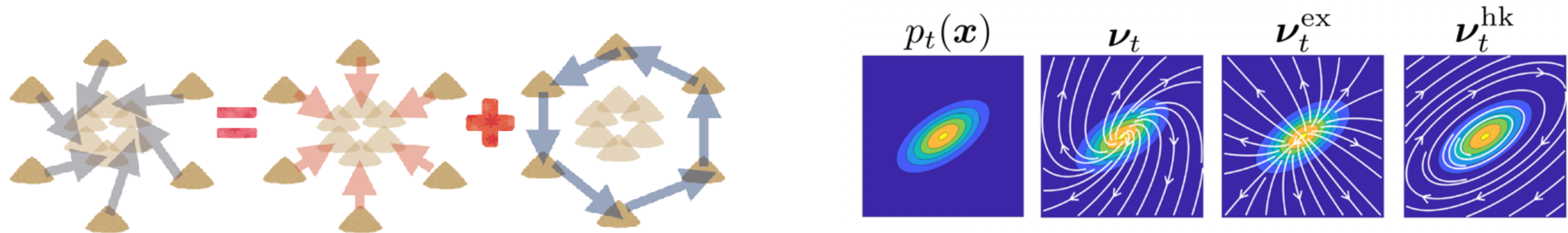


最適輸送に基づいた熱力学



情報物理学の新展開-沙川ERATOキックオフワークショップ, 2024/3/22, 理研(和光)

東京大学理学系研究科 附属生物普遍性研究機構,

沙川ERATO 最適輸送GGL, 伊藤 創祐

今回のトークに関連した研究の共同研究者

Andreas Dechant* (京大理), 佐々 真一 (京大理)

Artery Kolchinsky (Postdoc→Pompeu Fabra), 藤本 悠雅 (Postdoc→総研大)

仲里 夢叶 (2022年 修士卒), 吉村 耕平 (D2), 永山 龍那 (M2)

大泉 匡史* (東大総合文化), 関澤 太樹 (大泉研D1)

* 最適輸送グループメンバー

Papers:

- [1] Nakazato, M., & Ito, S. *Physical Review Research* 3, 043093 (2021). [2] Dechant, A., Sasa, S. I., & Ito, S. *Physical Review Research* 4, L012034 (2022).
[3] Dechant, A., Sasa, S. I., & Ito, S. *Physical Review E* 106, 024125 (2022). [4] Yoshimura, K., Kolchinsky, A., Dechant, A., & Ito, S. *Physical Review Research* 5, 013017 (2023).
[5] Ito, S. *Information Geometry* 7, 441-483 (2024). [6] Fujimoto, Y., & Ito, S. *Physical Review Research* 6, 013023 (2024).
[7] Kolchinsky, A., Dechant, A., Yoshimura, K., & Ito, S. *arXiv:2206.14599*. [8] Yoshimura, K., & Ito, S. *arXiv preprint arXiv:2305.19519*.
[9] Nagayama, R., Yoshimura, K., Kolchinsky, A., & Ito, S. *arXiv:2311.16569*. [10] Sekizawa, D., Ito, S., & Oizumi, M. *arXiv:2312.03489*.

沙川ERATO情報エネルギー変換プロジェクト

情報とエネルギーの相互変換の原理限界の学理の確立

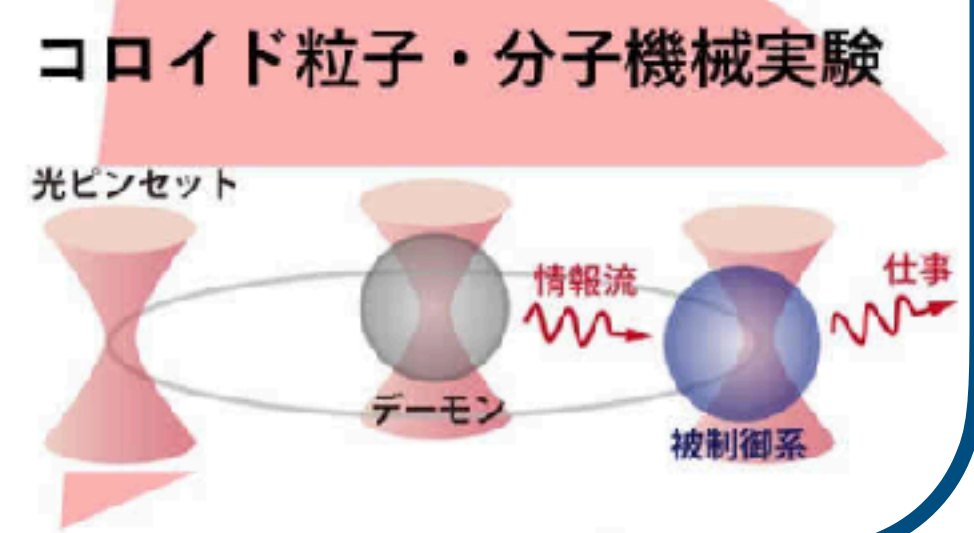
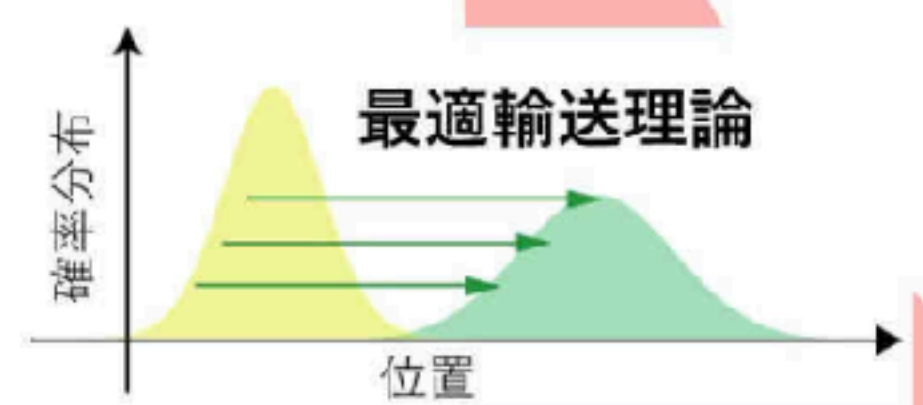
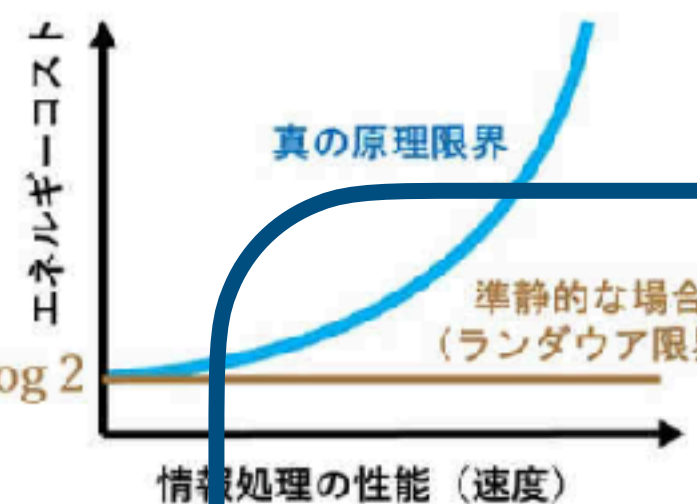
この辺りの理論を担当

現在実用化されている計算機は原理的な限界よりもはるかに大量のエネルギーを消費していると見られており、莫大な計算量に伴うエネルギー消費量の増加が深刻な問題となっています。今後さらに計算量が増大することが予想されることから、高速な情報処理と高いエネルギー効率を同時に実現する新機軸となる学理の創出が期待されています。

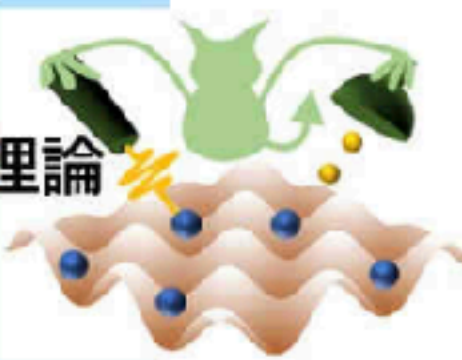
このような背景の中で、本プロジェクトでは、「いかにして、トレードオフ関係にある高速な情報処理と高いエネルギー効率を同時に達成するか」という課題を設定し、その原理限界と、原理限界達成に向けた方法を明らかにするために、研究総括が先駆者となって発展した「情報熱力学」の成果を通じ、理論と実験の両面で取り組みます。具体的には、古典から量子にわたる実験系で、熱ゆらぎ・量子ゆらぎの観測と制御により情報と熱力学的エネルギーの変換を検証することにより、情報処理に必要なエネルギーの原理限界を明らかにします。それらの知見を統合して統一的な理論を構築し、「情報と熱力学的エネルギーの相互変換の原理限界」の学理の確立を目指します。本研究を通じて、将来的には新しい計算機概念の構築につながることを期待されます。

JST 沙川ERATOプロジェクトについて

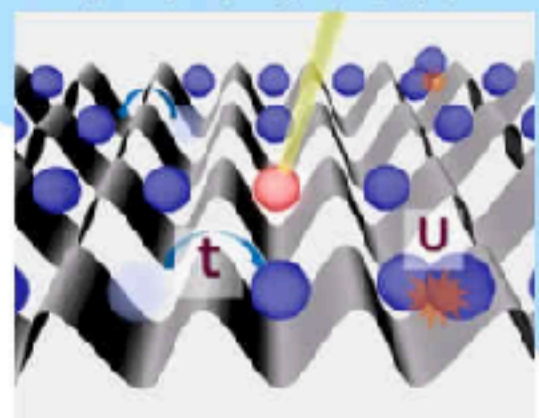
最適輸送に基づいた熱力学によって、エネルギー散逸と高速な情報処理に関する原理限界を、古典的なコロイド粒子系を足がかりに展開して解明する。



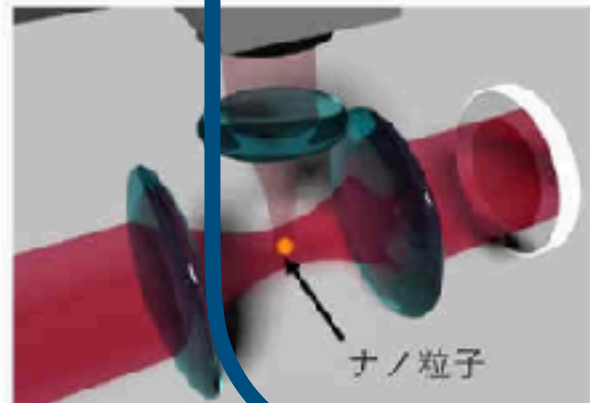
量子多体系の理論



冷却原子実験



ナノ粒子実験



量子 (量子ゆらぎ)

古典 (熱ゆらぎ)

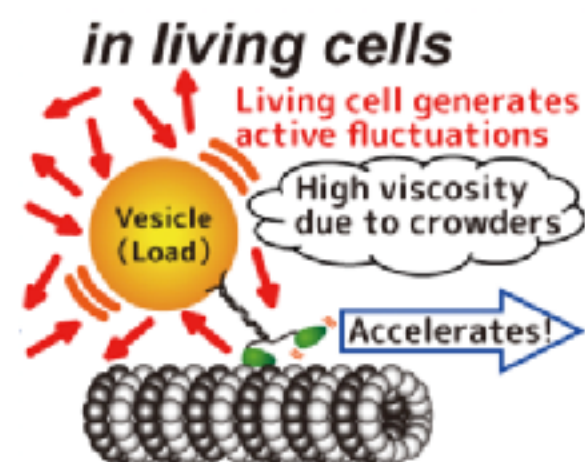
最適輸送に基づいた熱力学のコンセプト

- 最適輸送という「最小コストによる状態間の輸送」の理論を用いて, 最小の熱力学的なコスト, すなわち最小エントロピー生成を達成するプロトコルと, その性質について考える.
- 瞬間的な状態変化において, 散逸であるエントロピー生成率を最適な輸送と非最適な輸送に分解する.
- 最適輸送理論における幾何構造に着目して, 高速な情報処理に関する原理限界の候補である熱力学的なトレードオフ関係(熱力学的不確定性関係/速度限界)を導出する.

最適輸送に基づいた熱力学に関わりうる分野の例

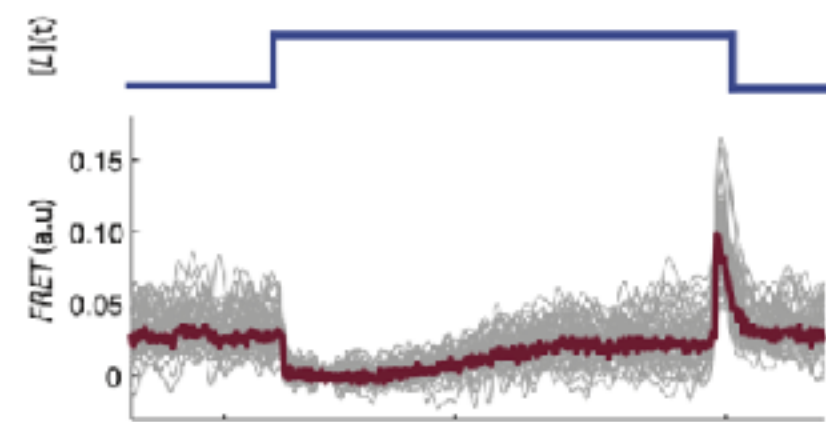


最適輸送と熱力学のworkshop (2023.3)



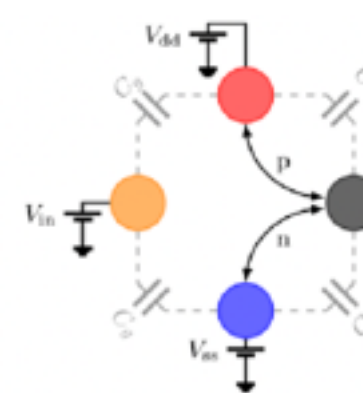
分子モーター系

Ariga, Takayuki, et al. *Physical review letters* 127.17 (2021): 178101.



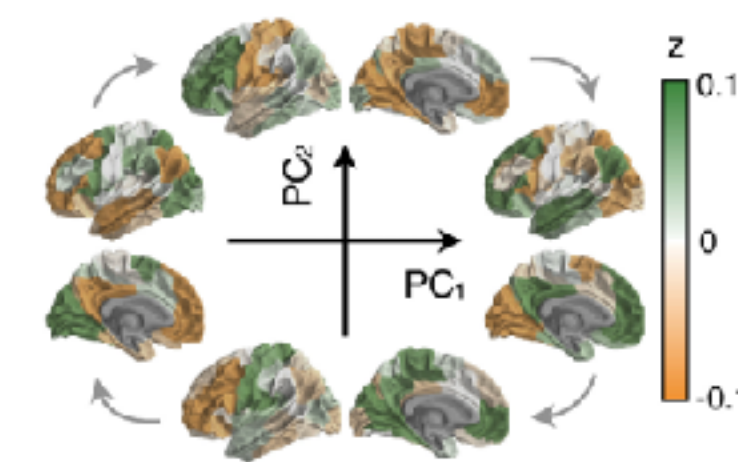
生体シグナル伝達系

Keegstra, Johannes M., et al. *Elife* 6 (2017): e27455.



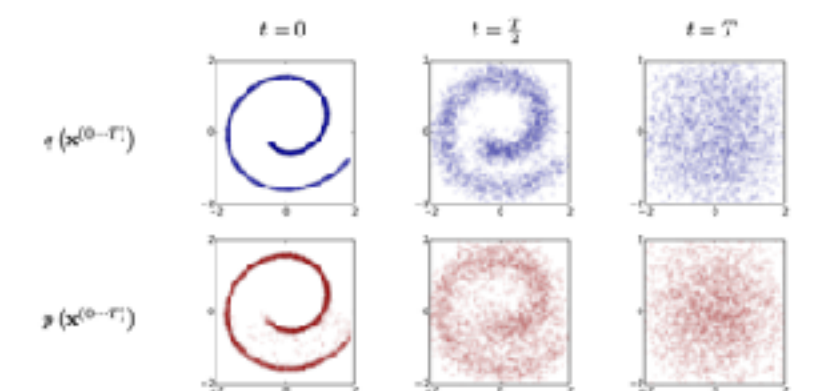
論理ゲート (CMOS)

Freitas, N., Delvenne, J. C., & Esposito, M. (2021). *Physical Review X*, 11(3), 031064.



脳ダイナミクス

Lynn, Christopher W., et al. *PNAS*, 118 e2109889118 (2021).



生成モデル

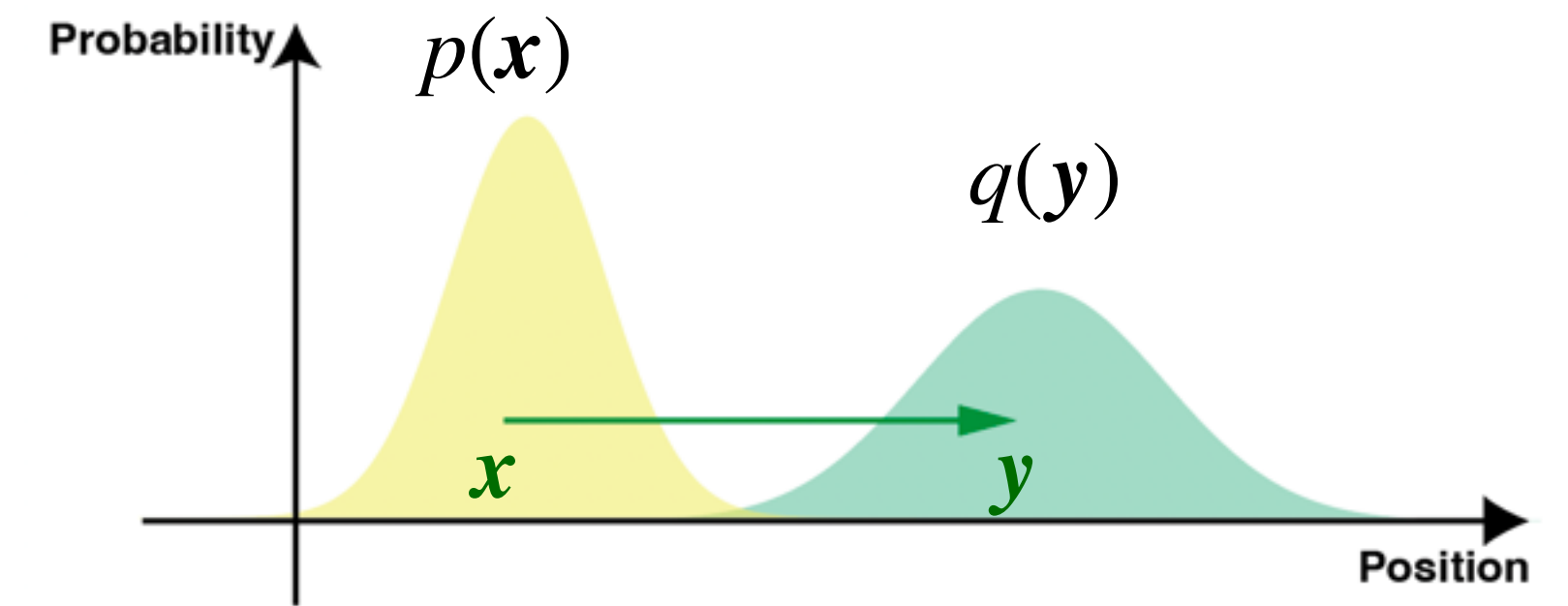
Sohl-Dickstein, Jascha, et al. *International conference on machine learning*. PMLR, 2015.

最適輸送とは

Villani, C. (2009). *Optimal transport: old and new* (Vol. 338, p. 23). Berlin: springer.

