangle_{x=x^*} = \left. \frac{\partial \langle \mathcal{J}_{12} \rangle_x}{\partial x_{12}} \right|_{x=x^*}$$



- ストールしているエッジ（確率流ゼロ）について、通常の揺動応答関係と全く同じ関係式が成り立つ
- 着目エッジ以外は激しい非平衡流が流れていて構わない





# 対称カレント

カレント $\mathcal{J}$ は、時間反転で符号を変える

$$\mathcal{J}(\Gamma^\dagger) = -\mathcal{J}(\Gamma)$$

時間反転対称なカレント的な量 $I$ 、具体的には

$$I(\Gamma^\dagger) = I(\Gamma) \text{ かつ } \langle \mathcal{J} \rangle = \langle I \rangle$$

を満たす量を探したい。

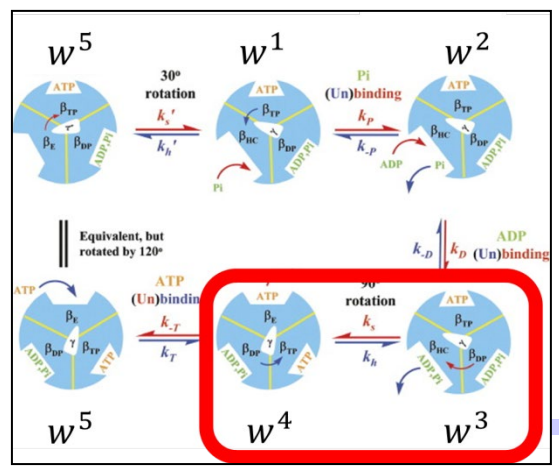
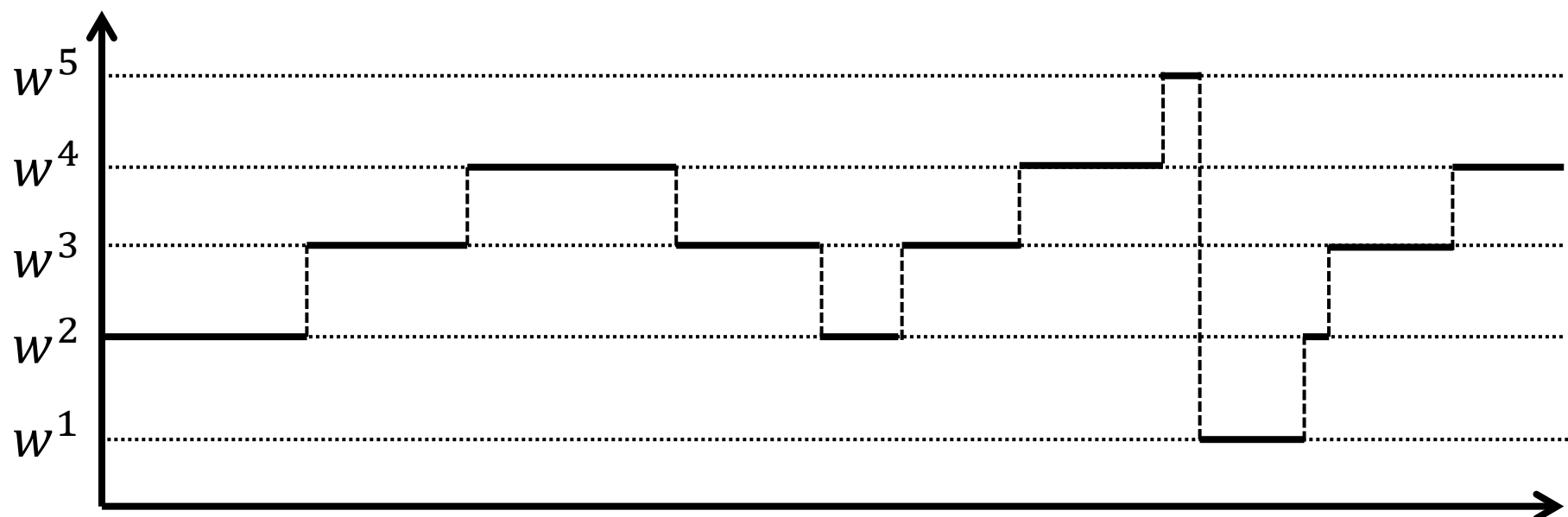
時間反転対称な量は、非平衡系の議論では重要と考えられている

(J. P. Garrahan, *et al.*, PRL 98, 195702 (2007). M. Baiesi, C. Maes, and B. Wynants, PRL 103, 010602 (2009), T. Bodineau and C. Toninelli, CMP 311, 357 (2012).)





