Day 8

Developments of Stochastic Thermal Dynamics

“勇敢的少年啊，快去创造奇迹！”

Stochastic Efficiency

对于宏观热机而言，由 Carnot 定理给出的效率上界当然还是有效的！因为它来自于热力学的基本定律，而并不来自于“不存在第二类永动机”等假设。

在本节，我们不通过做功定义效率，考虑前文的“纯带运热机”，传热做功输入，它的熵将上升，而我们从热库中抽取热做功，从而热库的熵要减少。从而我们用熵定义一个热机的效率：

$\eta_s = -S^{in}/S^{out}$，由于热二律/Carnot 定理，必有 $\eta_s \le 1$。

对于某一条轨迹而言，我们可定义其随机效率 $\eta = -s^{in}/s^{out}$。为了研究其性质，首先应用精细涨落关系：$\dfrac{P(s^{in}, s^{out})}{P(-s^{in}, -s^{out})} = \exp\left(\frac{1}{k_B}(s^{in} + s^{out})\right)$（注：为一般的热机中）

注意，在此处，我们找到这个新的做功需要熵在时间反演对称性，即 $s(\tilde{x}) = -s(x)$。

这里我们再推一次：

$$
\begin{aligned}
p(s^{in}, s^{out}) &= \int \mathcal{D}x\, \delta(s^{in} - s^{in}(\vec{x}))\, \delta(s^{out} - s^{out}(\vec{x}))\, p(\vec{x}) \\
&= \int \mathcal{D}x\, \delta(s^{in} - s^{in}(\vec{x}))\, \delta(s^{out} - s^{out}(\vec{x}))\, \exp(S^{tot}(\vec{x}))\, p(\tilde{x}) \\
&= e^{S^{tot}(\vec{x})/k_B} \int \mathcal{D}\tilde{x}\, \delta(s^{in} + s^{in}(\tilde{x}))\, \delta(s^{out} + s^{out}(\tilde{x}))\, p(\tilde{x}) \\
&= \exp(S^{tot}(\vec{x})/k_B)\, p(-s^{in}, -s^{out})
\end{aligned}
$$

在长时间的情形下，由大偏差定理，我们有：

$$
\frac{\exp(-I(j^{in}, j^{out})\cdot T)}{\exp(-I(-j^{in}, -j^{out})\cdot T)} = \exp\left(T\cdot(j^{in} + j^{out})/k_B\right)
$$

同时取对数，得到有 rate function 之间的关系：$-I(j_s^{in}, j_s^{out}) + I(-j_s^{in}, -j_s^{out}) = \dfrac{j_s^{in} + j_s^{out}}{k_B}$

而 η 的 rate function 可以由收缩原理来给出：$I(\eta) = \min\limits_{j_s^{in}, j_s^{out};\, -j_s^{in}/j_s^{out} = \eta} I(j_s^{in}, j_s^{out}) = \min\limits_{j_s^{in}} I(j_s^{in}, -j_s^{in}/\eta)$。

注意，在 $I(j_s^{in} = J_s^{in}, j_s^{out} = J_s^{out})$ 处，必有 $I = 0$。

$\Rightarrow I\left(\eta_s = -J_s^{in}/J_s^{out}\right) = \min\limits_{j_s^{in}} I(\ ,\ ) = 0$。因此在一个 ensemble 的平均熵效率上，我们可以达到最小值。这是显然的。

我们有另一个发现！对于 $\eta_s = \eta_c = 1$ 时的情形，有 $I(j_s^{in}, j_s^{out}) = I(-j_s^{in}, -j_s^{out})$。从而 $I(j_s^{in}, -j_s^{in}/\eta_c)$ 是 j_s^{in} 的偶函数。从而它的最小值

从而 $I(\eta) = I(j_s^{in}, j_s^{out})\big|_{j_s^{in} = j_s^{out} = 0}$。另一边，$I(\eta) = \min\limits_{j_s^{in}} I(j_s^{in}, -j_s^{in}/\eta) \le I(j_s^{in}, -j_s^{in}/\eta)\big|_{j_s^{in} = 0} = I(j_s^{in}, -j_s^{in}/\eta_c) = I(\eta_c)$。

从而证明了 $I(\eta)$ 在 $I(\eta_c)$ 处取最大值。换言之，Carnot 效率是随机热机最不可能达到的。

下面我们可以具体计算 rate function。记 j_s^{in}、j_s^{out} 的 scaled CGF 为 $\psi^{(j_s^{in}, j_s^{out})}(q_{in}, q_{out}) = \lim\limits_{T\to\infty} \frac{1}{T} \ln\langle \exp(q_{in} s^{in} + q_{out} s^{out})\rangle$