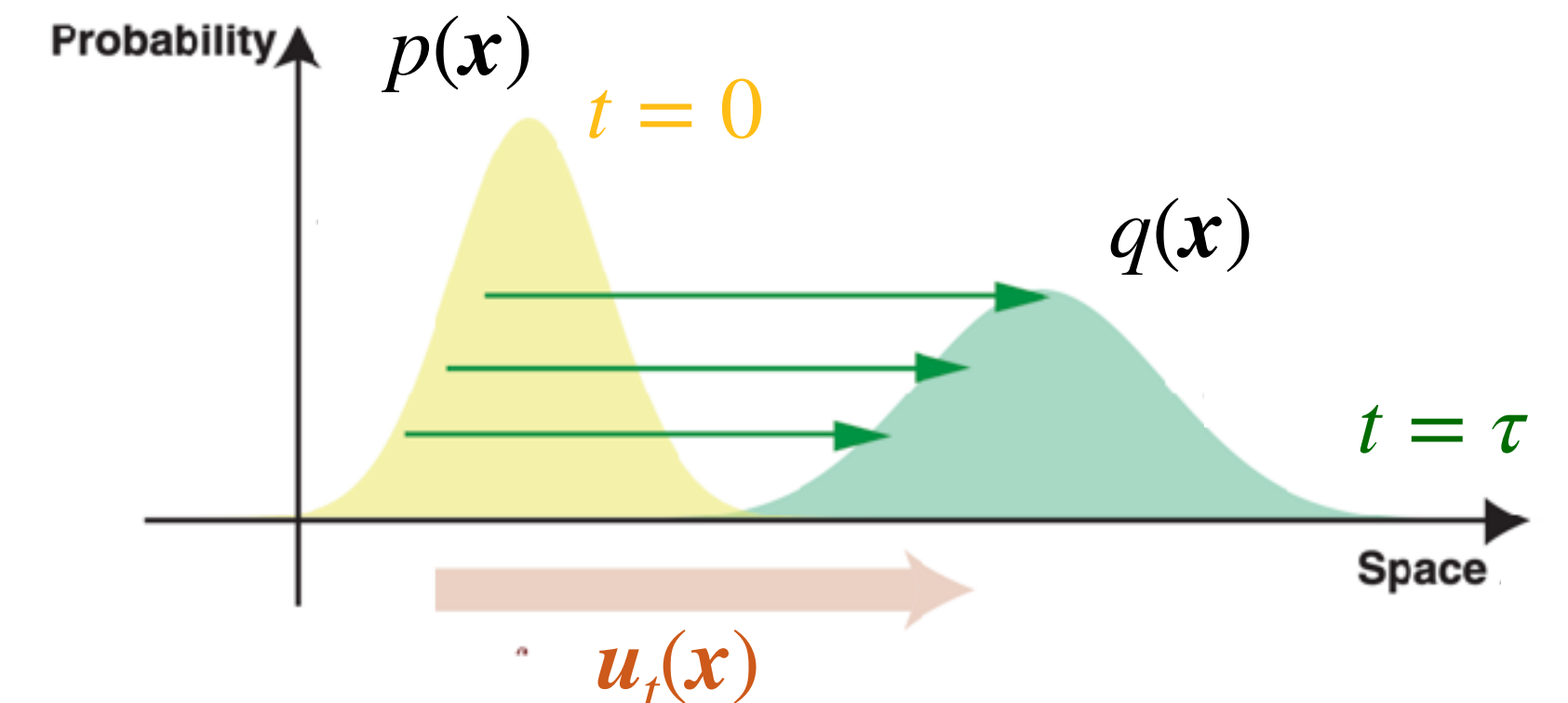
最適輸送問題 type A (Monge問題/Kantorovich問題)

- ある分布の山 $p(x)$ を別の分布の山 $q(y)$ に輸送する問題を考える。
輸送には移動距離に応じたコストがかかる。最小な輸送コストは何か。



最適輸送問題 type B (Benamou-Brenier公式/Beckman問題)

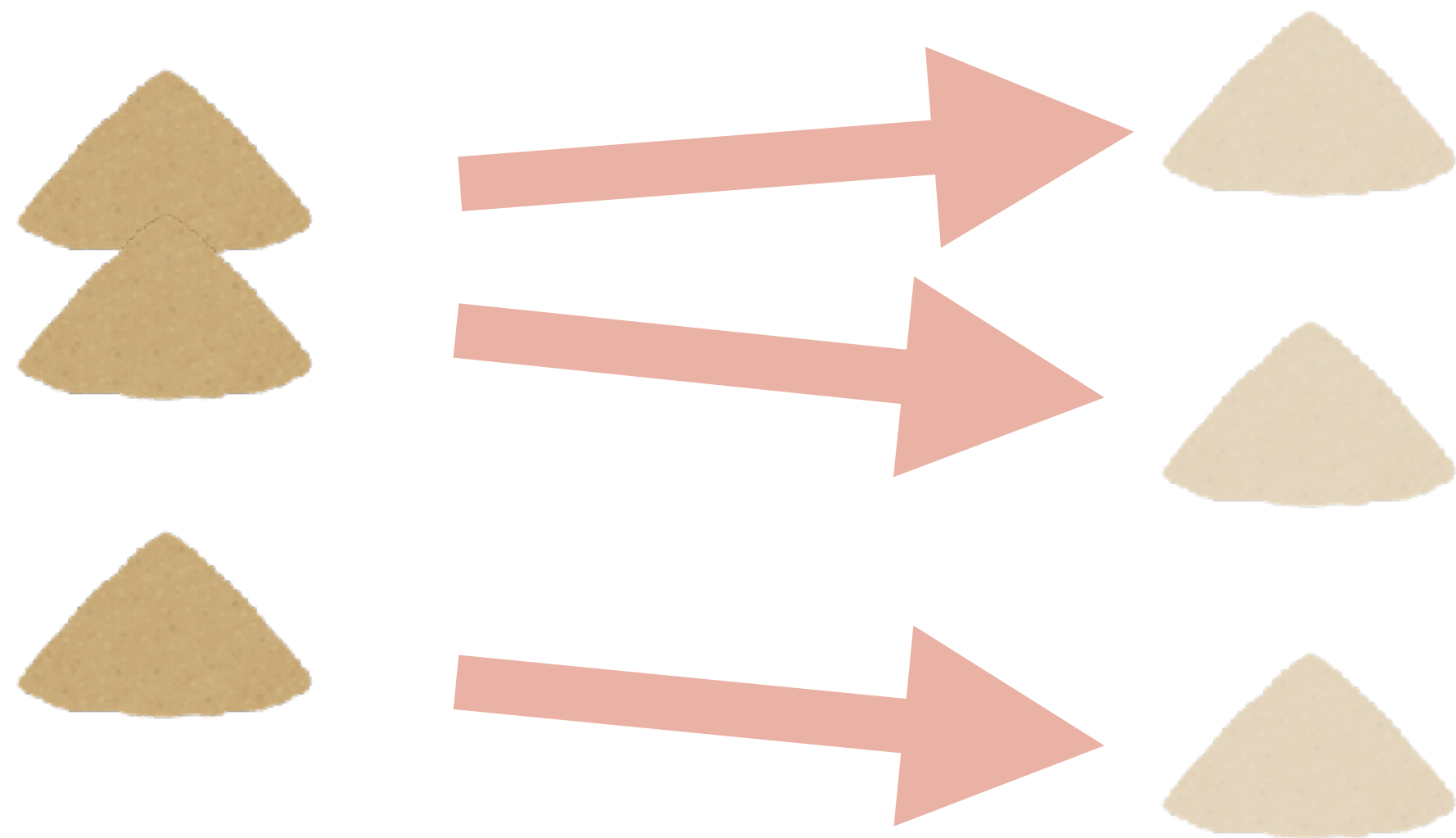
- ある分布の山 $p(x)$ を別の分布の山 $q(y)$ に有限時間 τ で連続の式のダイナミクスで輸送する問題を考える。
輸送には流れに応じたコストがかかる。最小な輸送コストは何か。



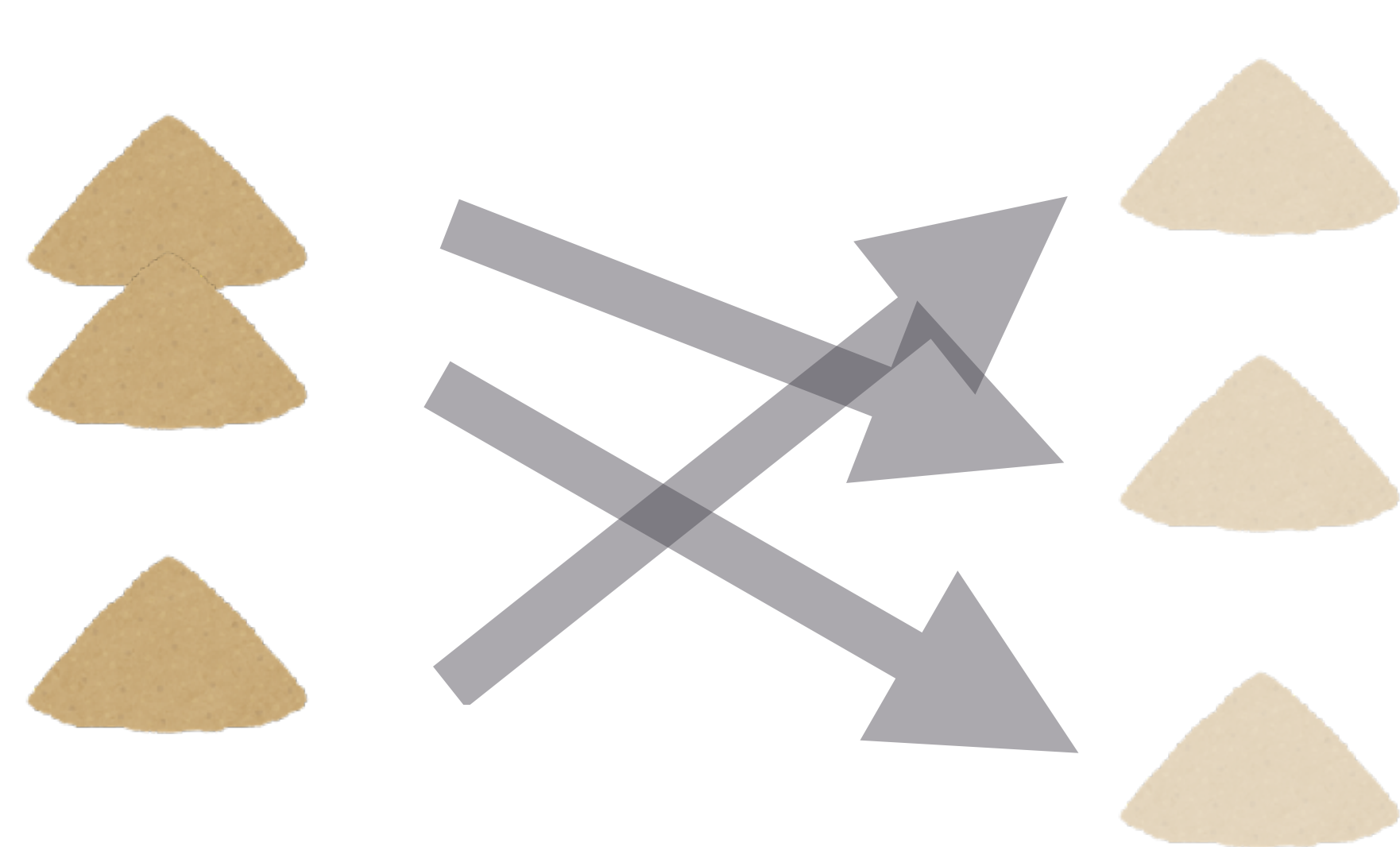
(ユークリッド空間上の確率分布の輸送に関しては対応関係[Kantorovich-Rubinstein双対性]あり)