# 經驗測度：代表的な時間反転対称量

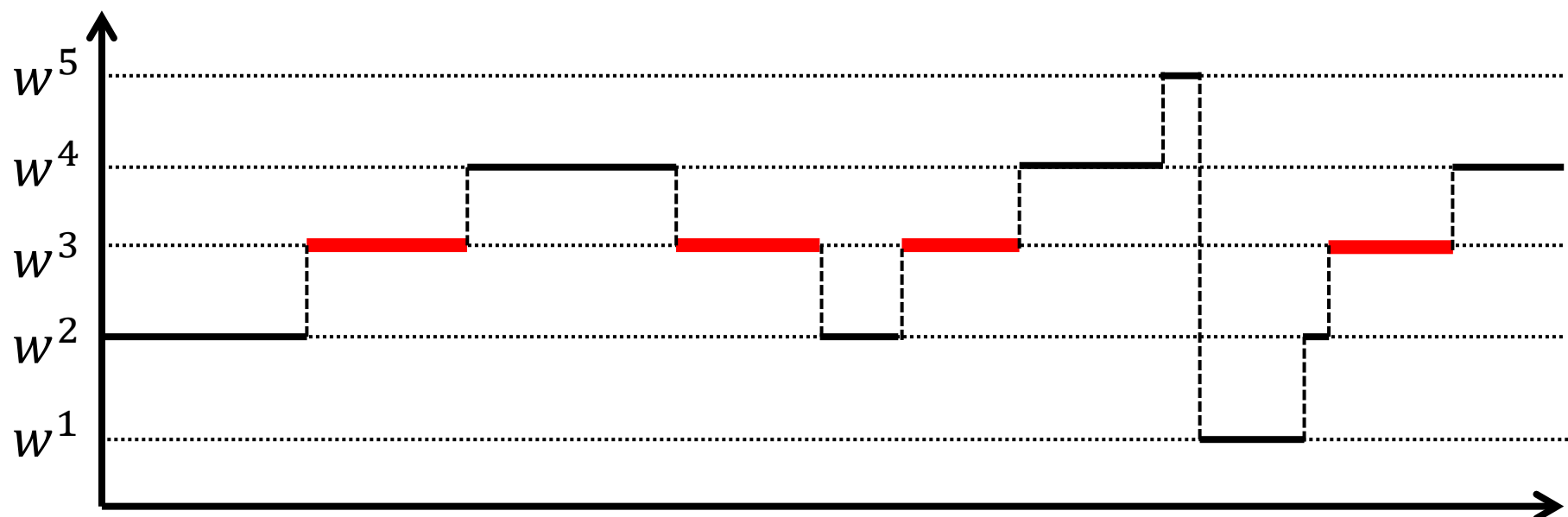


$t$

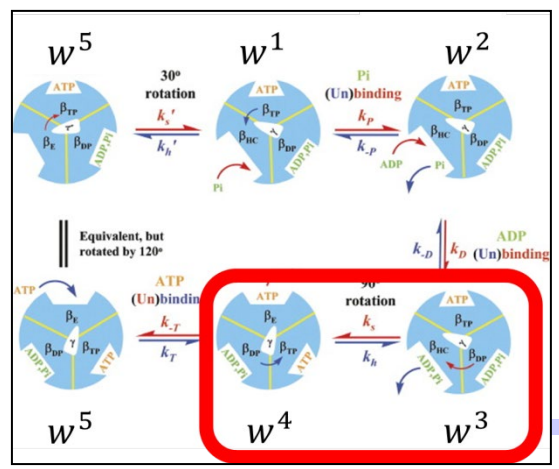




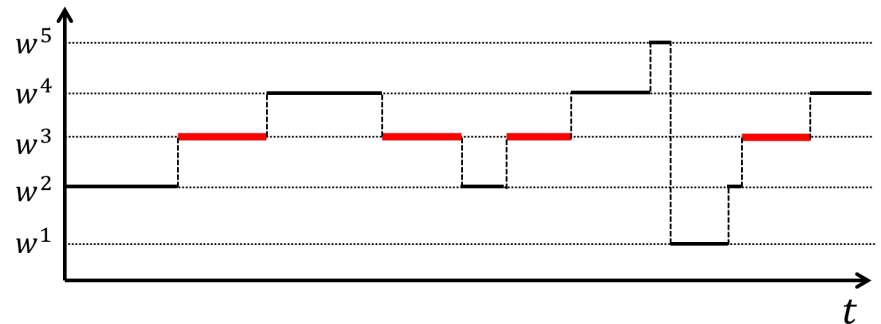
# 經驗測度：代表的な時間反転対称量



經驗測度  $\tau_3$



# 対称化カレントの定義



対称カレント  $I_{ij}$  は、経験測度  $\tau$  を用いて

$$I_{ij} := R_{ij}\tau_j - R_{ji}\tau_i$$

と定義する。

構成より明らかに  $I_{ij}(\Gamma^\dagger) = I_{ij}(\Gamma)$  かつ  $\langle J_{ij} \rangle = \langle I_{ij} \rangle$

( $I_{ij}$  自身が  $R$  経路で  $x_{ij}$  依存性を持つ点に注意)



# 対称カレントの揺動応答関係

ストール状態で以下の揺動応答関係が成り立つ

$$\frac{1}{2} \langle I_{ij}^2 \rangle_{x=x^*} = - \left. \frac{\partial \langle I_{ij, x^*} \rangle_x}{\partial x_{ij}} \right|_{x=x^*}$$

(NS, arXiv:2111.09477)

(注：右辺の微分は、 $I_{ij}$ の形 ( $I_{ij} := R_{ij}\tau_j - R_{ji}\tau_i$ の $R$ ) は固定したまま、パスの確率分布だけ変化させている)





# 証明の前に：ひねり経験測度

ひねり経験測度を以下で定義する

$$C_{ij,x} := \frac{\tau_j}{p_j^{ss}(x)} - \frac{\tau_i}{p_i^{ss}(x)}$$

- 任意の $x$ で平均ゼロ： $\langle C_{ij,x} \rangle_x = 0$
- ストール状態では $I_{ij,x^*} = R_{ij} p_j^{ss}(x^*) C_{ij,x^*}$
- 微分すると $\left. \frac{\partial \langle C_{ij,x^*} \rangle_x}{\partial x_{ij}} \right|_{x=x^*} = \frac{\partial}{\partial x} \ln \frac{p_j^{ss}}{p_i^{ss}}$