定义 $f = -\inf_{q_{out}} \psi^{(j_s^{in}, j_s^{out})}(q + q_{out}, \eta\cdot q_{out})$。从而对 sCGF 做变换：

$$I(q) = \inf_{j_s^{in}} I(j_s^{in}, -q\, j_s^{in})$$

$$= \inf_{j_s^{in}} \sup_{q_{in}, q_{out}} \left[q_{in} j_s^{in} - q_{out}(q\, j_s^{in}) - \psi^{(j_s^{in}, j_s^{out})}(q_{in}, q_{out}) \right]$$

$$= \inf_{j_s^{in}} \sup_{q_{in}, q_{out}} \left[j_s^{in}(q_{in} - q\, q_{out}) - \psi^{(j_s^{in}, j_s^{out})}(q_{in}, q_{out}) \right] \qquad \text{let } q = q_{in} - q_{out} q.$$

$$= \inf_{j_s^{in}} \sup_{q} \left[q\, j_s^{in} - f(q) \right]$$

下面,引入一个辅助变量 q',从而再套上一层变换,并令 $q'=0$。

$$= -\sup_{j_s^{in}} \left[q' j_s^{in} - \sup_{q} [q\, j_s^{in} - f(q)] \right] \qquad q'=0$$

$$= -f(0) = -\inf_{q_{out}} \psi^{(j_s^{in}, j_s^{out})}(q_{out} q, q_{out})$$

注意:两次勒让德变换回到自身

特别地,我们考虑 j_s^{in}, j_s^{out} 是相关的高斯随机变量的情形。在这个情形下有,$\psi^{(j_s^{in}, j_s^{out})}(q_{in}, q_{out}) = \frac{1}{2}\left(\tilde{\sigma}_{in}^2 q_{in}^2 + \tilde{\sigma}_{out}^2 q_{out}^2 + 2\tilde{C}_{in,out} q_{in} q_{out}\right) + \bar{j}_s^{in} q_{in} + \bar{j}_s^{out} q_{out}$

利用上面给出的方法进行求解有:$I(q) = \frac{1}{2} \frac{(j_s^{in} q + j_s^{out})^2}{\tilde{\sigma}_{in}^2 q^2 + 2\tilde{C}_{in,out} q + \tilde{\sigma}_{out}^2}$ 通过 Scaled CGF 的对称性,$\psi^{(j_s^{in}, j_s^{out})}(q_{in}, q_{out}) = \psi^{(j_s^{in}, j_s^{out})}(-\frac{1}{k_B} - q_{in}, -\frac{1}{k_B} - q_{out})$。我们实际上可解出:$2 j_s^{in} = \tilde{\sigma}_{in}^2 + \tilde{C}_{in,out}$,$2 j_s^{out} = \tilde{\sigma}_{out}^2 + \tilde{C}_{in,out}$,可以进一步化简结果。

Uncertainty Relations

在这节中,我们将使用熵产率 bound 任意 empirical current 的涨落的分布为不确定性关系。直观意义上不确定性关系意味着一个"精确"的、确定性的核心需要付出的耗散。具体而言,我们会考虑某个 emp. current J,以及在该段时间内总熵产生 S^{tot} 的联合分布。它满足关系 $p(S^{tot}, J)/p(-S^{tot}, -J) = \exp(S^{tot}/k_B)$。下面证明:

$$p(S^{tot}, J) = \int Dx\, \delta(S^{tot} - S^{tot}(x))\, \delta(J - J(x))\, p(x)$$

$$= \int D\tilde{x}\, \delta(S^{tot} - S^{tot}(x))\, \delta(J - J(x))\, \exp(S^{tot}(x))\, \tilde{p}(\tilde{x})$$

$$= \int D\tilde{x}\, \delta(S^{tot} + S^{tot}(\tilde{x}))\, \delta(J + J(\tilde{x}))\, \exp(S^{tot}(\tilde{x}))\, \tilde{p}(\tilde{x})$$

$$= \int D\tilde{x}\, \delta(S^{tot} + S^{tot}(\tilde{x}))\, \delta(J + J(\tilde{x}))\, \exp(S^{tot}(\tilde{x}))\, p(\tilde{x})$$

$$= \exp(S^{tot}(x)/k_B)\, p(-S^{tot}, -J)$$

这个证明中使用了 Current 在时间反演下的奇性与熵产生的对称性。

首先引入一个在熵产生路径上归一化的概率测度。$p^+(S^{tot}, J) = \left(1 + \exp(-S^{tot}/k_B)\right) p(S^{tot}, J)$。可以验证:

$p^+(s^{tot},J) = p(s^{tot},J) + p(-s^{tot},-J)$. 从而

$$\int_0^{+\infty} ds^{tot} \int_{-\infty}^{+\infty} dJ\, p^+(s^{tot},J) = \int_0^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} ds^{tot} dJ\, p(s^{tot},J) + \int_0^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} ds^{tot} dJ\, p(-s^{tot},J) = 1$$

从而利用p^+，可计算$\langle J\rangle$.

$$\langle J\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} ds^{tot} \int_{-\infty}^{+\infty} dJ\, J\, p(s^{tot},J) = \int_0^{+\infty} ds^{tot} \int_{-\infty}^{+\infty} dJ\, p(s^{tot},J) - \underbrace{\int_0^{+\infty} ds^{tot} \int_{-\infty}^{+\infty} dJ\, J\, p(s^{tot},J)\left(\exp(-s^{tot}/k_B)\right)}_{+\int_0^{+\infty} ds^{tot}\int_{-\infty}^{+\infty} dJ\,(-J)\, p(-s^{tot},-J)}$$

$$= \int_0^{+\infty} ds^{tot} \int_{-\infty}^{+\infty} dJ\, J\, p(s^{tot},J)\left(1-\exp(-s^{tot}/k_B)\right)$$

$$= \int_0^{+\infty} ds^{tot} \int_{-\infty}^{+\infty} dJ\, J\, p^+(s^{tot},J)\, \frac{1-\exp(-s^{tot}/k_B)}{1+\exp(-s^{tot}/k_B)} = \left\langle J \tanh\left(\frac{s^{tot}}{2k_B}\right)\right\rangle^+$$

其中 $\langle\ \rangle^+ = \int_0^{+\infty} ds^{tot} \int_{-\infty}^{+\infty} dJ\, p^+(s^{tot},J)$.

使用完全类似的方法，可以直接有：$\langle s^{tot}\rangle = \left\langle s^{tot} \tanh\left(\frac{s^{tot}}{2k_B}\right)\right\rangle^+$.

利用Schwartz不等式有：$\langle J\rangle^2 = \left(\left\langle J \tanh\left(\frac{s^{tot}}{2k_B}\right)\right\rangle^+\right)^2 \le \langle J^2\rangle^+ \left\langle \tanh^2\left(\frac{s^{tot}}{2k_B}\right)\right\rangle^+$. 且有 $\langle \tanh^2 x\rangle \le \langle \tanh x\rangle \le \tanh\langle x\rangle$

从而计算 $\sigma_J^2 = \langle J^2\rangle - \langle J\rangle^2 \ge \langle J^2\rangle - \langle J^2\rangle \left\langle \tanh^2\left(\frac{s^{tot}}{2k_B}\right)\right\rangle^+ \ge \langle J^2\rangle - \langle J^2\rangle \tanh\left\langle \frac{s^{tot}}{2k_B}\right\rangle^+ = \langle J^2\rangle\left(1-\tanh\left(\frac{\langle s^{tot}\rangle}{2k_B}\right)\right)$

从而有所谓不确定关系：$\frac{\sigma_J^2}{\langle J\rangle^2} \ge \frac{2}{\exp(\langle s^{tot}\rangle/k_B)-1}$ 这实际上类似于平衡统计中给出的涨落关系。特别地，由于这里的 s^{tot}, J 都是广延量，所以研究τ很小的时候，我们有：

$$\frac{\tilde\sigma_J^2}{\langle j\rangle^2} \ge \frac{2k_B}{\dot s^{tot}}, \quad \tau \ll k_B/\dot s^{tot}$$

这样的不确定性关系可以被推广至多个current. 例如考虑$J(x)$为多个current的线性组合：$J(x)=\sum_\alpha \lambda_\alpha J_\alpha(x)$. 引入 $C_{\alpha\beta} = \langle J_\alpha J_\beta\rangle - \langle J_\alpha\rangle\langle J_\beta\rangle$ (相关矩阵) 和 $k = \frac{1}{2}\left(\exp(\langle s^{tot}\rangle/k_B)-1\right)$