最適輸送とは - 直感的な理解

砂山(点群)の \mathbb{R}^2 上の最適輸送の例



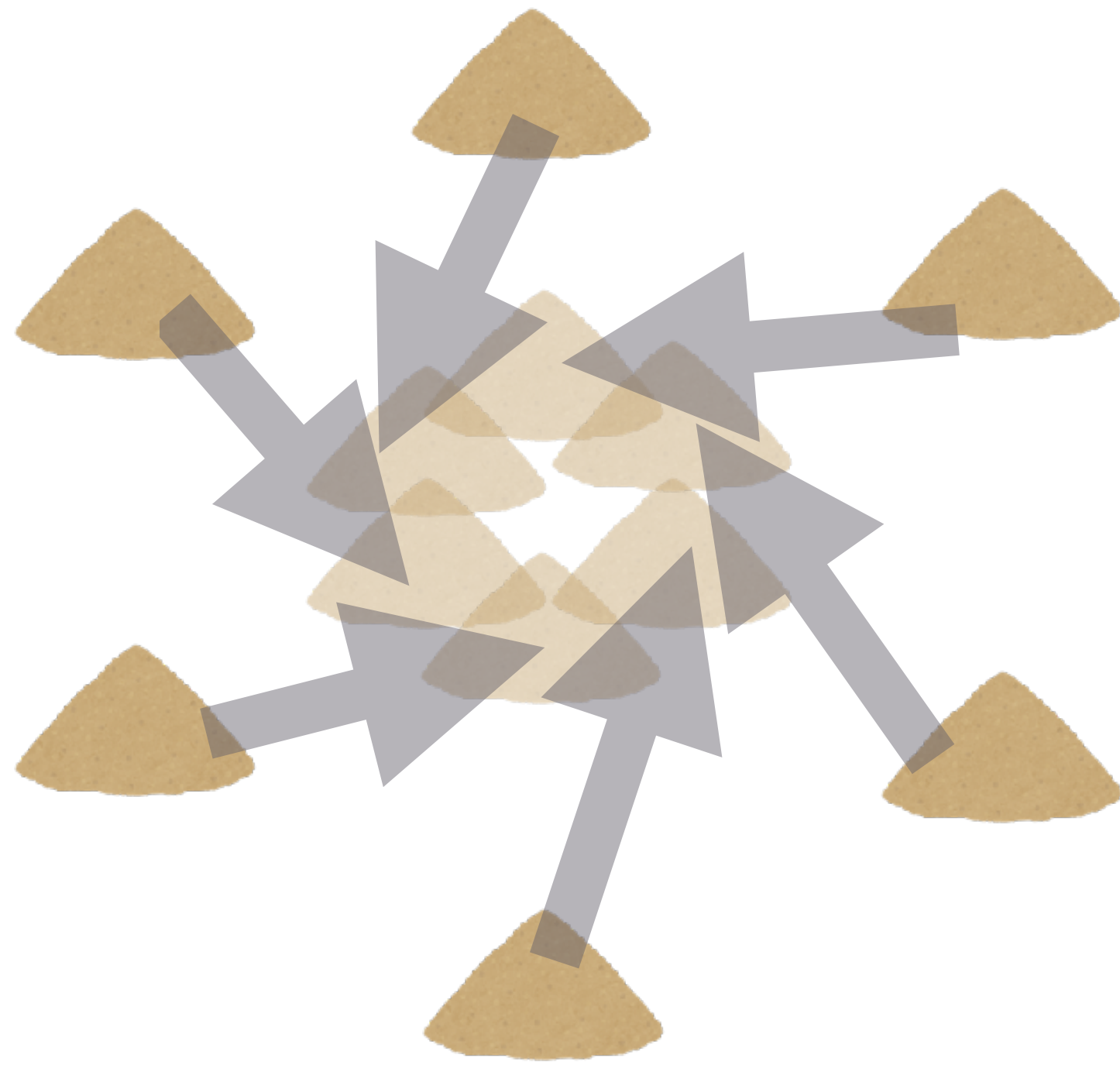
砂山(点群)の \mathbb{R}^2 上の最適輸送でない例



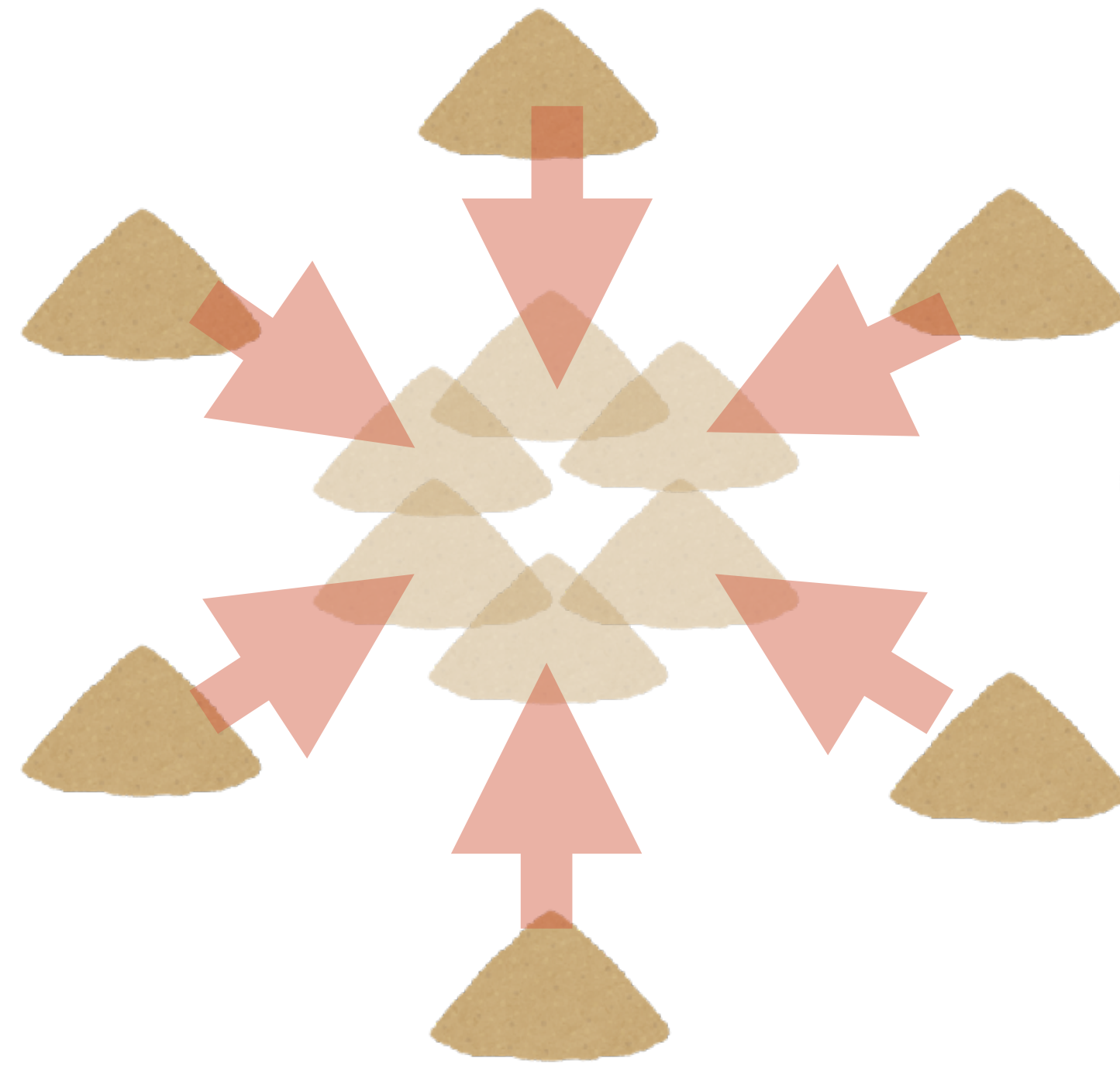
砂山(点群/分布)をそれぞれ近い場所に(直線かつ等速で)動かせば最適輸送

なぜ最適輸送を考えるか - 直感的な理解

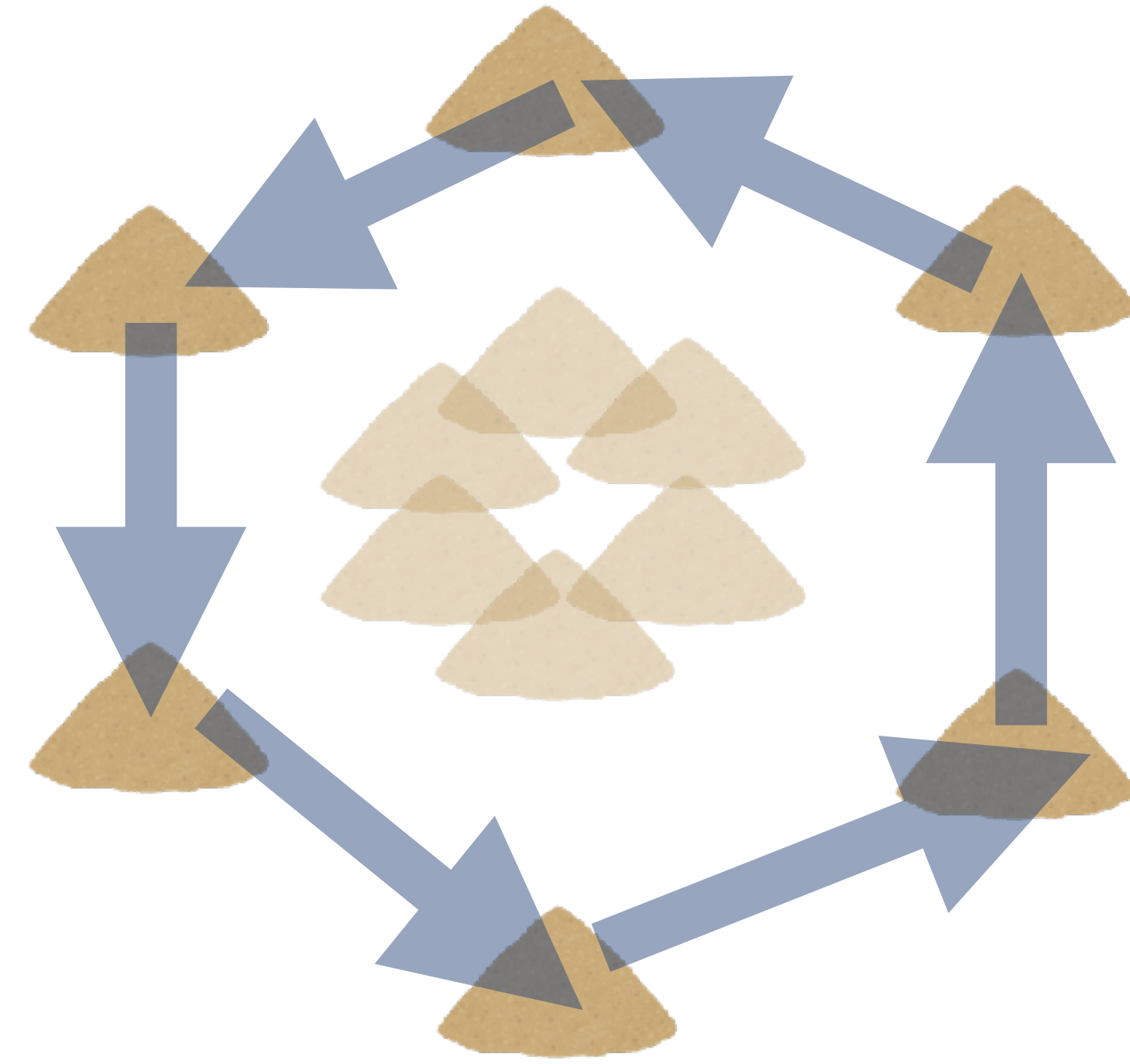
最適でない輸送



最適な輸送



非輸送

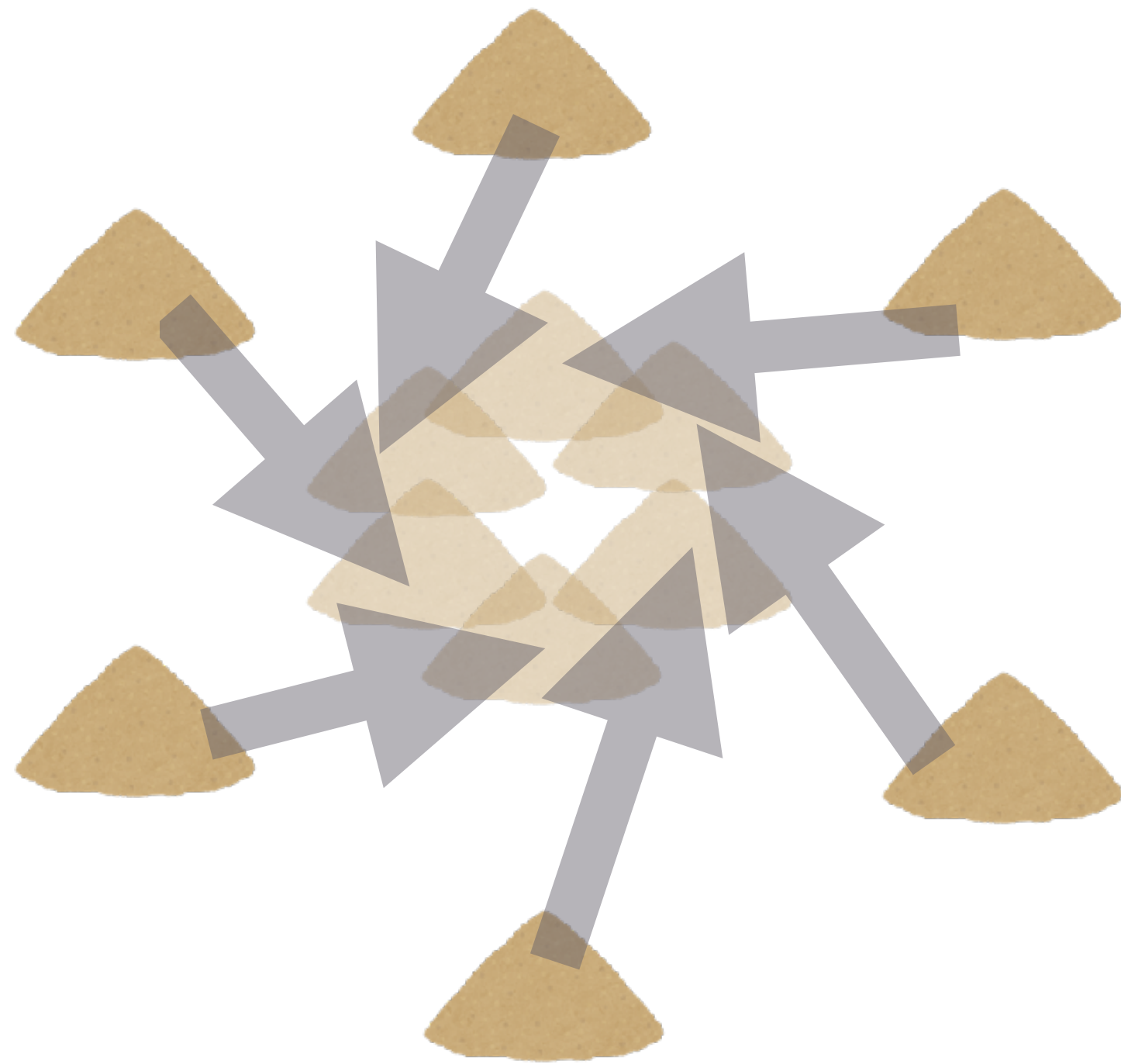


=

+

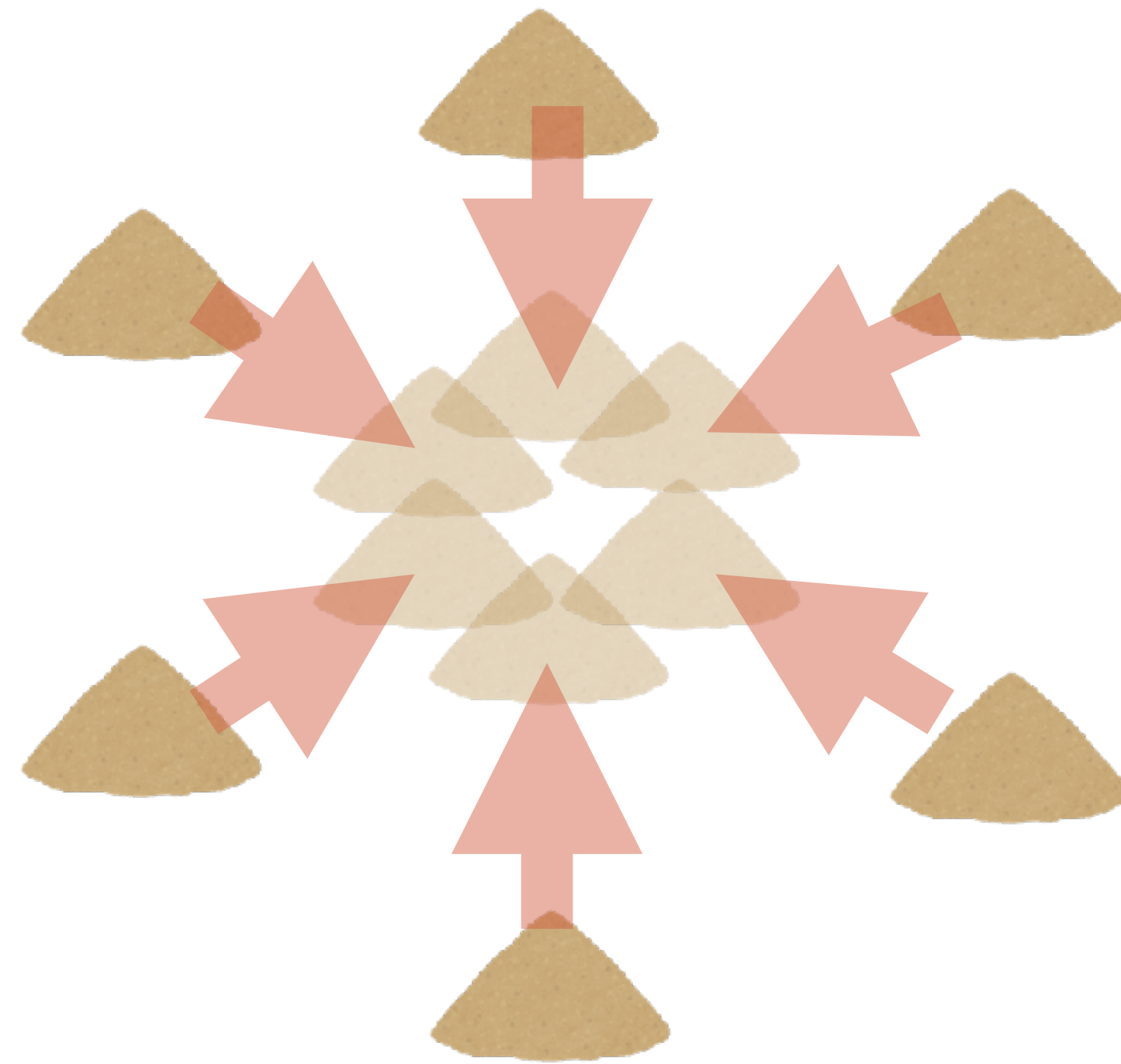
熱力学における「保存力」と「非保存力」

最適でない輸送



自然界のダイナミクス

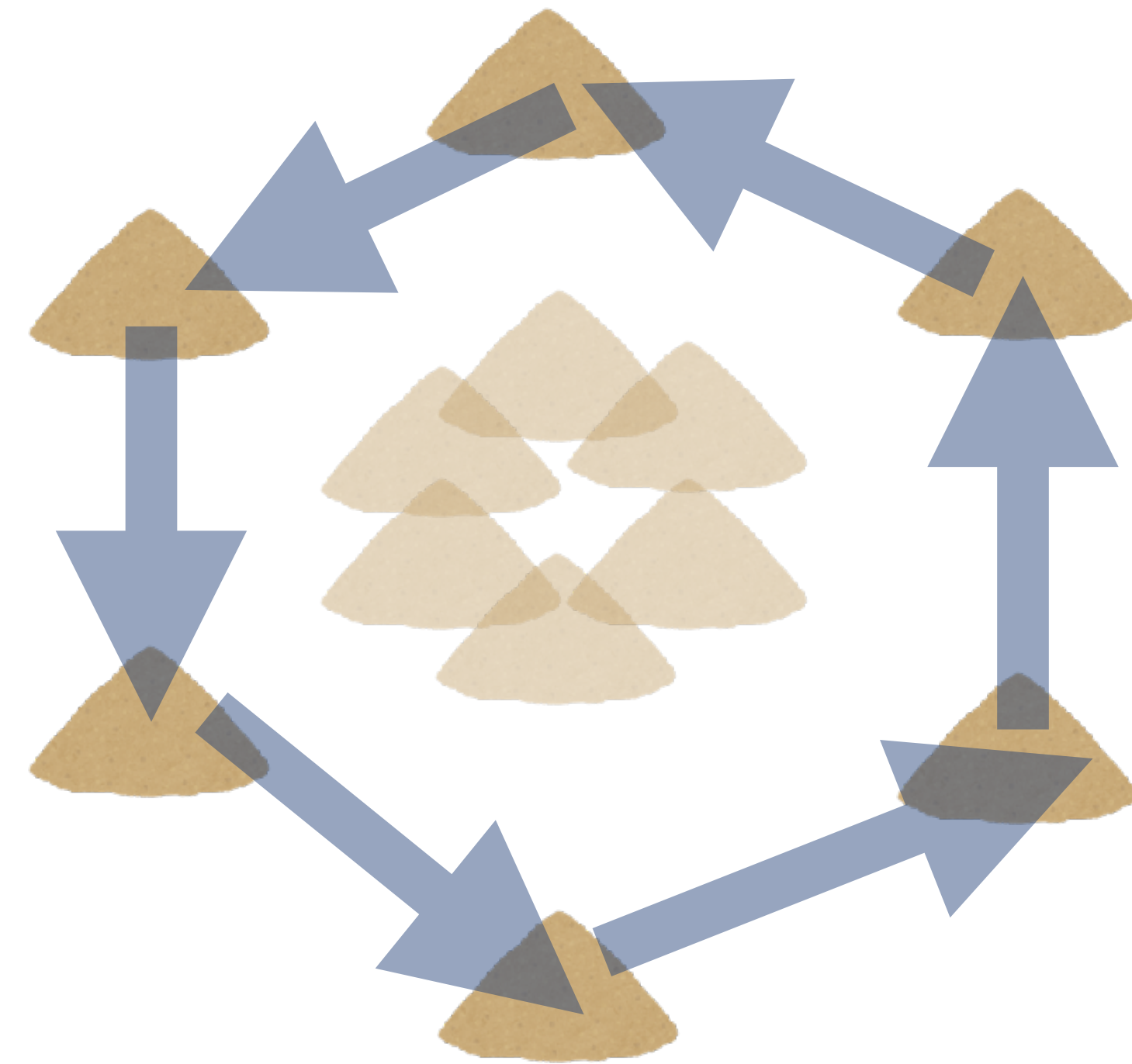
最適な輸送



「保存力」

ポテンシャルによる駆動
平衡への緩和, 詳細釣り合い条件,
変化に「必要」な散逸...etc.

非輸送



「非保存力」

サイクルの流れ
詳細釣り合い条件の破れ
変化に「不要」な散逸...etc.

最適輸送問題の定式化 - 連続の式の場合 ①

Benamou-Brenier公式

Benamou J.-D., and Brenier, Y.. *Numerische Mathematik* 84, 375-393 (2000).

2-Wasserstein距離

$$\mathcal{W}_2(p, q) = \sqrt{\inf_{(\mathbf{u}_t, P_t)_{0 \leq t \leq \tau}} \tau \int_0^\tau dt \int dx \|\mathbf{u}_t(\mathbf{x})\|^2 P_t(\mathbf{x})}$$

$$\text{s.t. } \partial_t P_t(\mathbf{x}) = -\nabla \cdot (\mathbf{u}_t(\mathbf{x}) P_t(\mathbf{x})), \quad P_0(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}), \quad P_\tau(\mathbf{x}) = q(\mathbf{x})$$

速度場の二乗の期待値を始状態の確率分布と終状態の確率分布を固定したもとで、可能なパスで最小化する問題

2-Wasserstein距離 $\mathcal{W}_2(p, q)$

分布間の離れ方を表現する距離 [距離の公理を満たす]

$$\mathcal{W}_2(p, q) \geq 0, \quad \mathcal{W}_2(p, q) = 0 \Leftrightarrow p = q \quad \mathcal{W}_2(p, q) = \mathcal{W}_2(q, p) \quad \mathcal{W}_2(p, q) \leq \mathcal{W}_2(p, q') + \mathcal{W}_2(q', q)$$

最適輸送問題の定式化 - 連続の式の場合 ②

Beckman問題 (もしくはBenamou-Brenier公式)

Evans, L. C., & Gangbo, W. American Mathematical Soc. (1999).

1-Wasserstein距離

$$\mathcal{W}_1(p, q) = \inf_{(J_t, P_t)_{0 \leq t \leq \tau}} \int_0^\tau dt \int dx ||J_t(\mathbf{x})||$$

$$\text{s.t. } \partial_t P_t(\mathbf{x}) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_t(\mathbf{x}) \quad P_0(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}), \quad P_\tau(\mathbf{x}) = q(\mathbf{x})$$

流速の積分を始状態の確率分布と終状態の確率分布を固定したもとの、可能なパスで最小化する問題

1-Wasserstein距離も2-Wasserstein距離と同様に距離の公理を満たす

p -ノルムの性質のようにHölderの不等式から、1-Wasserstein距離と2-Wasserstein距離の間には不等式関係が存在

$$\mathcal{W}_2(p, q) \geq \mathcal{W}_1(p, q)$$

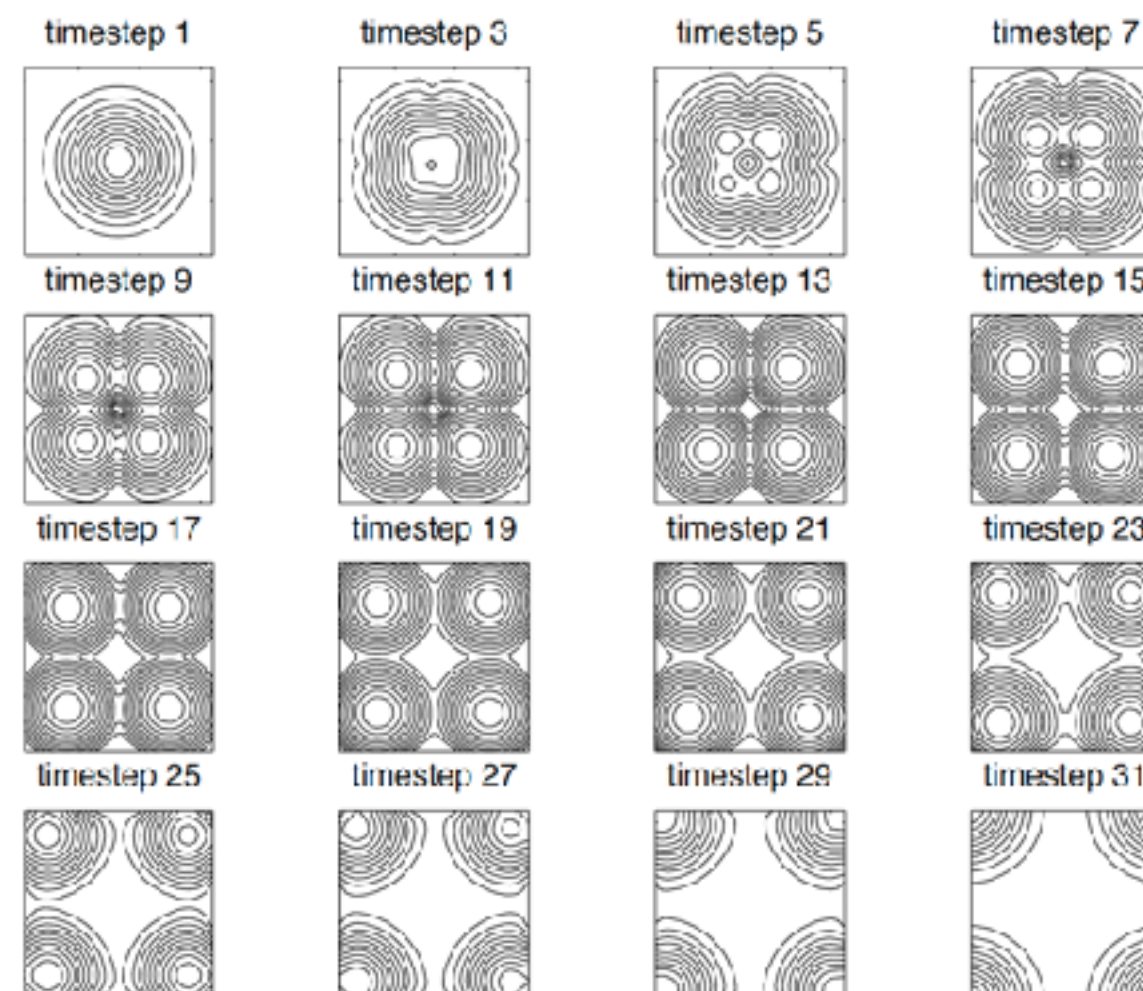
2-Wasserstein距離の変分問題

以下のLagrangianの変分問題を解く

Benamou J.-D., and Brenier, Y.. *Numerische Mathematik* 84, 375-393 (2000).

$$\mathcal{L}[\{P_t\}, \{\mathbf{u}_t\}, \{\psi_t\}] = \int_0^\tau dt \int dx \left[\frac{1}{2} \|\mathbf{u}_t(\mathbf{x})\|^2 P_t(\mathbf{x}) + \psi_t(\mathbf{x}) \{ \partial_t P_t(\mathbf{x}) + \nabla \cdot (\mathbf{u}_t(\mathbf{x}) P_t(\mathbf{x})) \} \right]$$

➡ $\mathcal{W}_2(p, q) = \sqrt{\tau \int_0^\tau dt \int dx \|\mathbf{u}_t^*(\mathbf{x})\|^2 P_t(\mathbf{x})}$



$$\mathbf{u}_t^*(\mathbf{x}) = \nabla \psi_t(\mathbf{x})$$

$$\partial_t \psi_t(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \|\nabla \psi_t(\mathbf{x})\|^2 = 0$$

渦のないEuler方程式相当

ポテンシャル勾配による速度場

最適輸送に基づくゆらぎの熱力学

Fokker-Planck方程式

$$\partial_t p_t(\mathbf{x}) = -\nabla \cdot (\mathbf{v}_t(\mathbf{x}) p_t(\mathbf{x}))$$

$$\mathbf{v}_t(\mathbf{x}) = \mu \mathbf{F}_t(\mathbf{x}) - \mu T \nabla \ln p_t(\mathbf{x})$$

エントロピー生成率

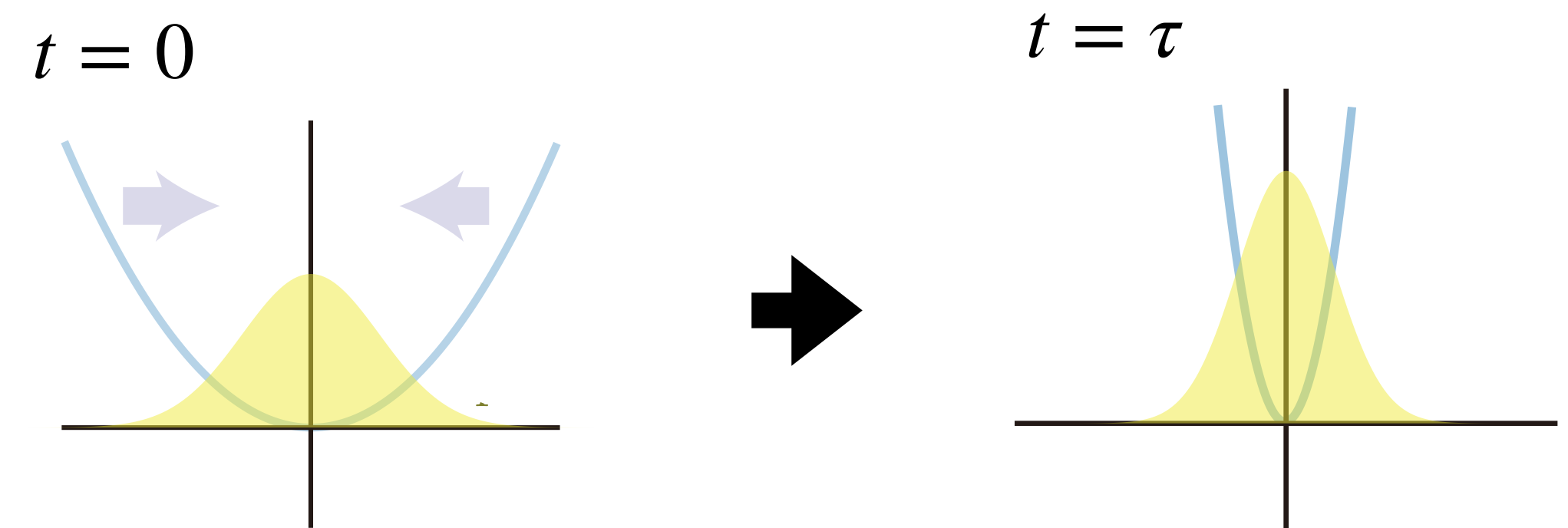
$$\sigma_t = \frac{1}{\mu T} \int d\mathbf{x} \|\mathbf{v}_t(\mathbf{x})\|^2 P_t(\mathbf{x})$$

エントロピー生成

$$\Sigma_t = \int_0^\tau dt \sigma_t$$

Brown運動による分布の輸送を最適輸送で取り扱う

Jordan, R., Kinderlehrer, D., & Otto, F. *SIAM journal on mathematical analysis*, 29(1), 1-17 (1998).