# 証明： $\langle e^{-\sigma_{ij}} \rangle = 1$ の展開

部分エントロピー生成は

$$\sigma_{ij} = a_{ij} \mathcal{J}_{ij} - \langle \mathcal{J}_{ij} \rangle c_{ij,x} = (\mathcal{J}_{ij} - I_{ij}) a_{ij} + \mathcal{O}(a_{ij}^2)$$

ただし  $a_{ij} := \ln \frac{R_{ij} p_j}{R_{ji} p_i}$  は全熱力学力

ストール状態では  $a_{ij} = 0$  なので、  $\langle e^{-\sigma_{ij}} \rangle = 1$  を  $a_{ij}$  で展開して

$$\frac{1}{2} \left\langle (\mathcal{J}_{ij} - I_{ij})^2 \right\rangle_{x=x^*} = - \left. \frac{\partial \langle \mathcal{J}_{ij} \rangle_x}{\partial a_{ij}} \right|_{a=0}$$



# 証明：部分エントロピー生成の利用

$$\frac{1}{2} \left\langle (J_{ij} - I_{ij})^2 \right\rangle_{x=x^*} = \left. \frac{\partial \langle J_{ij} \rangle_x}{\partial a_{ij}} \right|_{a=0}$$

以下の二つの結果を利用する

$\langle J_{ij} I_{ij} \rangle = 0$  平衡状態だと自明。非平衡なストール状態だと、係数場の方法を用いて導く

$$\left. \frac{\partial \langle J_{ij} \rangle_x}{\partial a_{ij}} \right|_{a=0} = \left. \frac{\partial \langle J_{ij} \rangle_x}{\partial x_{ij}} \right|_{x=x^*} - \left. \frac{\partial \langle I_{ij,x^*} \rangle_x}{\partial x_{ij}} \right|_{x=x^*}$$



# 証明：二つの部分エントロピー の揺動応答の差 = 対称カレント

$\sigma_{ij}^I$ の揺動応答関係

$$\frac{1}{2} \langle J_{ij}^2 \rangle_{x=x^*} = \left. \frac{\partial \langle J_{ij} \rangle_x}{\partial x_{ij}} \right|_{x=x^*}$$

$\sigma_{ij}$ の揺動応答関係

$$\frac{1}{2} \langle J_{ij}^2 \rangle_{x=x^*} + \frac{1}{2} \langle I_{ij}^2 \rangle_{x=x^*} = \left. \frac{\partial \langle J_{ij} \rangle_x}{\partial x_{ij}} \right|_{x=x^*} - \left. \frac{\partial \langle I_{ij,x^*} \rangle_x}{\partial x_{ij}} \right|_{x=x^*}$$

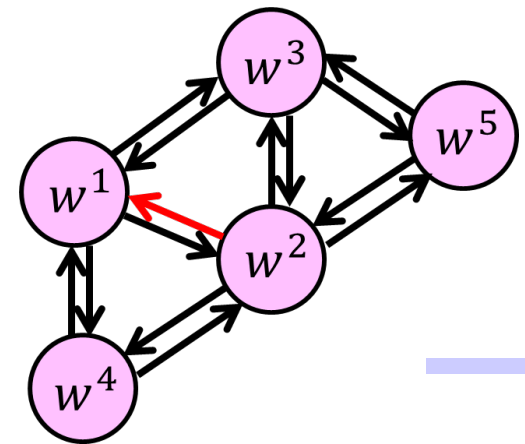
両者の差をとると、対称カレントの揺動応答関係になる（証明終）



# 対称カレント、ひねり経験測度 の実験的な有用性

(ストール状態周りでは、対称カレント $I_{ij}$ とひねり経験測度 $C_{ij}$ は $I_{ij} = R_{ij}p_j^{SS} C_{ij}$ と結びつくので、以下は $C_{ij}$ の意味を主に考察する)

対称カレントやひねり経験測度は、**生の遷移**  
**レート** $R_{ij}$ を推定するのに役立つ



# $R_{ij}$ の評価式 (1)

対称カレントの揺動応答関係を $C_{ij}$ の式に書き直すと

$$R_{ij} = \frac{2}{\langle C_{ij,x^*}^2 \rangle_{x^*} p_j^{ss}} \frac{\partial \langle C_{ij,x^*} \rangle_x}{\partial x_{ij}} \Big|_{x=x^*}$$

経験測度（滞在時間）のみの量  
カレントを一切含まない

$$C_{ij,x} := \frac{\tau_j}{p_j^{ss}(x)} - \frac{\tau_i}{p_i^{ss}(x)}$$

# $R_{ij}$ の評価式 (2)

対称カレントの定義式から丁寧に変形すると

$$R_{ij} = \frac{\left. \frac{\partial \langle \mathcal{J}_{ij} \rangle_x}{\partial x_{ij}} \right|_{x=x^*}}{p_j^{ss} \left( \tau + \left. \frac{\partial \langle \mathcal{C}_{ij, x^*} \rangle_x}{\partial x_{ij}} \right|_{x=x^*} \right)}$$

( $\tau$  : 測定時間の長さ)

ゆらぎについての量を一切含まない

# $R_{ij}$ の評価式 (3)

$$\begin{aligned} 2R_{ij}p_j^{ss} &= \left. \frac{\partial \langle J_{ij} \rangle_x}{\partial x_{ij}} \right|_{x=x^*} - \left. \frac{\partial \langle I_{ij,x^*} \rangle_x}{\partial x_{ij}} \right|_{x=x^*} \\ &= \langle J_{ij}^2 \rangle_{x^*} + \langle I_{ij,x^*}^2 \rangle_{x^*} \\ &= \langle J_{ij}^2 \rangle_{x^*} + (R_{ij}p_j^{ss})^2 \langle C_{ij,x^*}^2 \rangle_{x^*} \end{aligned}$$