Benamou-Brenierの公式 \Rightarrow

最小エントロピー生成 (熱力学的速度限界)

Aurell, Erik, et al. *Journal of statistical physics* 147, 487-505 (2012).

$$\Sigma_\tau \geq \frac{\mathcal{W}_2(p_\tau, p_0)^2}{\mu T \tau} \left(\geq \frac{\mathcal{W}_1(p_\tau, p_0)^2}{\mu T \tau} \right)$$

状態間の変化速度と散逸のトレードオフ

最適輸送に基づく非保存力と保存力の分解

Nakazato, M., & Ito, S. *Physical Review Research* 3, 043093 (2021).

Dechant, A., Sasa, S. I., & Ito, S. *Physical Review Research* 4, L012034 (2022).

速度場の分解

$$\boldsymbol{\nu}_t(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\nu}_t^{\text{ex}}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\nu}_t^{\text{hk}}(\mathbf{x})$$

時間発展を再現する保存力による速度場

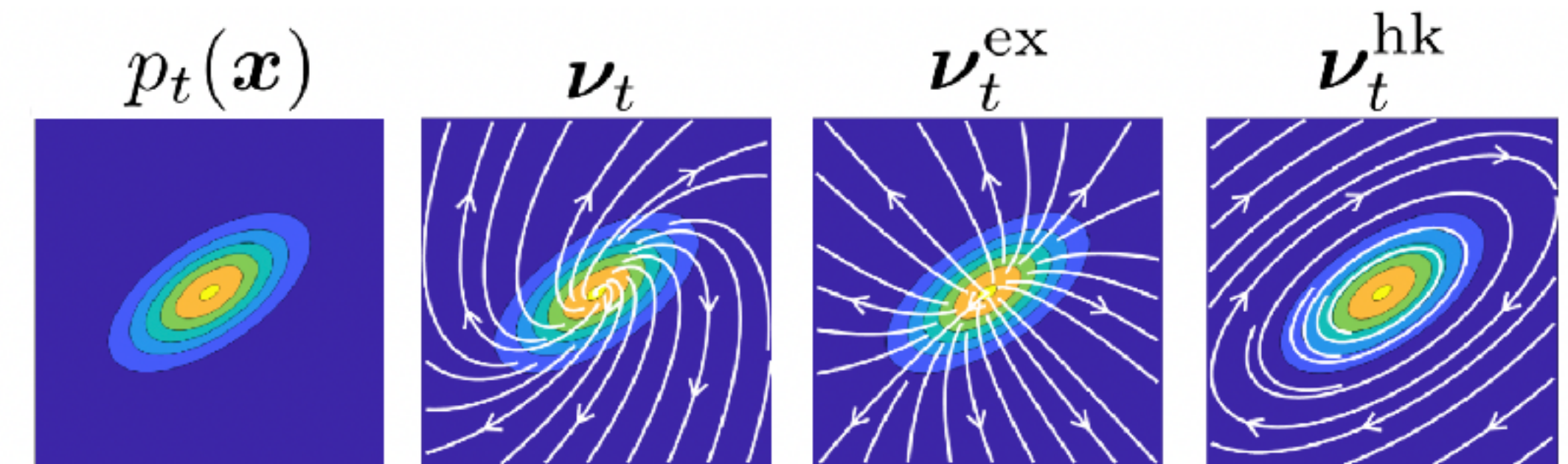
$$\partial_t p_t(\mathbf{x}) = -\nabla \cdot (\boldsymbol{\nu}_t(\mathbf{x}) p_t(\mathbf{x})) = -\nabla \cdot (\boldsymbol{\nu}_t^{\text{ex}}(\mathbf{x}) p_t(\mathbf{x}))$$

$$\boldsymbol{\nu}_t^{\text{ex}}(\mathbf{x}) = \nabla \phi_t(\mathbf{x})$$

時間発展を与えない非保存力による循環する流れを与える速度場

$$0 = -\nabla \cdot (\boldsymbol{\nu}_t^{\text{hk}}(\mathbf{x}) p_t(\mathbf{x}))$$

二つの速度場は期待値で定義される内積の意味で直交



$$\int d\mathbf{x} (\boldsymbol{\nu}_t^{\text{ex}}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\nu}_t^{\text{hk}}(\mathbf{x})) p_t(\mathbf{x}) = 0$$

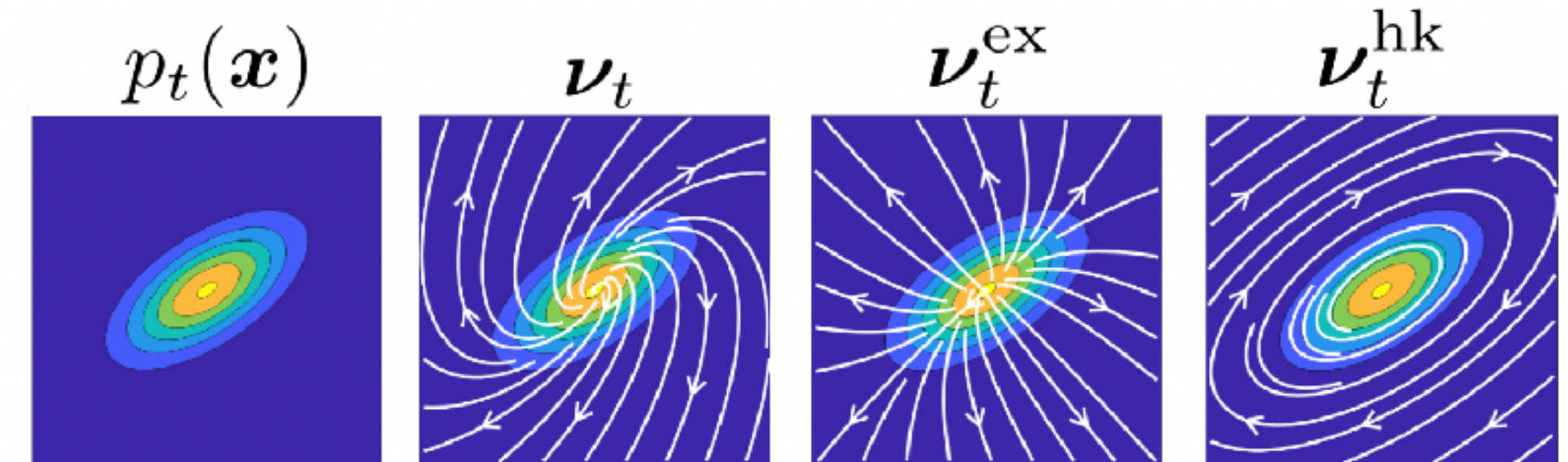
最適輸送に基づくエントロピー生成率の分解

Nakazato, M., & Ito, S. *Physical Review Research* 3, 043093 (2021).

Dechant, A., Sasa, S. I., & Ito, S. *Physical Review Research* 4, L012034 (2022).

直交性 $\int d\mathbf{x} (\boldsymbol{\nu}_t^{\text{ex}}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\nu}_t^{\text{hk}}(\mathbf{x})) p_t(\mathbf{x}) = 0$ より

$$\sigma_t = \sigma_t^{\text{ex}} + \sigma_t^{\text{hk}}$$



$$\sigma_t^{\text{ex}} := \frac{1}{\mu T} \int d\mathbf{x} \|\boldsymbol{\nu}_t^{\text{ex}}(\mathbf{x})\|^2 p_t(\mathbf{x}) \quad (\geq 0) \quad \text{時間変化に起因する散逸}$$

$$\sigma_t^{\text{hk}} := \frac{1}{\mu T} \int d\mathbf{x} \|\boldsymbol{\nu}_t^{\text{hk}}(\mathbf{x})\|^2 p_t(\mathbf{x}) \quad (\geq 0) \quad \text{時間変化を引き起こさないサイクルによる散逸}$$

[Fokker-Planck方程式ではC. Maes and K. Netočný. *J. Stat. Phys.* 154, 188 (2014). と一致]

σ_t^{ex} は最適輸送の視点では, 2-Wasserstein距離で定義される速さの二乗に相当.

$$\sigma_t^{\text{ex}} := \frac{1}{\mu T} v_2^2(t) \quad v_2(t) := \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathcal{W}_2(P_t, P_{t+\Delta t})}{\Delta t}$$

有限時間で最小エントロピー生成を達成する 最適なプロトコルと測地線

Nakazato, M., & Ito, S. *Physical Review Research* 3, 043093 (2021).

$$\Sigma_\tau^{\text{ex}} = \int_0^\tau dt \sigma_t^{\text{ex}}: \text{過剰エントロピー生成}$$

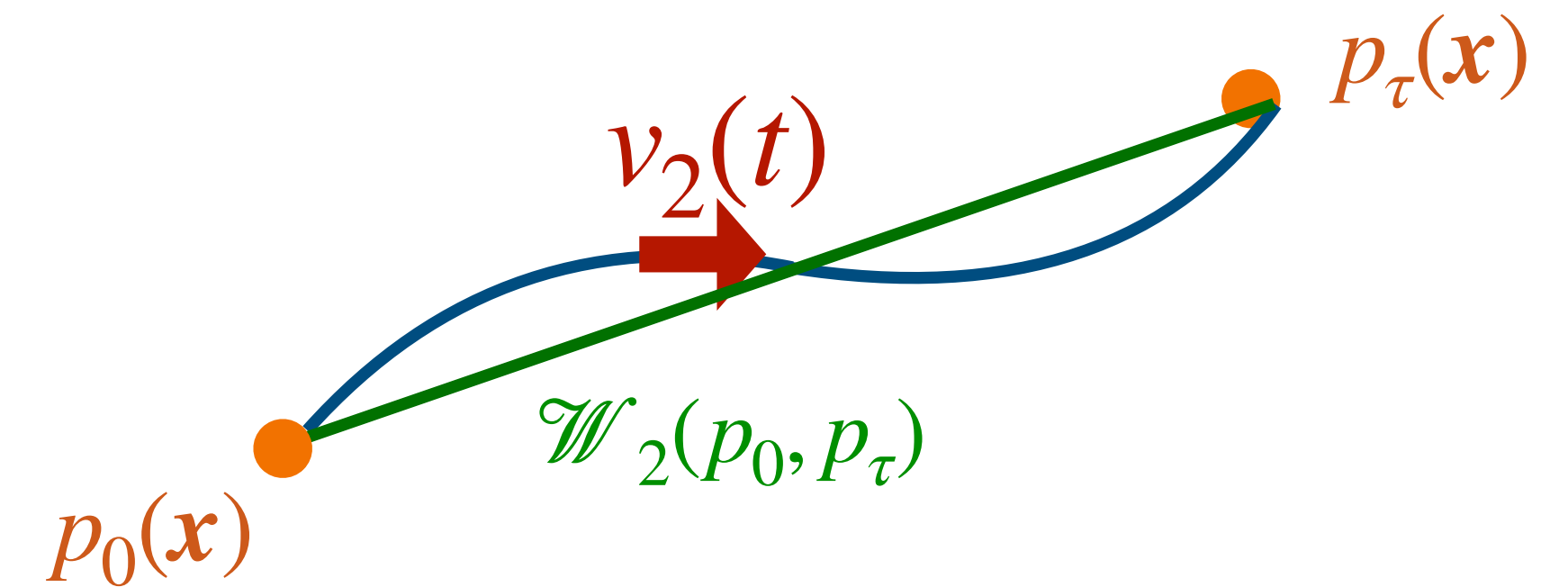
最小エントロピー生成に関する不等式

$$\Sigma_\tau \left(\geq \Sigma_\tau^{\text{ex}} \geq \frac{[\int_0^\tau dt v_2(t)]^2}{\mu T \tau} \right) \geq \frac{\mathcal{W}_2(p_\tau, p_0)^2}{\mu T \tau}$$

最小エントロピー生成 $\Sigma_\tau = \frac{\mathcal{W}_2(p_\tau, p_0)^2}{\mu T \tau}$ を達成するには

$$\sigma_t^{\text{hk}} = 0 \quad (\text{非保存力が常に存在しない})$$

$$v_2(t) = \frac{\mathcal{W}_2(p_0, p_\tau)}{\tau} = \text{const.} \quad (\text{確率分布の時間発展が, 2-Wasserstein距離の測地線上を移動している})$$



観測量の速さとの関係

次の不等式が成り立つ

$$v_2(t) \geq v_R(t)$$

$R(x)$: 時間に依存しない観測量

$$v_R(t) = \frac{|\partial_t \langle R \rangle_{p_t}|}{\sqrt{\langle \|\nabla R\|^2 \rangle_{p_t}}} \quad \text{: 観測量 } R \text{ の時間変化の速さ (空間変動で規格化)}$$

$$\langle R \rangle_{p_t} = \int dx R(x) p_t(x) \quad \langle \|\nabla R\|^2 \rangle_{p_t} = \int dx \|\nabla R\|^2 p_t(x)$$

熱力学的不確定性関係(TUR)

$$\sigma_t \geq \sigma_t^{\text{ex}} \geq \frac{1}{\mu T} v_R^2(t)$$

Dechant, A., Sasa, S. I., & Ito, S. *Physical Review E* 106, 024125 (2022).

任意の観測量 R の時間変化の速さは散逸で制限される

様々な系への拡張 1-Markov jump系

マスター方程式:

$$\partial_t \mathbf{p} = \mathbf{B}\mathbf{J} = \mathbf{B}\mathbf{L}\mathbf{F}$$

流れ: $J_e = W_{x'x}^{(\nu)} p_x - W_{xx'}^{(\nu)} p_{x'}$

熱力学力: $F_e = \ln \frac{W_{x'x}^{(\nu)} p_x}{W_{xx'}^{(\nu)} p_{x'}}$

遷移を表すエッジ $e = (x \rightarrow x', \nu)$ [状態: x, x' 浴: ν]

接続行列: $B_{ye} = \delta_{yx'} - \delta_{yx}$

オンサーガ係数行列: $L_{ee'} = \frac{J_e}{F_e} \delta_{ee'}$

Fokker-Planck方程式とは $\mathbf{L}\mathbf{F} \leftrightarrow p_t \nu_t$, $\mathbf{B} \leftrightarrow -\nabla \cdot$, $\mathbf{B}^\top \leftrightarrow \nabla$ に対応.

Yoshimura, K., Kolchinsky, A., Dechant, A., & Ito, S. *Physical Review Research* 5, 013017 (2023).

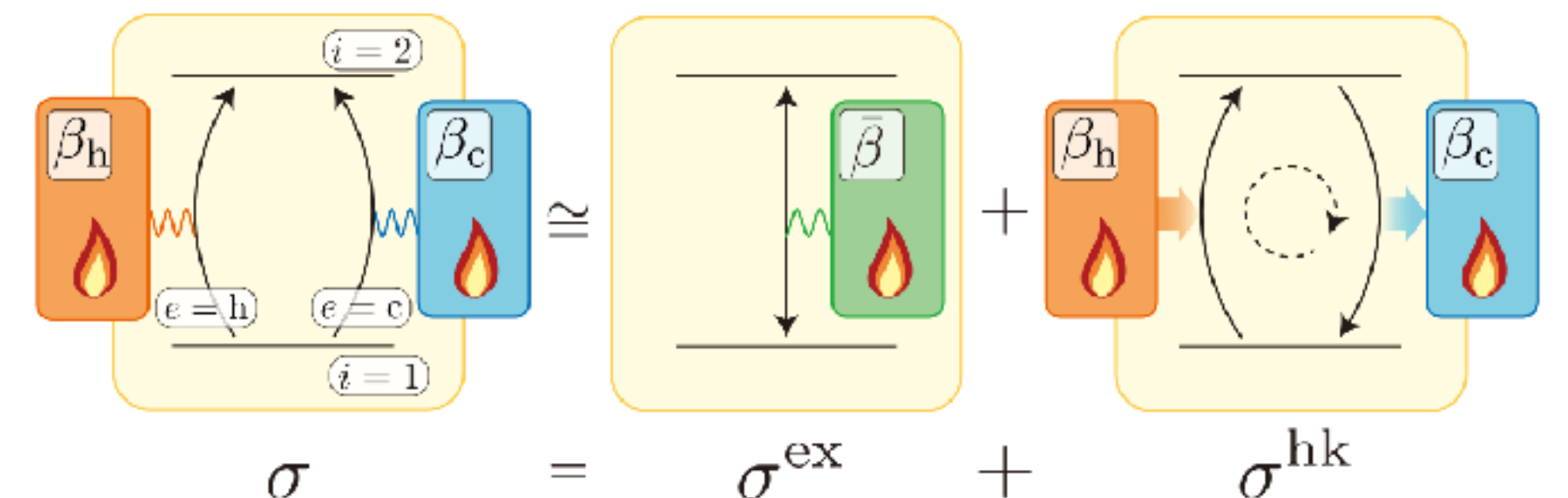
Markov jump系での最適輸送問題[Maas, 2011]を介して

Markov jump系におけるゆらぎの熱力学での対応物を構成可能

内積: $\langle \mathbf{F}, \mathbf{F}' \rangle = \mathbf{F}^\top \mathbf{L} \mathbf{F}'$

$$\sigma_t = \langle \mathbf{F}, \mathbf{F} \rangle = \frac{\langle \mathbf{B}^\top \boldsymbol{\phi}, \mathbf{B}^\top \boldsymbol{\phi} \rangle}{\sigma_t^{\text{ex}}} + \frac{\langle \mathbf{F} - \mathbf{B}^\top \boldsymbol{\phi}, \mathbf{F} - \mathbf{B}^\top \boldsymbol{\phi} \rangle}{\sigma_t^{\text{hk}}}$$

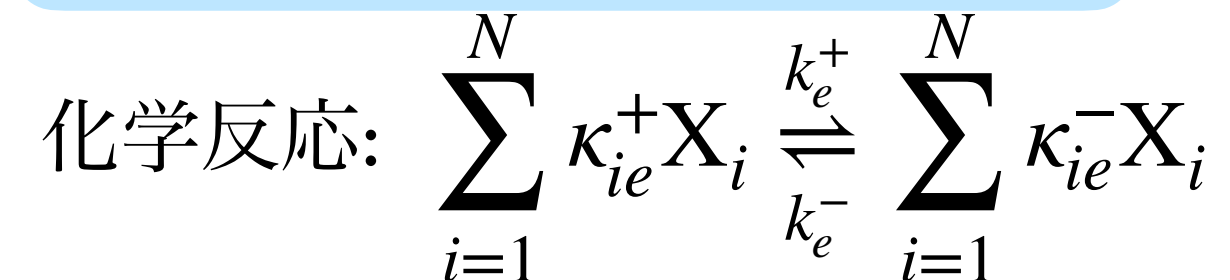
$$\mathbf{B}\mathbf{L}(\mathbf{F} - \mathbf{B}^\top \boldsymbol{\phi}) = \mathbf{0}$$



様々な系への拡張 2- 決定論的な化学反応ダイナミクス

レート方程式:

$$\partial_t \mathbf{c} = \mathbf{S} \mathbf{J} = \mathbf{S} \mathbf{L} \mathbf{F}$$



流れ: $J_e = k_e^+ \prod_i (c_i)^{\kappa_{ie}^+} - k_e^- \prod_i (c_i)^{\kappa_{ie}^-}$

熱力学力: $F_e = \ln \frac{k_e^+ \prod_i (c_i)^{\kappa_{ie}^+}}{k_e^- \prod_i (c_i)^{\kappa_{ie}^-}}$

化学量論係数行列: $S_{ie} = \kappa_{ie}^- - \kappa_{ie}^+$

オンサーガ係数行列: $L_{ee'} = \frac{J_e}{F_e} \delta_{ee'}$

Fokker-Planck方程式とは $\mathbf{L} \mathbf{F} \leftrightarrow p_t \nu_t$, $\mathbf{S} \leftrightarrow -\nabla \cdot$, $\mathbf{S}^\top \leftrightarrow \nabla$ に対応.

Yoshimura, K., Kolchinsky, A., Dechant, A., & Ito, S. *Physical Review Research* 5, 013017 (2023).

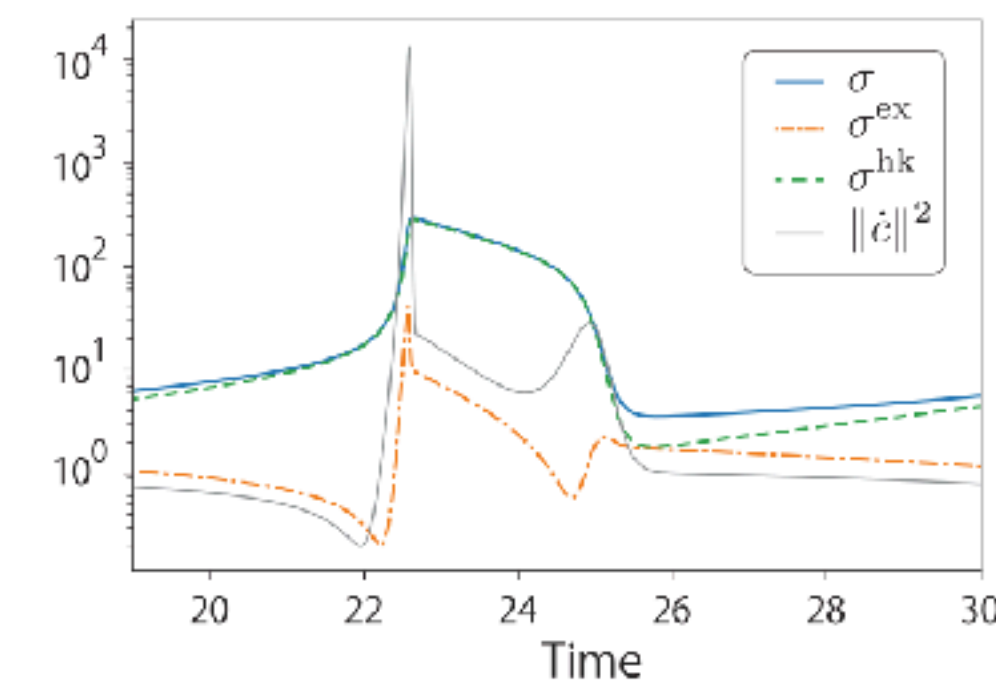
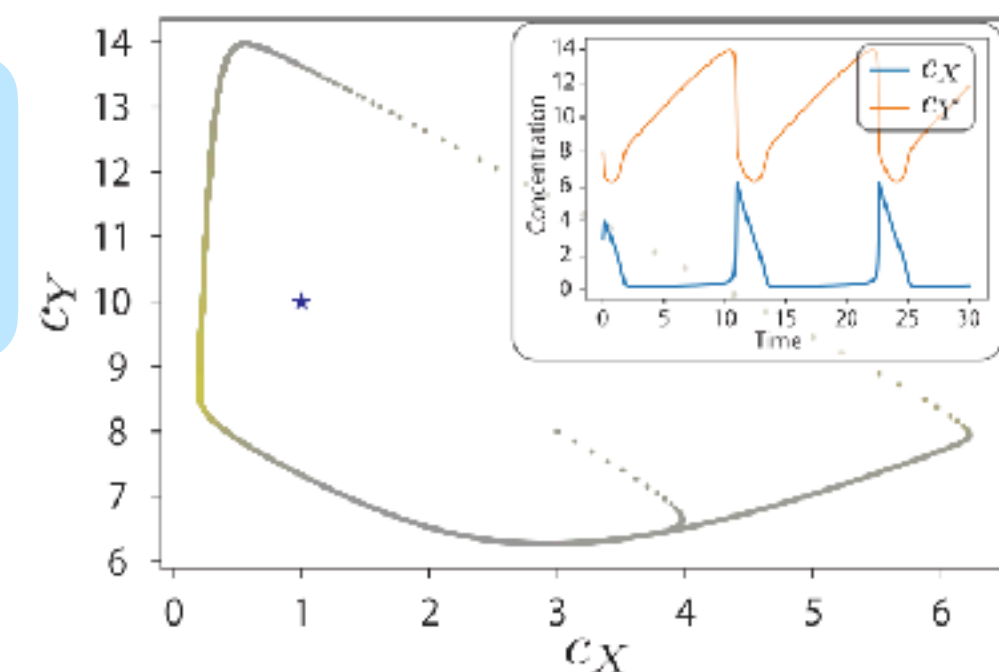
Markov jump系における最適輸送問題[Maas, 2011]を一般化

決定論的な化学熱力学での対応物を構成

内積: $\langle \mathbf{F}, \mathbf{F}' \rangle = \mathbf{F}^\top \mathbf{L} \mathbf{F}'$

$$\sigma_t = \langle \mathbf{F}, \mathbf{F} \rangle = \frac{\langle \mathbf{S}^\top \boldsymbol{\phi}, \mathbf{S}^\top \boldsymbol{\phi} \rangle}{\sigma_t^{\text{ex}}} + \frac{\langle \mathbf{F} - \mathbf{S}^\top \boldsymbol{\phi}, \mathbf{F} - \mathbf{S}^\top \boldsymbol{\phi} \rangle}{\sigma_t^{\text{hk}}}$$

$\mathbf{S} \mathbf{L} (\mathbf{F} - \mathbf{S}^\top \boldsymbol{\phi}) = \mathbf{0}$



振動反応系

様々な系への拡張 3- 決定論的なパターンダイナミクス

反応拡散方程式:

$$\partial_t \vec{c} = \underbrace{-\nabla_r \cdot \vec{J}}_{\text{拡散項}} + \underbrace{Sj}_{\text{反応項}} = \nabla^\dagger \mathcal{L} \mathcal{F}$$

拡散の流れ: \vec{J}

反応の流れ: j

拡散と反応による熱力学力: $\mathcal{F} = (\vec{F}, f)$

オンサーガー演算子: $\mathcal{L} \quad \mathcal{L} \mathcal{F} = \mathcal{J} = (\vec{J}, j)$

Fokker-Planck方程式とは $\mathcal{L} \mathcal{F} \leftrightarrow p_t \nu_t, \nabla^\dagger \leftrightarrow -\nabla \cdot$ に対応.

Nagayama, R., Yoshimura, K., Kolchinsky, A., & Ito, S. *arXiv:2311.16569*.

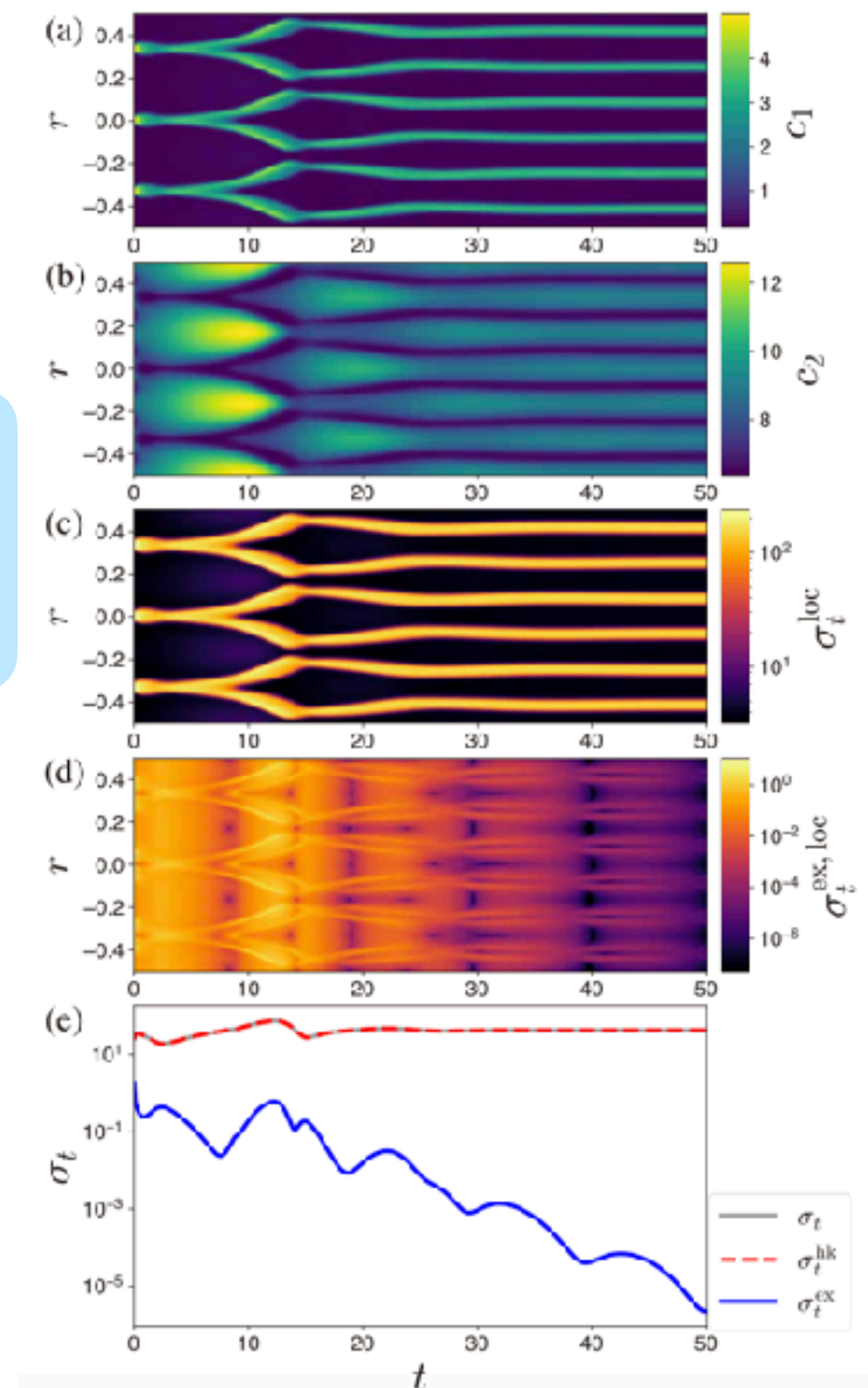
反応拡散系における最適輸送問題[Mielke, 2011]を大きく拡張

反応拡散系の熱力学での対応物を構成

$$\text{内積: } \langle \mathcal{F}, \mathcal{F}' \rangle = \int dr [\vec{F}'^\top \mathcal{L} \vec{F} + f'^\top \mathcal{L} f]$$

$$\sigma_t = \langle \mathcal{F}, \mathcal{F} \rangle = \underbrace{\langle \nabla \bar{\phi}, \nabla \bar{\phi} \rangle}_{\sigma_t^{\text{ex}}} + \underbrace{\langle \mathcal{F} - \nabla \bar{\phi}, \mathcal{F} - \nabla \bar{\phi} \rangle}_{\sigma_t^{\text{hk}}}$$

$$\nabla^\dagger \mathcal{L} (\mathcal{F} - \nabla \bar{\phi}) = 0$$



様々な系への拡張 4- 決定論的な流体ダイナミクス

Navier-Stokes方程式:

$$\rho D_t \mathbf{u} = \rho \partial_t \mathbf{u} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}}$$

応力テンソル: $\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = -p\mathbf{I} - \mathbf{J}^{\text{irr}}(\mathbf{F})$

構成方程式: $\mathbf{J}^{\text{irr}}(\mathbf{F}) = -\lambda \text{tr}(\nabla^s \mathbf{u})\mathbf{I} - 2\mu \nabla^s \mathbf{u}$

熱力学力: $\mathbf{F} = -\nabla^s \mathbf{u} = -\frac{\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^\top}{2}$

Yoshimura, K., & Ito, S. *arXiv preprint arXiv:2305.19519*.

最適輸送理論の視点から離れて,

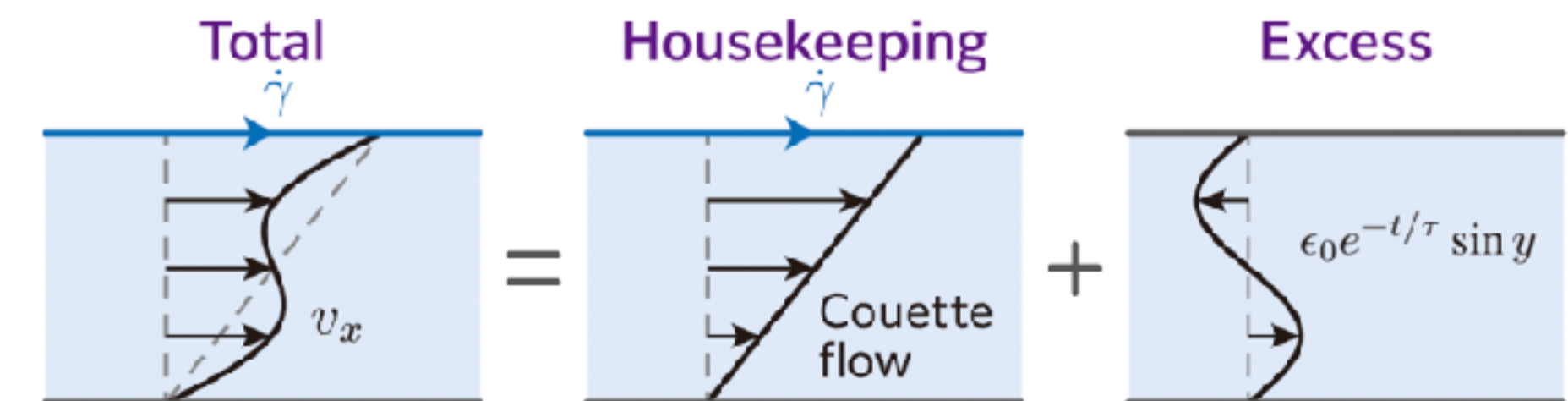
流体の熱力学において同様の数理構造を発見

内積: $\langle \mathbf{F}, \mathbf{F}' \rangle = \text{tr}[\mathbf{F}^\top \mathbf{J}^{\text{irr}}(\mathbf{F}')]$

$$\sigma_t = \langle \mathbf{F}, \mathbf{F} \rangle = \underbrace{\langle \mathbf{F}', \mathbf{F}' \rangle}_{\sigma_t^{\text{ex}}} + \underbrace{\langle \mathbf{F} - \mathbf{F}', \mathbf{F} - \mathbf{F}' \rangle}_{\sigma_t^{\text{hk}}}$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{J}^{\text{irr}}(\mathbf{F}) - \mathbf{J}^{\text{irr}}(\mathbf{F}')) = \mathbf{0}$$

underdampedなFokker-Planck方程式との対応関係あり

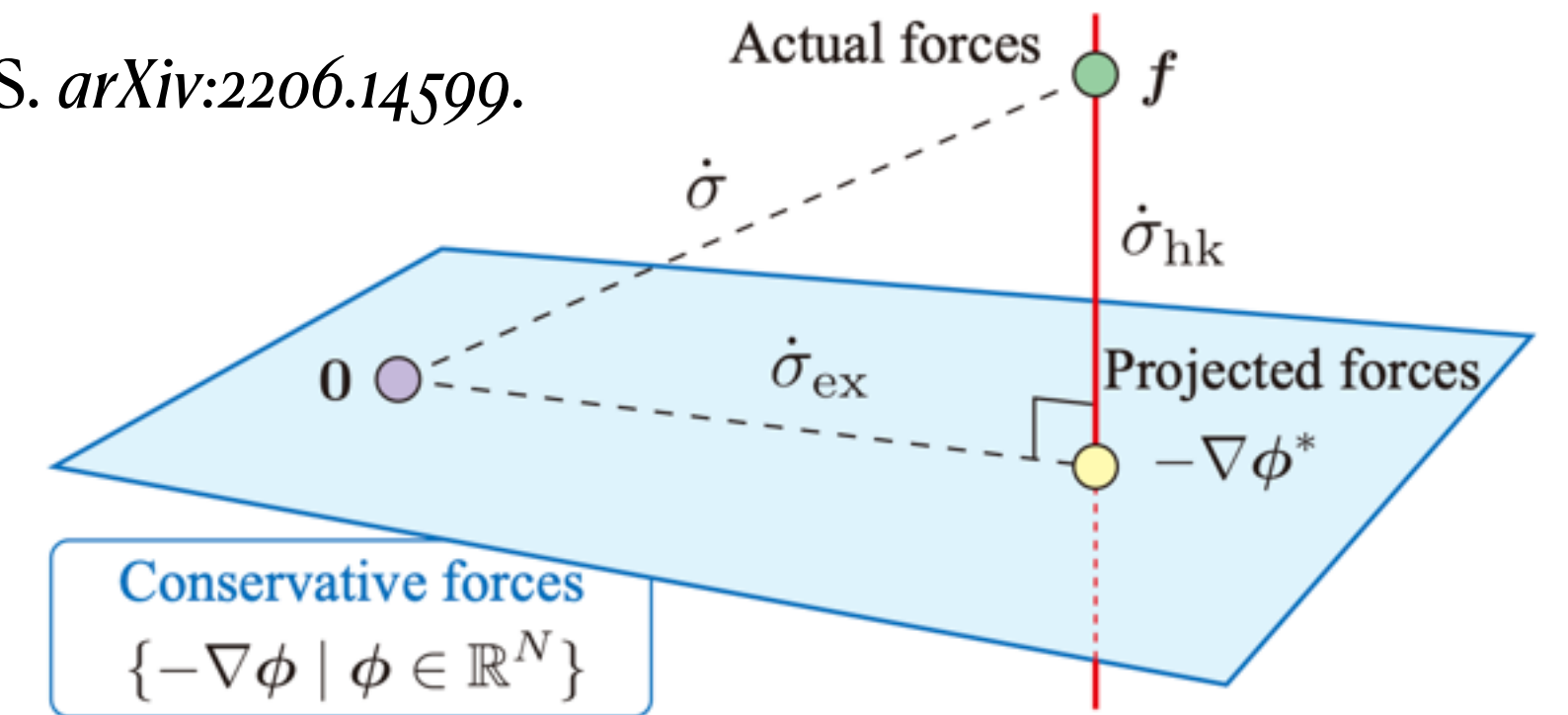


情報幾何/情報熱力学との関わり

情報幾何との対応関係

Kolchinsky, A., Dechant, A., Yoshimura, K., & Ito, S. *arXiv:2206.14599*.

Ito, S. *Information Geometry* 7, 441-483 (2024).