$R_{ij}p_j^{ss}$  について解けば、 $R_{ij}$ が**ゆらぎのみの式**  
(応答を含まない) で書ける

# おまけ：確定性関係

$R_{ij}p_j^{ss}$  についての二次方程式

$$2R_{ij}p_j^{ss} = \langle J_{ij}^2 \rangle_{x^*} + (R_{ij}p_j^{ss})^2 \langle C_{ij,x^*}^2 \rangle_{x^*}$$

が実数解となる条件(判別式 $\geq 0$ )から

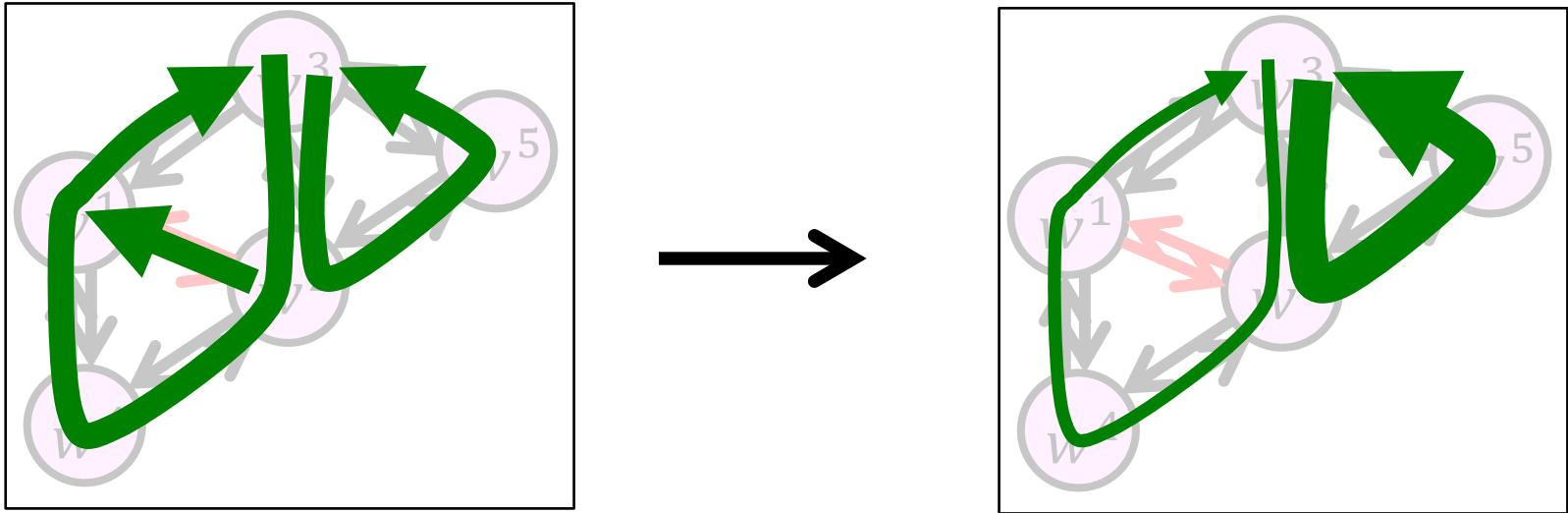
$$\langle J_{ij}^2 \rangle_{x^*} \langle C_{ij,x^*}^2 \rangle_{x^*} \leq 1$$

が得られる。


ストール状態ではカレントと（ひねり）経験測度は同時に大きくゆらぐことができない

# ストールでない場合

着目遷移がストールしてなかったとしても、今回の結果は利用可能な場合もある



着目遷移(12)以外の遷移レートを変えることで、12間の流れをゼロに出来れば、後者の系を用いて12間の遷移レートが求められる



# アウトライン

---

ゆらぐ系の熱力学：レビュー

ストール状態の揺動応答関係

**熱力学不確定性関係の最適化**



# 熱力学的不確定性関係 (TUR)

任意のカレント  $\mathcal{J}_d := \sum_{ij} d_{ij} \mathcal{J}_{ij}$  について、非平衡定常状態では

$$\frac{(\mathcal{J}_d)^2}{\text{Var}[\mathcal{J}_d]} \leq \frac{\sigma}{2}$$

が成立 (Var:分散。以後基本的に  $\langle \cdot \rangle$  なしの物理量は平均値)

(A. C. Barato and U. Seifert, PRL 114, 158101 (2015),  
T. R. Gingrich *et al.*, PRL 116 120601 (2016),  
A. Dechant and S.-i. Sasa, PNAS 117, 6430 (2020).)