2-Wasserstein距離と異なりうる情報幾何の空間での取り扱い

情報熱力学(部分系の熱力学/Maxwellのデーモン)との対応関係

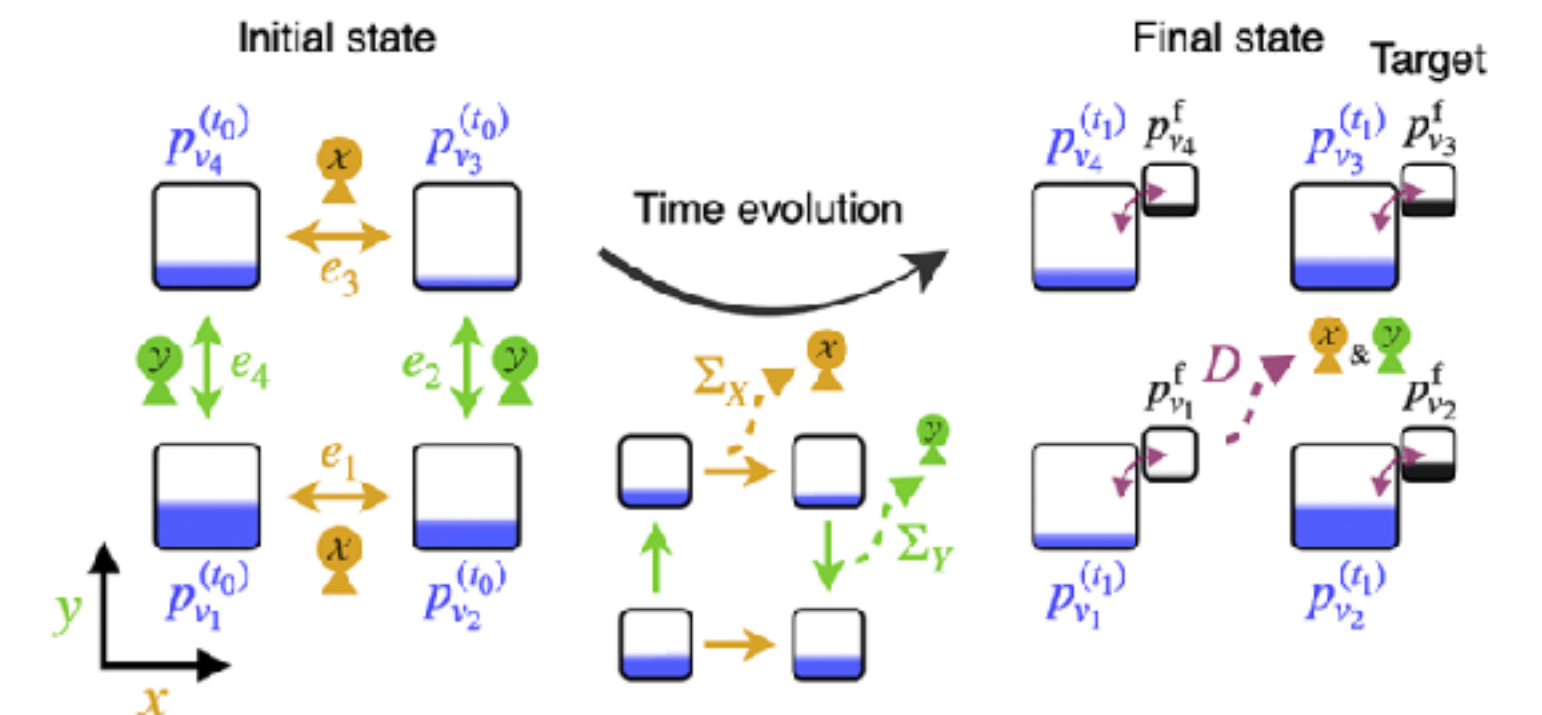
Nakazato, M., & Ito, S. *Physical Review Research* 3, 043093 (2021).

Fujimoto, Y., & Ito, S. *Physical Review Research* 6, 013023 (2024).

部分系における最小散逸の問題への応用

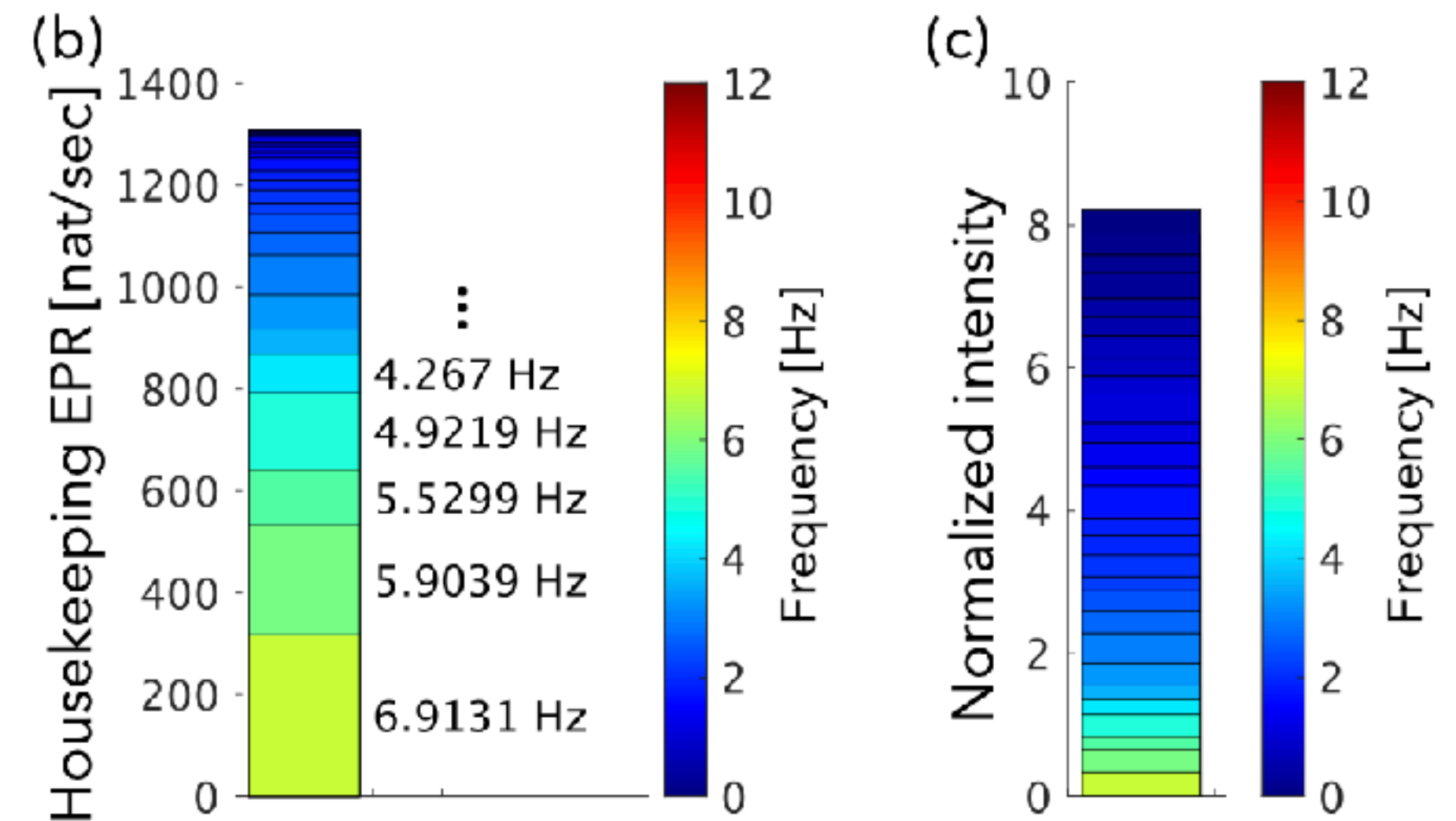
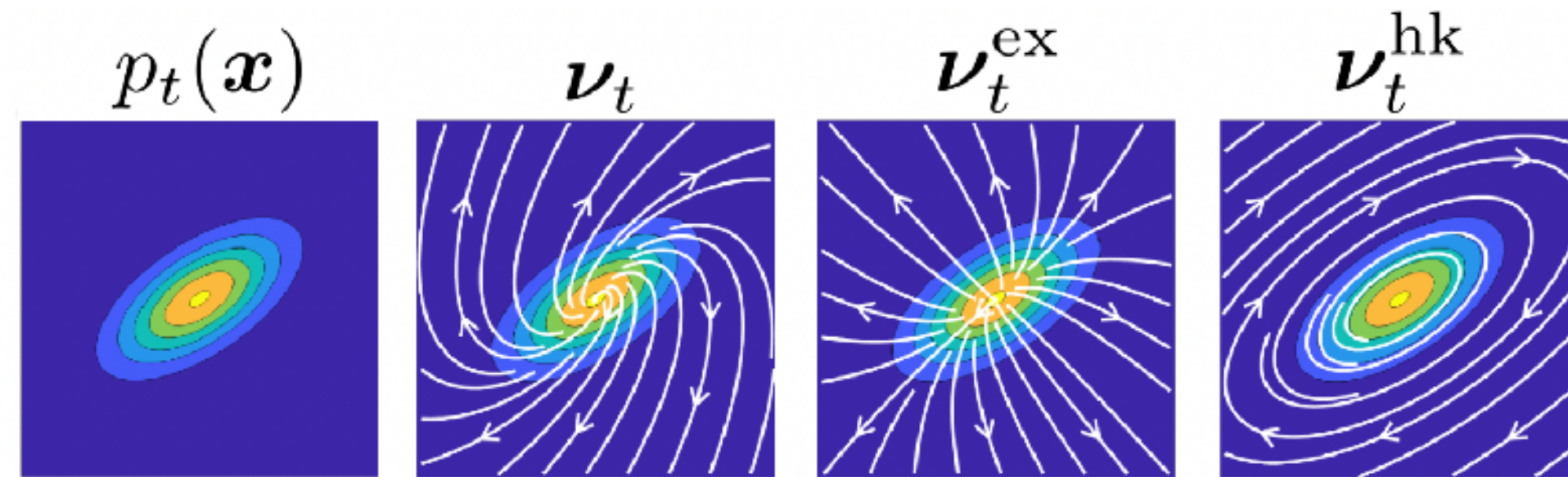
2-Wasserstein距離を用いた情報熱力学第二法則の精密化

$$\sigma^X \geq \dot{I}^X \quad \longrightarrow \quad \sigma^X \geq \dot{I}^X + \frac{1}{\mu T} v_2^2$$

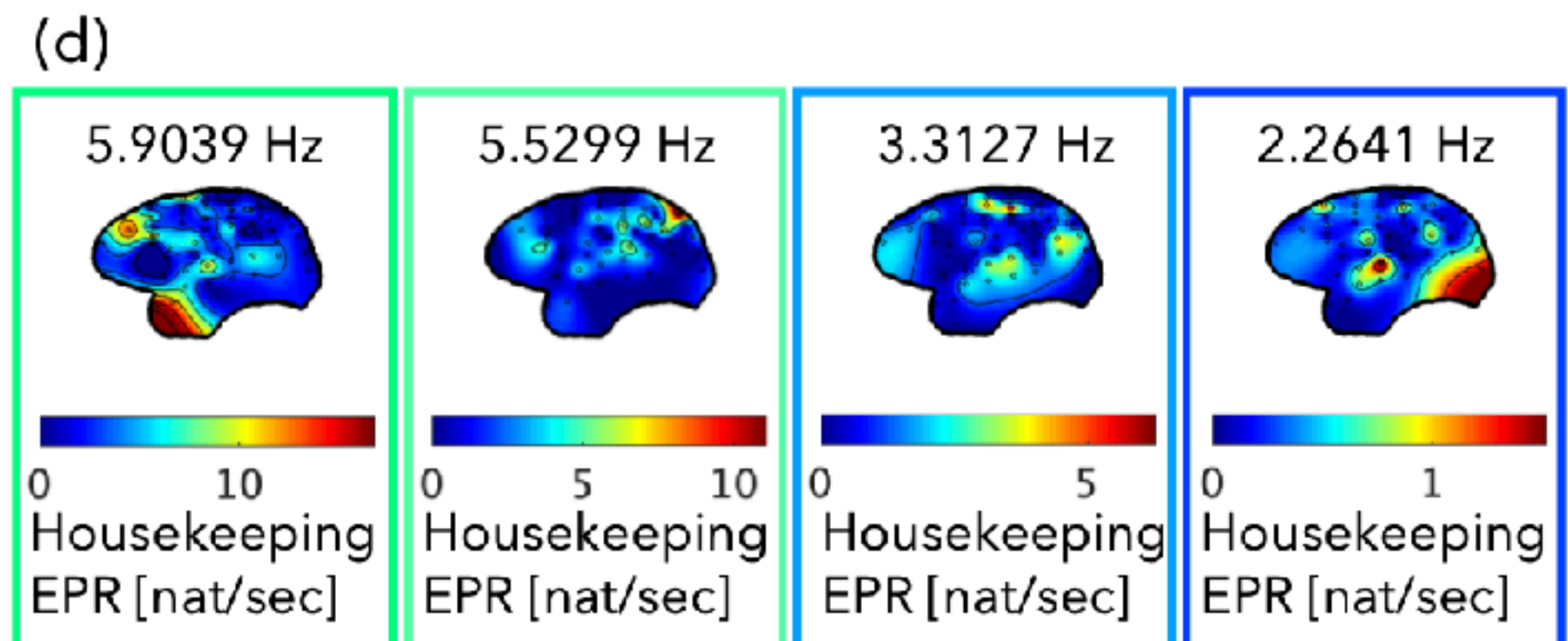


最近の研究の紹介

Sekizawa, D., Ito, S., & Oizumi, M. *arXiv:2312.03489*.



猿の脳における散逸(維持エントロピー生成率)のモード分解による解析



具体例: ガウス分布に限定した場合

Fokker-Planck方程式

Sekizawa, D., Ito, S., & Oizumi, M. *arXiv:2312.03489*.

$$\partial_t P_t(\mathbf{x}) = -\nabla \cdot (\mathbf{D}_t \mathbf{f}_t(\mathbf{x}) P_t(\mathbf{x}) - \mathbf{D}_t \nabla P_t(\mathbf{x})) \quad \mathbf{f}_t = \mathbf{A}_t \mathbf{x} + \mathbf{b}_t$$

外力が線形かつ初期分布がガウス分布であることを仮定

$$\partial_t \mathbf{m}_t = \mathbf{D}_t \mathbf{A}_t \mathbf{m}_t + \mathbf{D}_t \mathbf{b}_t$$

$$\partial_t \mathbf{V}_t = \mathbf{D}_t \mathbf{A}_t \mathbf{V}_t + \mathbf{V}_t (\mathbf{D}_t \mathbf{A}_t)^\top + 2\mathbf{D}_t$$

\mathbf{m}_t : 平均のベクトル

\mathbf{V}_t : 共分散行列

エントロピー生成率

$$\sigma_t = \langle \mathbf{A}_t \mathbf{m}_t + \mathbf{b}_t, \mathbf{A}_t \mathbf{m}_t + \mathbf{b}_t \rangle + \langle (\mathbf{A}_t + \mathbf{V}_t^{-1}) \sqrt{\mathbf{V}_t}, (\mathbf{A}_t + \mathbf{V}_t^{-1}) \sqrt{\mathbf{V}_t} \rangle_{\text{HS}}$$

内積: $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \mathbf{x}^\top \mathbf{D}_t \mathbf{y}$, $\langle \mathbf{X}, \mathbf{Y} \rangle_{\text{HS}} = \text{tr}[\mathbf{X}^* \mathbf{D}_t \mathbf{Y}]$

具体例: エントロピー生成率の分解

Sekizawa, D., Ito, S., & Oizumi, M. *arXiv:2312.03489*.

力 $f_t = A_t x + b_t$ の分解

$$A = A^{\text{ex}} + A^{\text{hk}}$$

$$b = b^{\text{ex}} + b^{\text{hk}}$$

$$\partial_t m_t = D_t A_t m_t + D_t b_t = D_t A_t^{\text{ex}} m_t + D_t b_t^{\text{ex}}$$

$$\partial_t V_t = D_t A_t V_t + V_t (D_t A_t)^{\top} + 2D_t = D_t A_t^{\text{ex}} V_t + V_t (D_t A_t^{\text{ex}})^{\top} + 2D_t$$

$$(A^{\text{ex}})^{\top} = A^{\text{ex}}$$

過剰エントロピー生成率と維持エントロピー生成率の分解

$$\sigma_t^{\text{ex}} = \langle A_t^{\text{ex}} m_t + b_t^{\text{ex}}, A_t^{\text{ex}} m_t + b_t^{\text{ex}} \rangle + \langle (A_t^{\text{ex}} + V_t^{-1}) \sqrt{V_t}, (A_t^{\text{ex}} + V_t^{-1}) \sqrt{V_t} \rangle_{\text{HS}}$$

$$\sigma_t^{\text{hk}} = \langle A_t^{\text{hk}} \sqrt{V_t}, A_t^{\text{hk}} \sqrt{V_t} \rangle_{\text{HS}}$$

維持エントロピー生成率のモード分解

Sekizawa, D., Ito, S., & Oizumi, M. *arXiv:2312.03489*.

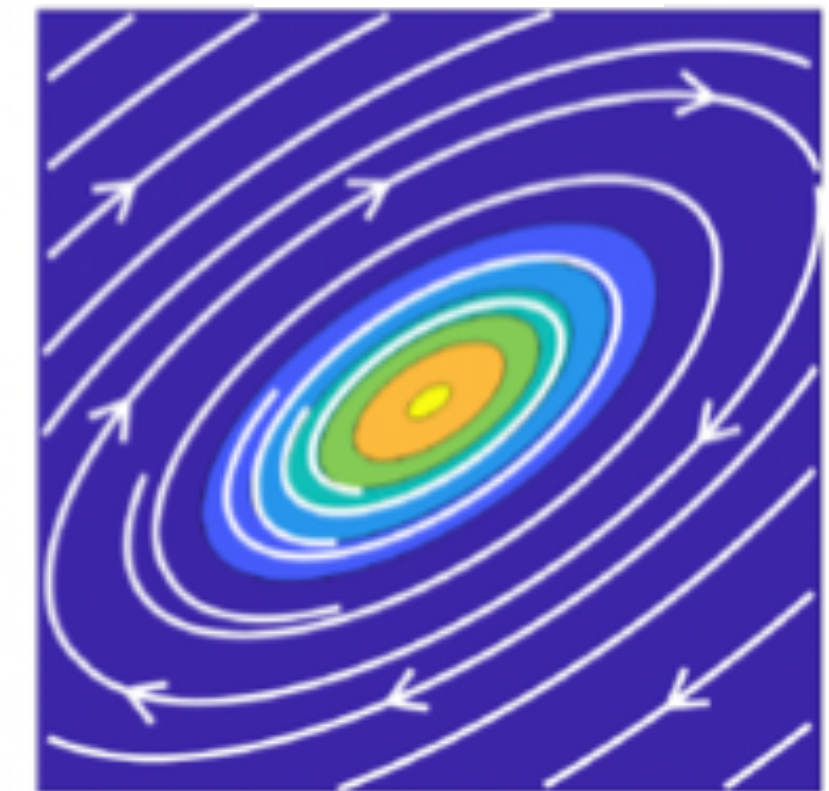
維持エントロピー生成率のモード分解

$$\sigma_t^{\text{hk}} = \sum_k |\lambda_k|^2 \langle D_t^{-1} P_k \sqrt{V}, D_t^{-1} P_k \sqrt{V} \rangle_{\text{HS}}$$

スペクトル分解: $D_t A_t^{\text{hk}} = \sum_k \lambda_k P_k$ $\nu_t^{\text{hk}}(\mathbf{x}) = D_t A_t^{\text{hk}}[\mathbf{x} - \mathbf{m}_t]$

固有値: λ_k [常に純虚数になる]

射影行列: P_k 振動数: $\chi_k = \frac{|\lambda_k|}{2\pi}$



振動モード

特にDが対角行列かつDA^{hk}の固有値が縮退していない場合

$$\sigma_t^{\text{hk}} = (2\pi)^2 \sum_k \underbrace{(\chi_k)^2}_{\text{振動数}} \sum_i \underbrace{(D_t)_{ii}^{-1} (F_k V_t F_k^*)_{ii}}_{\text{モードの強度}} = \sum_{k,i} \sigma_t^{\text{hk}(k,i)}$$

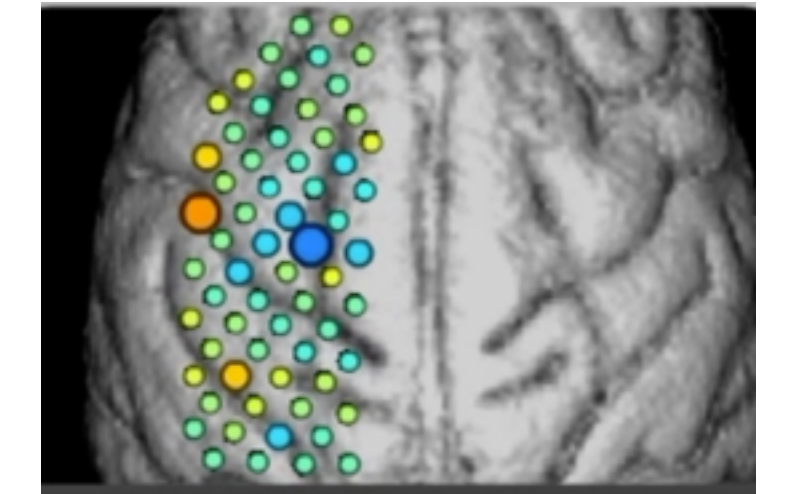
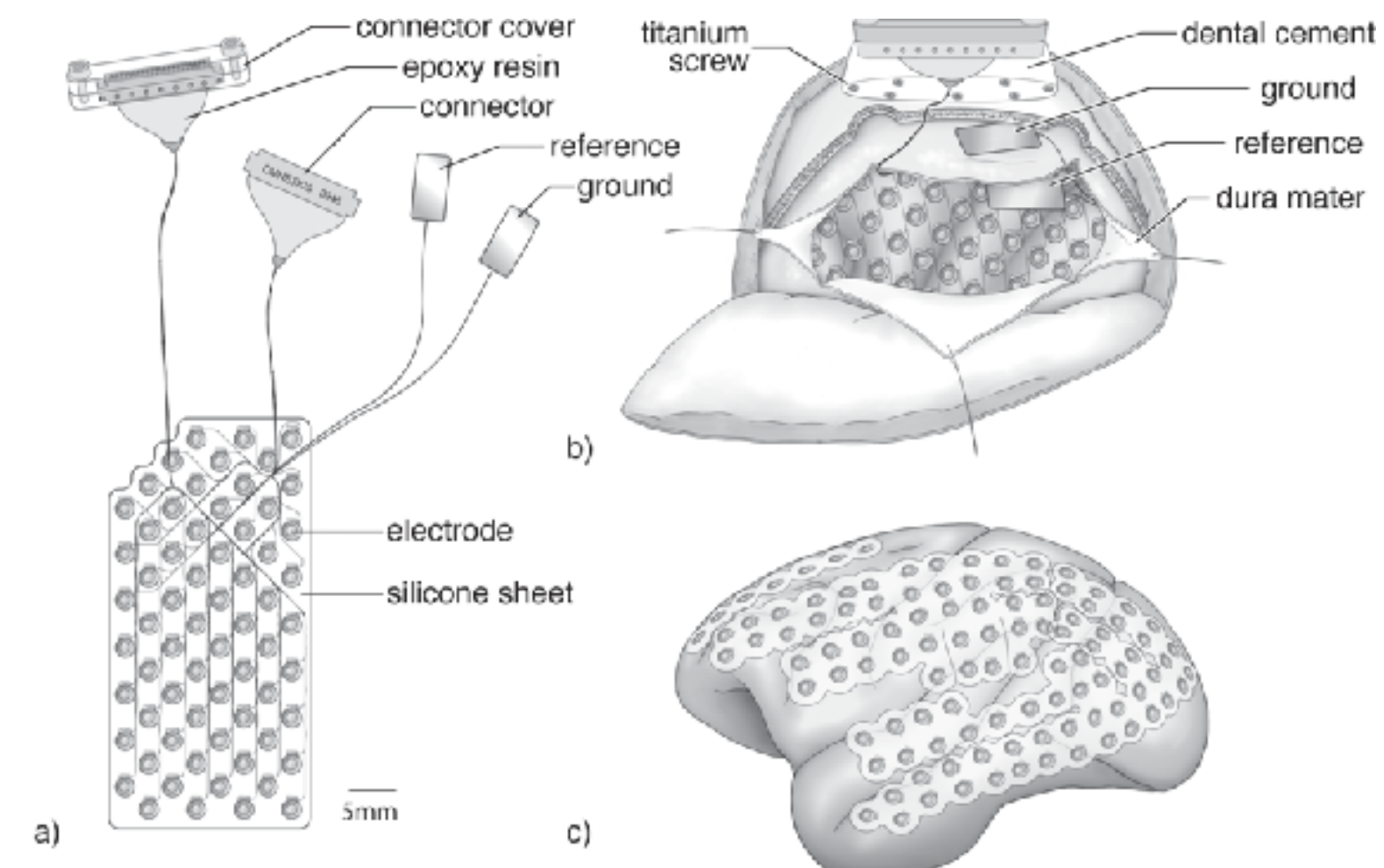
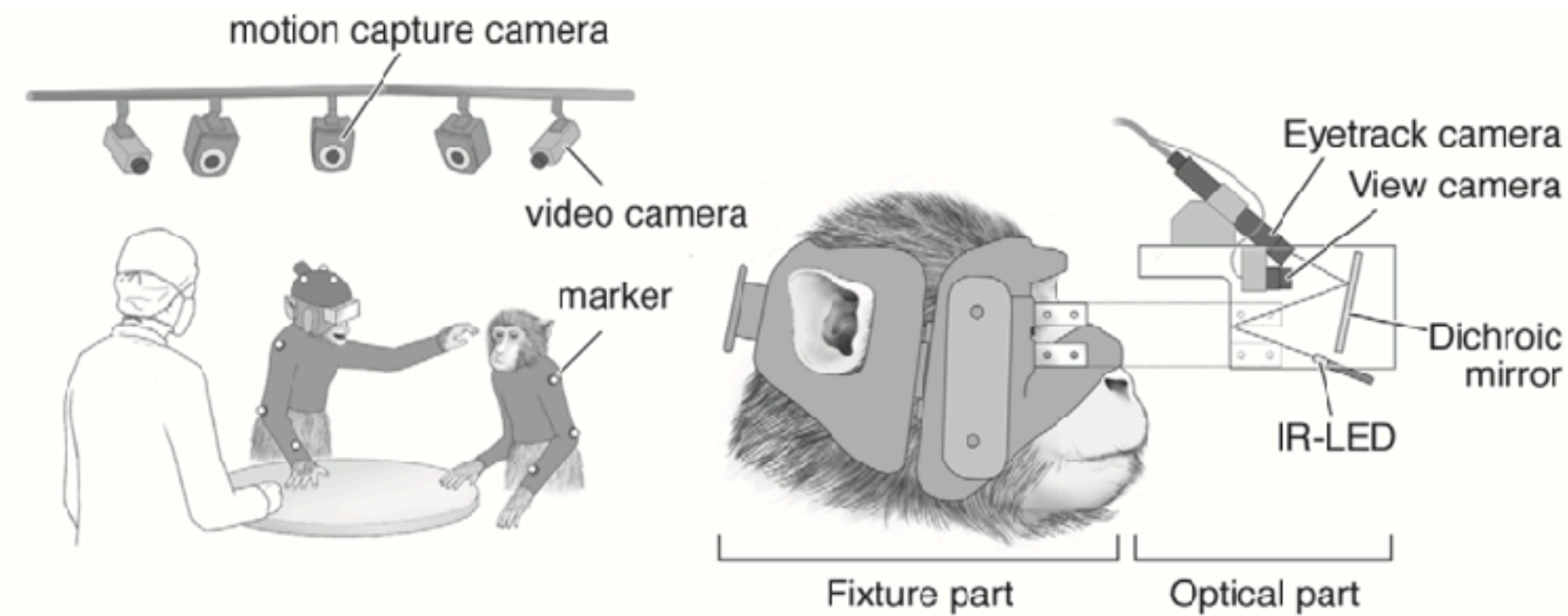
$\sigma_t^{\text{hk}(i,k)} = (2\pi\chi_k)^2 (D_t)_{ii}^{-1} (F_k V_t F_k^*)_{ii}$:分布を維持するための, 振動モードk, 状態iにおける散逸

維持エントロピー生成率のモード分解の 脳ダイナミクスへの応用

猿の脳のECoG (皮質脳波) データセット

Nagasaka, Yasuo, Kentaro Shimoda, and Naotaka Fujii. *PLoS one* 6.7, e22561 (2011).

<http://www.neurotycho.org/>



- 128チャンネルの測定箇所 $i = 1, \dots, 128$
- 麻酔によるタスクの違い
(目を開けて起きている/目を閉じて起きている/麻酔)
- サンプリングレート 1000 Hz / 測定時間: 840 sec
- 各60sec毎のタイムウィンドウに対して, 区分的な定常性を仮定して解析

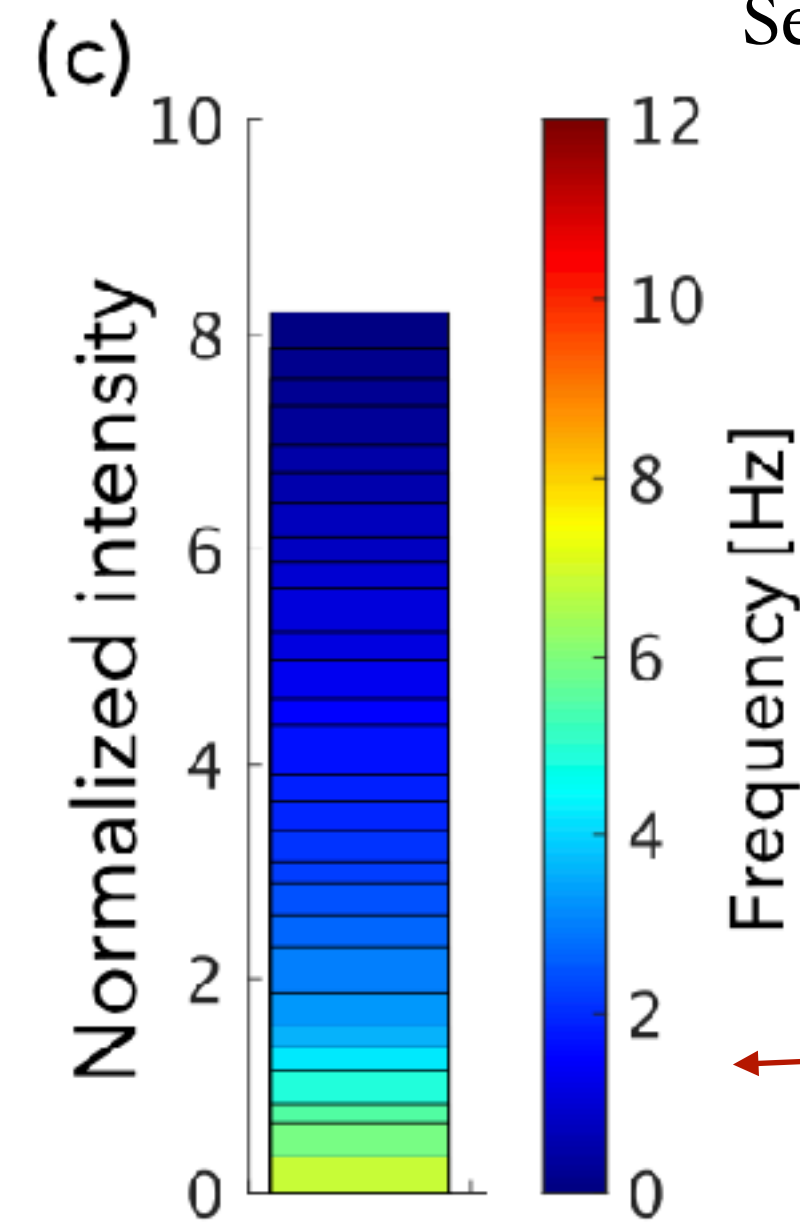
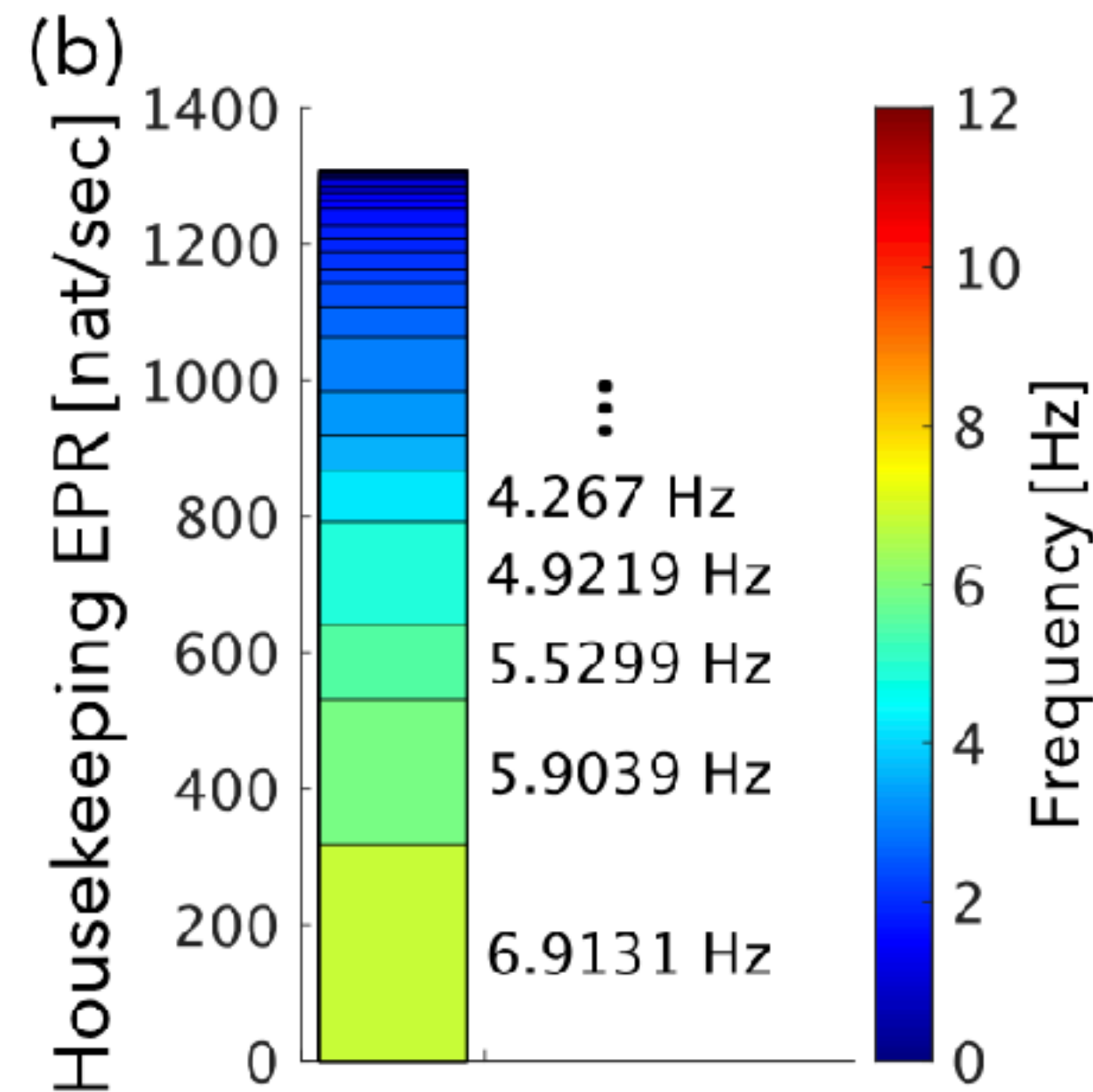
モード分解による解析例

Sekizawa, D., Ito, S., & Oizumi, M. *arXiv:2312.03489*.

$$\sigma_t^{\text{hk}} = \sum_{k,i} \sigma_t^{\text{hk}(k,i)}$$

$$\sigma_t^{\text{hk}(i,k)} = (2\pi\chi_k)^2 (\mathbf{D}_t)_{ii}^{-1} (\mathbf{F}_k \mathbf{V}_t \mathbf{F}_k^*)_{ii}$$

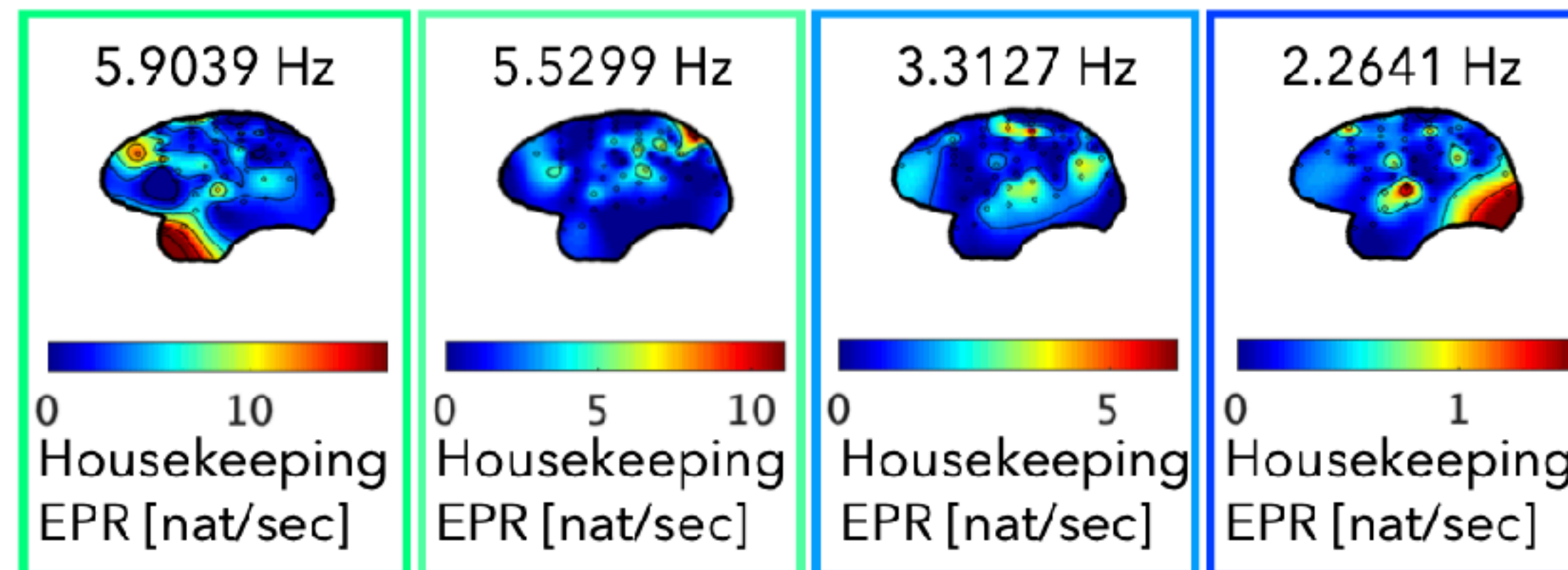
散逸 $\sigma_t^{\text{hk}(k)} = \sum_i \sigma_t^{\text{hk}(k,i)}$



モードの強度

$$J_k = \sum_i (\mathbf{D}_t)_{ii}^{-1} (\mathbf{F}_k \mathbf{V}_t \mathbf{F}_k^*)_{ii}$$

(d)



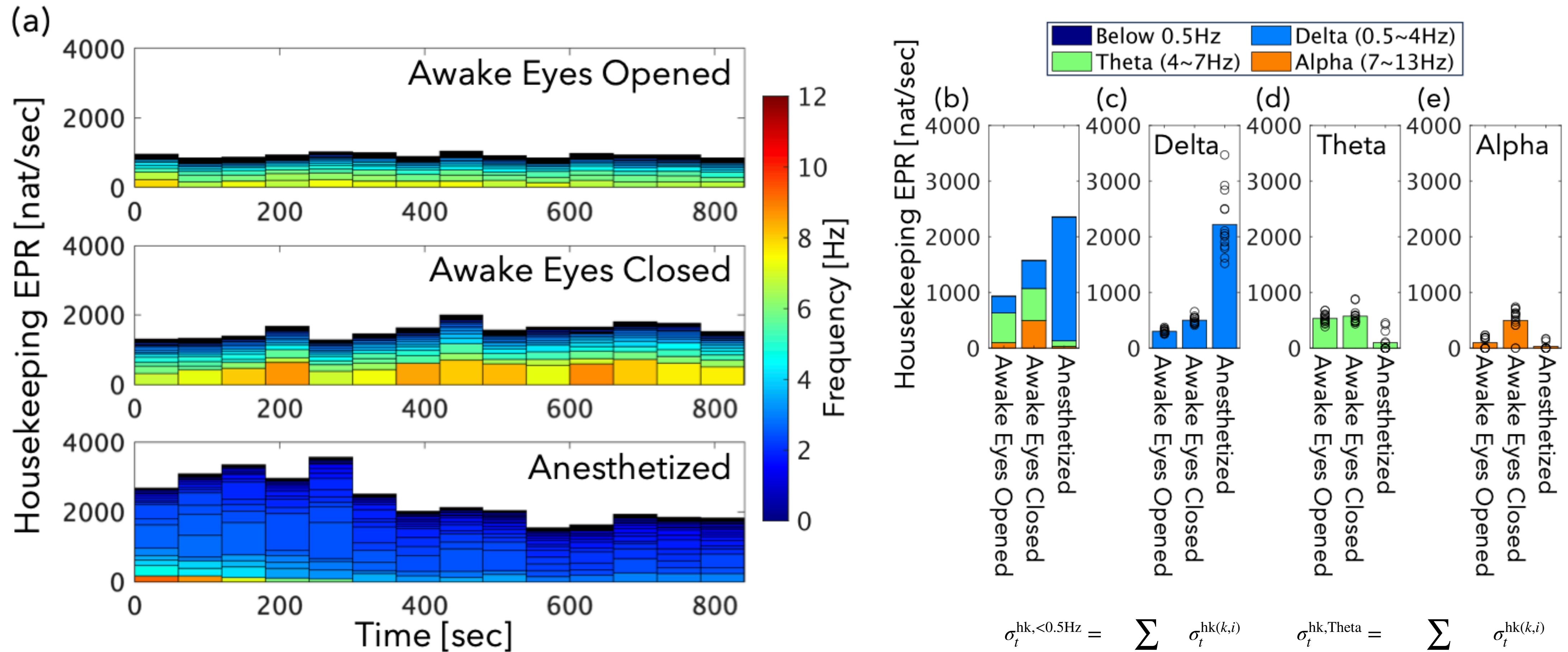
散逸の空間-周波数モード分布

$$\sigma_t^{\text{hk}(i,k)} = (2\pi\chi_k)^2 (\mathbf{D}_t)_{ii}^{-1} (\mathbf{F}_k \mathbf{V}_t \mathbf{F}_k^*)_{ii}$$