エントロピー生成(散逸)と相対カレントゆらぎ  
は同時に小さく出来ない



# いろいろなTUR型の不等式

運動不確定性関係

$$\frac{(J_d)^2}{\text{Var}[J_d]} \leq \mathcal{A}$$

( $\mathcal{A} := \tau \sum_{ij} R_{ij} p_j$  : アクティビティ = ジャンプ総数)

(I. D. Terlizzi and M. Baiesi, JPAM. 52, 02LT03 (2018))

一方向遷移がある場合

$$\frac{(J_d)^2}{\text{Var}[J_d]} \leq \frac{\sigma_B + j_U}{2}$$

( $\sigma_B$ : 双方向遷移のエントロピー生成、 $j_U$ : 一方向遷移の流れ)

(A. Pal, S. Reuveni, and S. Rahav, PRR 3, 013273 (2021))

# 最適なTUR型不等式を求めて

いろいろなTUR型不等式があるが...

- **どの不等式が「よい」不等式なのか？**
- **こうした不等式はタイト（等号達成する）  
なのか？**

背景の一つ：TUR型不等式を用いて効率が定義できるが、その際にはタイトな不等式を使いたい

# 最適なTUR型不等式は存在する！

標準的なTUR型不等式の導出法[\*]を用いると、

$$\frac{(J_d)^2}{\text{Var}[J_d]} \leq \frac{\mathcal{F}}{2}$$

が得られる ( $\mathcal{F}$  : フィッシャー情報量)

([\*]A. Dechant and S.-i. Sasa, PNAS 117, 6430 (2020)の方法)

この導出法の範囲で**最適な $\mathcal{F}$** が存在する

(NS, JSP 185, 19 (2021))

# 標準的なTUR型不等式導出法

パス確率 $P(\Gamma)$ にパラメータ $\theta$ で摂動を加える。  
摂動下の平均を $\langle \cdot \rangle_\theta$ で表す。

シュワルツの不等式により以下が成立

$$\text{Var}[g] \cdot \mathcal{F} \geq \left( \frac{d\langle g \rangle_\theta}{d\theta} \right)^2$$

$g(\Gamma)$  : 任意のパスの関数

$\mathcal{F} := \left\langle \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \ln P_\theta(\Gamma) \right)^2 \right\rangle_{\theta=0}$  : フィッシャー情報量

# 標準的なTUR型不等式導出法

摂動として  $R_{ij}^\theta := R_{ij}e^{\theta Z_{ij}}$  という形を用いる。

ここで、 $Z_{ij}$ の条件として

$$\begin{cases} Z_{ij}^2 R_{ij} p_j^{ss} + Z_{ji}^2 R_{ji} p_i^{ss} = F_{ij} \\ Z_{ij} R_{ij} p_j^{ss} - Z_{ji} R_{ji} p_i^{ss} = R_{ij} p_j^{ss} - R_{ji} p_i^{ss} = J_{ij} \end{cases}$$

を課す ( $F_{ij}$ は与えられた量) と、後者により

$$J_{ij}^\theta = (1 + \theta)J_{ij} + O(\theta^2) \rightarrow \frac{dJ_{ij}^\theta}{d\theta} = J_{ij}$$

# 標準的なTUR型不等式導出法

$R_{ij}^\theta := R_{ij} e^{\theta Z_{ij}}$  より  $\mathcal{F} = \int_0^\tau dt \langle Z^2 \rangle^{ss} = \int_0^\tau dt \sum_{ij} F_{ij}$  が成立。

$$\mathcal{F} := \left\langle \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \ln P_\theta(\Gamma) \right)^2 \right\rangle_{\theta=0}$$

$g(\Gamma) = \mathcal{J}_d(\Gamma)$  とすると

$$\text{Var}[g] \cdot \mathcal{F} \geq \left( \frac{d\langle g \rangle_\theta}{d\theta} \right)^2$$

$$\rightarrow \frac{(\mathcal{J}_d)^2}{\text{Var}[\mathcal{J}_d]} \leq \int_0^\tau dt \langle Z^2 \rangle^{ss} = \int_0^\tau dt \sum_{ij} F_{ij} =: \frac{\mathcal{F}}{2}$$