維持エントロピー生成率の

時間変動/タスクによる違い/脳波による違い

Sekizawa, D., Ito, S., & Oizumi, M. *arXiv:2312.03489*.



$$\sigma_t^{\text{hk}, <0.5\text{Hz}} = \sum_{k,i | \chi_k < 0.5\text{Hz}} \sigma_t^{\text{hk}(k,i)}$$

$$\sigma_t^{\text{hk}, \text{Theta}} = \sum_{k,i | 4\text{Hz} \leq \chi_k < 7\text{Hz}} \sigma_t^{\text{hk}(k,i)}$$

$$\sigma_t^{\text{hk}, \text{Delta}} = \sum_{k,i | 0.5\text{Hz} \leq \chi_k < 4\text{Hz}} \sigma_t^{\text{hk}(k,i)}$$

$$\sigma_t^{\text{hk}, \text{Alpha}} = \sum_{k,i | 7\text{Hz} \leq \chi_k < 13\text{Hz}} \sigma_t^{\text{hk}(k,i)}$$

維持エントロピー生成率の時空間モード分布の 時間変動/タスクによる違い/脳波による違い

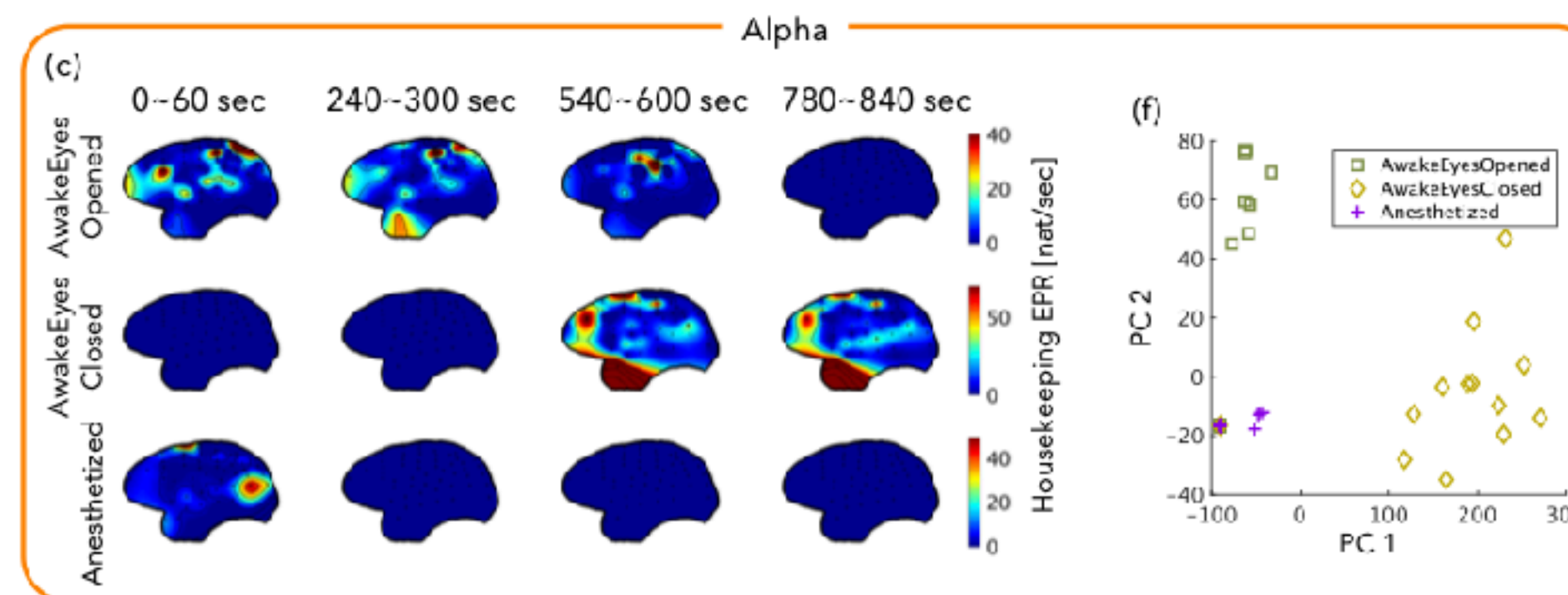
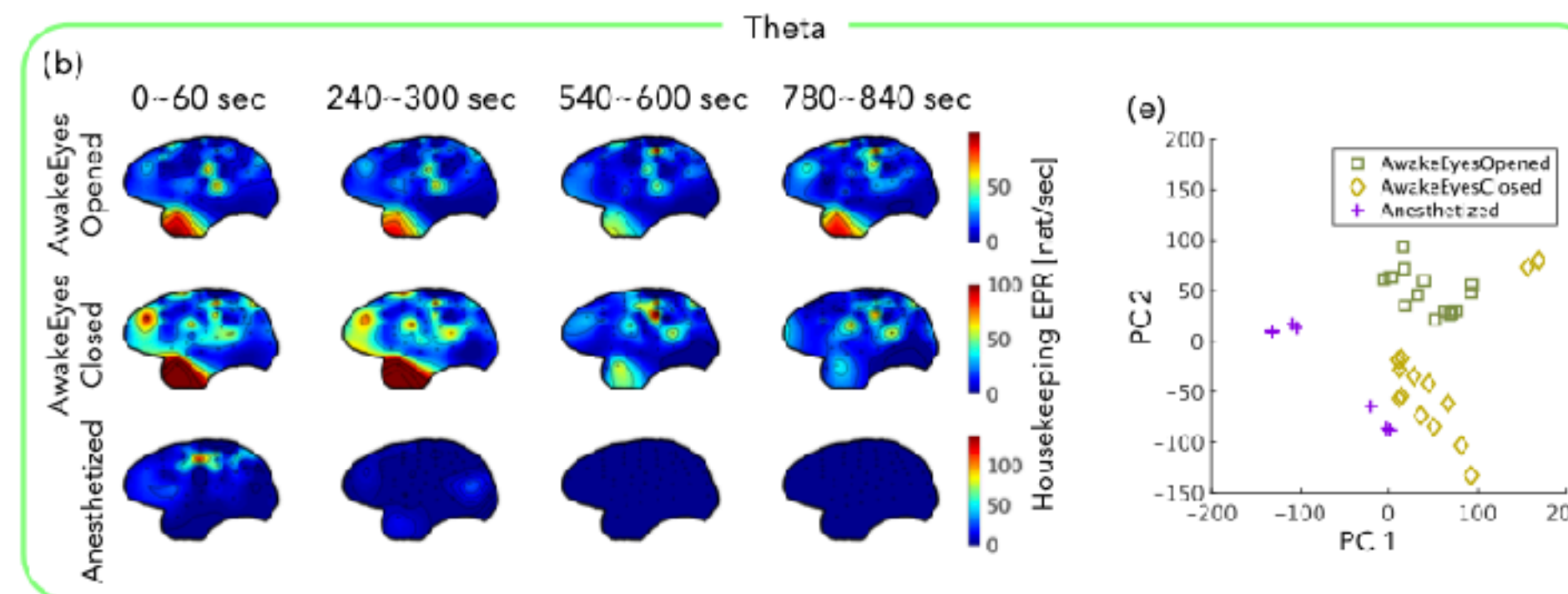
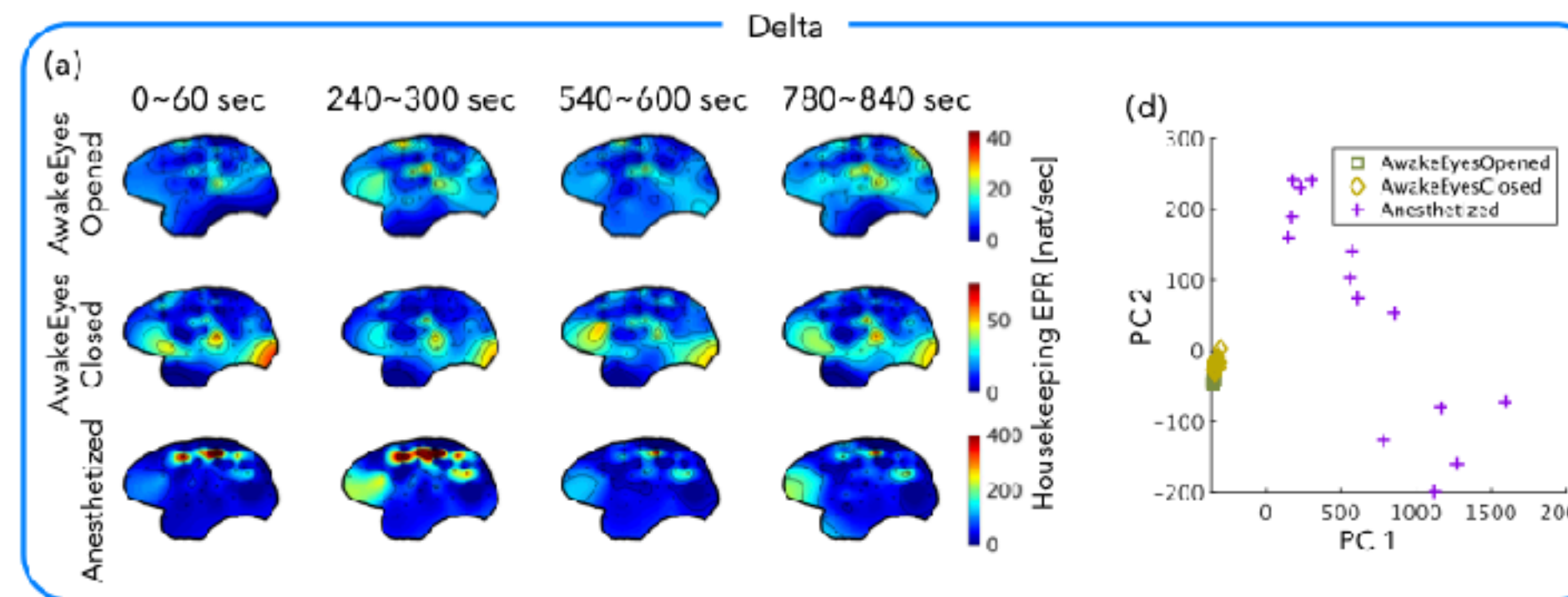
Sekizawa, D., Ito, S., & Oizumi, M. *arXiv:2312.03489*.

遅い周波数モード

0.5~4Hz

4~7Hz

7~13Hz



それぞれの脳波における
散逸の時空間モード分布

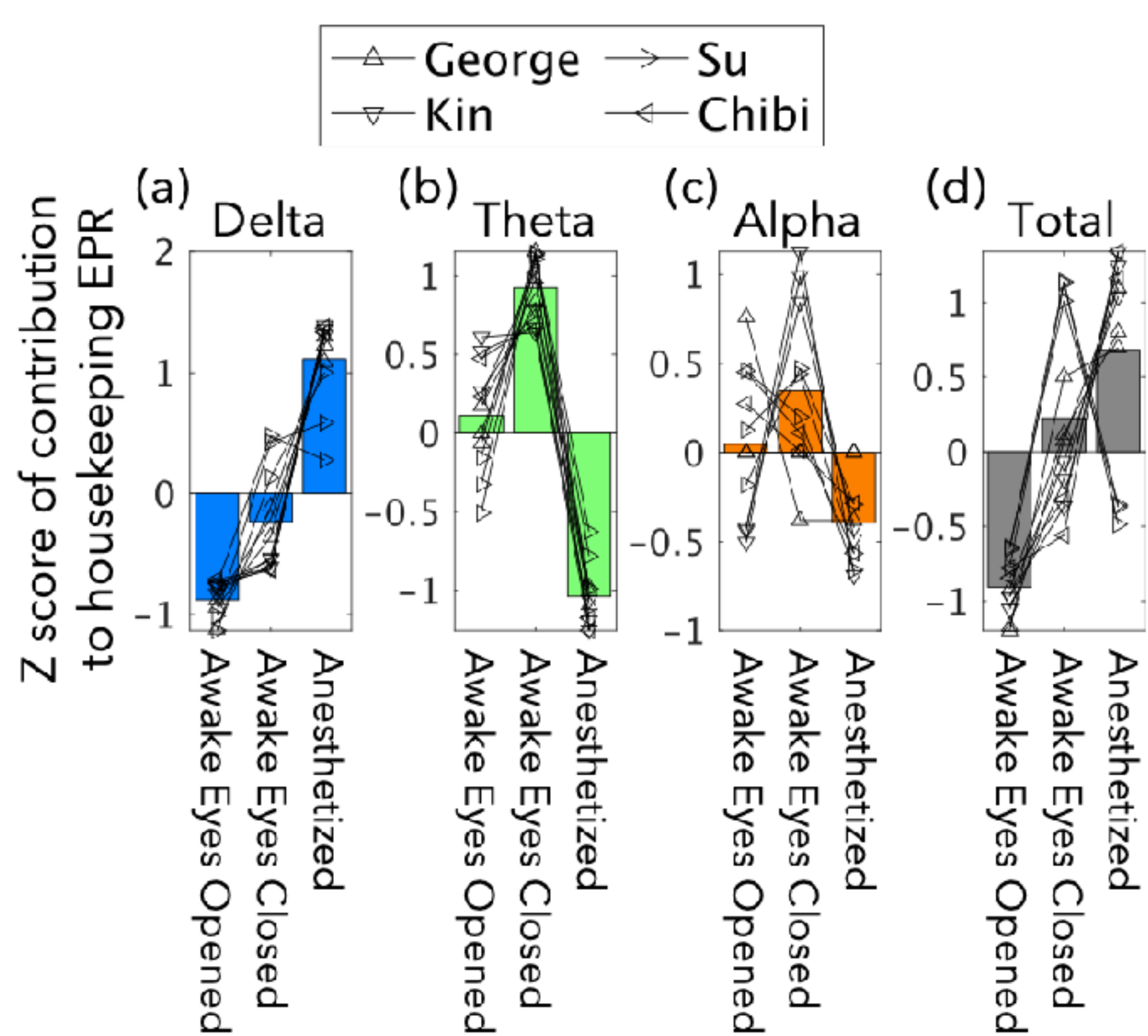
$$\sigma_t^{\text{hk,Delta}(i)} = \sum_{k|0.5\text{Hz} \leq \chi_k < 4\text{Hz}} \sigma_t^{\text{hk}(k,i)}$$

$$\sigma_t^{\text{hk,Theta}(i)} = \sum_{k|4\text{Hz} \leq \chi_k < 7\text{Hz}} \sigma_t^{\text{hk}(k,i)}$$

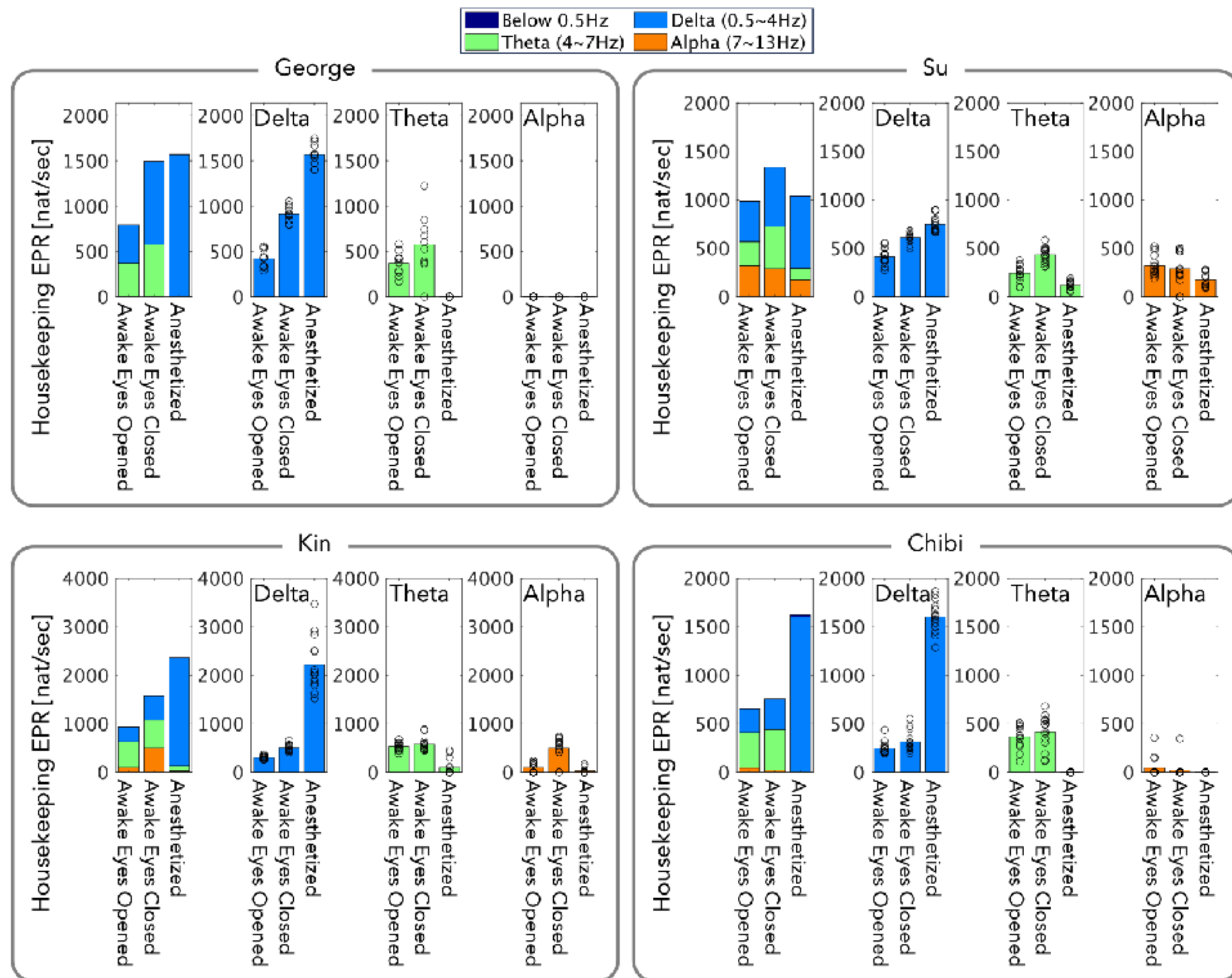
$$\sigma_t^{\text{hk,Alpha}(i)} = \sum_{k|7\text{Hz} \leq \chi_k < 13\text{Hz}} \sigma_t^{\text{hk}(k,i)}$$

個体内変動

Sekizawa, D., Ito, S., & Oizumi, M. *arXiv:2312.03489*.



猿の名前 (George/Su/Kin/Chibi)



まとめ

最適輸送理論におけるバリエーションの一つである「有限時間 τ で連続の式のダイナミクスで輸送する時に流れに応じたコストがかかる」という問題 (e.g., Benamou-Brenier公式)とその拡張により, 様々な系(e.g., 拡散系, Markov jump系, 決定論的な化学反応系, 反応拡散系, 流体系)における最小エントロピー生成の問題を取り扱う事ができる。

熱力学における非保存力と保存力による散逸の分解が, 最適輸送理論における最適なプロトコルの考え方から導入できる。またその分解によって, 時間変化に起因する散逸(過剰エントロピー生成率)と, 時間変化を伴わないサイクルによる散逸(維持エントロピー生成率)に分解できる。

時間変化に起因する散逸(過剰エントロピー生成率)は, 系の状態の時間変化に対する制限をトレードオフ関係(熱力学的不確定性関係/速度限界)の形で与える。

時間変化を伴わないサイクルによる散逸(維持エントロピー生成率)によって, 周波数モードによる散逸の分解を行う事ができる。それにより我々は猿の脳波を解析し、麻酔タスク環境下での脳の散逸の変化を可視化した。

[沙川ERATOプロジェクトのpostdocを募集中]