# 最適な $F_{ij}$ は？

$\frac{(J_d)^2}{\text{Var}[J_d]} \leq \frac{F}{2}$  は  $F_{ij}$  が小さいほどタイトな不等式

だが  $F_{ij}$  は任意ではなく、 $X = Z_{ij}, Y = Z_{ji}, A = R_{ij}p_j^{SS}, B = R_{ji}p_i^{SS}$  とおくと、与えられた  $A, B, F$  に対し

$$\begin{cases} AX^2 + BY^2 = F, \\ AX - BY = A - B \end{cases}$$

が実数解  $X, Y$  を持つ必要がある。

# 最適な $F_{ij}$ は？

$$\begin{aligned}AX^2 + BY^2 &= F, \\AX - BY &= A - B\end{aligned}$$

$Y$ を消去すると、 $X$ の二次方程式の判別式は

$$D = 4AB((A + B)F - (A - B)^2)$$

$$\longrightarrow F \geq F^* = \frac{(A-B)^2}{A+B} = \frac{(R_{ij}p_j^{SS} - R_{ji}p_i^{SS})^2}{R_{ij}p_j^{SS} + R_{ji}p_i^{SS}}$$

よって $\mathcal{F} = \tau \sum_{ij} \frac{(R_{ij}p_j^{SS} - R_{ji}p_i^{SS})^2}{R_{ij}p_j^{SS} + R_{ji}p_i^{SS}} =: \Pi$ が最適な $\mathcal{F}$



# 擬エントロピー生成

これを擬エントロピー生成とよぶ

$$\Pi = \tau \sum_{ij} \frac{(R_{ij}p_j^{ss} - R_{ji}p_i^{ss})^2}{R_{ij}p_j^{ss} + R_{ji}p_i^{ss}}$$

- エントロピー生成の下限を与える： $\sigma \geq \Pi$
- overdamped Langevin では  $\sigma = \Pi$
- 多くの「エントロピー生成による不等式」は、実際には「擬エントロピー生成」がタイトなバウンドを与える

# 最適な $\mathcal{F}$ でも等号達成しない

$$\frac{(J_d)^2}{\text{Var}[J_d]} \leq \frac{\Pi}{2}$$

この等号達成条件は、シュワルツの不等式の等号達成条件から導ける。

その結果、系が非平衡定常状態である限り、**任意の $J_d$ で等号達成しない**ことが示せる。

→ さらなる改善の余地あり！

# 一般化経験測度 + 一般化カレント なら等号達成する！

一般化経験測度  $I_q := \sum_i q_i \tau_i$  を導入する  
これを用いた

$$\frac{(\mathcal{J}_d)^2}{\text{Var}[\mathcal{J}_d + I_q]} \leq \frac{\Pi}{2}$$

は非平衡定常状態でも一般に等号達成する

(overdamped Langevinの場合 : A. Dechant and S. Sasa, PRR 3, L042012 (2021),  
一般の場合 : NS, JSP 185, 19 (2021))

等号達成する  
パラメータの組

$$\left\{ \begin{array}{l} d_{ij} = \frac{R_{ij} p_j^{ss} - R_{ji} p_i^{ss}}{R_{ij} p_j^{ss} + R_{ji} p_i^{ss}} \\ q_j = - \sum_i \frac{R_{ij} p_j^{ss} - R_{ji} p_i^{ss}}{R_{ij} p_j^{ss} + R_{ji} p_i^{ss}} R_{ij} \end{array} \right.$$

# まとめ

- 対称化カレント $I_{ij}$ は、ストール状態周りで以下の揺動応答関係を満たすことを示した。

$$\frac{1}{2} \langle I_{ij}^2 \rangle_{x=x^*} = - \left. \frac{\partial \langle I_{ij, x^*} \rangle_x}{\partial x_{ij}} \right|_{x=x^*}$$

- 以下のTUR型不等式が最適な形であり等号達成することを示した

$$\frac{(\mathcal{J}_d)^2}{\text{Var}[\mathcal{J}_d + I_q]} \leq \frac{\Pi}{2}$$

END