则不确定关系写为：$\sigma_J^2 \ge \langle J\rangle^2 \cdot k^{-1}$

$$\Rightarrow \left\langle \sum_\alpha \lambda_\alpha J_\alpha(x) \sum_\beta \lambda_\beta J_\beta(x)\right\rangle - \left\langle \sum_\alpha \lambda_\alpha J_\alpha(x)\right\rangle\left\langle \sum_\beta \lambda_\beta J_\beta(x)\right\rangle \ge \frac{1}{k}\left\langle \sum_\alpha \lambda_\alpha J_\alpha(x)\right\rangle\left\langle \sum_\beta \lambda_\beta J_\beta(x)\right\rangle$$

移项后得到有：$\sum_{\alpha\beta} \lambda_\alpha\lambda_\beta\left(C_{\alpha\beta} - \frac{1}{k}\langle J_\alpha\rangle\langle J_\beta\rangle\right) \ge 0$

特别地若我们将系数选择为 $\lambda_\alpha = \sum_\gamma C^{-1}_{\alpha\gamma}\langle J_\gamma\rangle$ 代入后有：

第一项 $= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta}\left(C_{\alpha\beta}\, C^{-1}_{\alpha\gamma}\langle J_\gamma\rangle\, C^{-1}_{\beta\delta}\langle J_\delta\rangle\right)$

$= \sum_{\beta\gamma\delta}\left(\delta_{\beta\gamma}\, \langle J_\gamma\rangle\, C^{-1}_{\beta\delta}\langle J_\delta\rangle\right)$

$= \sum_{\gamma\delta}\left(C^{-1}_{\gamma\delta}\langle J_\gamma\rangle\langle J_\delta\rangle\right)$

$= \sum_{\alpha\beta}\left(C_{\alpha\beta}\langle J_\alpha\rangle\langle J_\beta\rangle\right)$.

第二项 $= \sum_{\alpha\beta}\lambda_\alpha\lambda_\beta\langle J_\alpha\rangle\langle J_\beta\rangle$

$= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} C^{-1}_{\alpha\gamma}\langle J_\alpha\rangle\langle J_\gamma\rangle\, C^{-1}_{\beta\delta}\langle J_\beta\rangle\langle J_\delta\rangle$

$= \left(\sum_{\alpha\beta} C^{-1}_{\alpha\beta}\langle J_\alpha\rangle\langle J_\beta\rangle\right)^2$

$\Rightarrow$ 从而不等式化为 $\sum_{\alpha\beta}\langle J_\alpha\rangle C^{-1}_{\alpha\beta}\langle J_\beta\rangle - \frac{1}{k}\left(\sum_{\alpha\beta}\langle J_\alpha\rangle C^{-1}_{\alpha\beta}\langle J_\beta\rangle\right)^2 \ge 0$. 或者 $\sum_{\alpha\beta}\langle J_\alpha\rangle C^{-1}_{\alpha\beta}\langle J_\beta\rangle \le k$

对于时间极短的情形取 $J_\alpha^{st} = \lim_{T\to 0^+} \langle J_\alpha \rangle / T$，$\sigma^2 = [\tilde{\sigma}^2_{\alpha\beta}] = \lim_{T\to 0^+} C_{\alpha\beta}/T$。此时有 $\sum_{\alpha\beta} J_\alpha^{st} (\tilde{\sigma}^2_{\alpha\beta})^{-1} J_\beta^{st} \le \dot{S}^{tot}/2k_B$。

我们还直接引入一个指标：「对于任意 Current 它的 rate function 都可以被下式 bound 住：」$I(j) \le \sum_{x'<x} \frac{(j_{xx'} - J_{xx'}^{st})^2}{4k_B (J_{xx'}^{st})^2} \dot{S}^{tot}_{xx'}$　其中 $\begin{cases} J_{xx'}^{st} = k_{xx'} p_{x'}^{st} - k_{x'x} p_x^{st} \\ \dot{S}^{tot}_{xx'} = 2k_B J_{xx'}^{st} \sinh^{-1} \frac{J_{xx'}^{st}}{a_{xx'}} = J_{xx'}^{st} \frac{A_{xx'}}{T} \end{cases}$

定义 $j^{tot}_{S,xx'} = j_{xx'} A_{xx'}/T$，代表从 $x' \to x$ 的 flow 对总熵产率的贡献。

在这个定义下有：$\sum_{x'<x} j^{tot}_{S,xx'} = j_S^{tot}$，$\dot{S}^{tot}_{xx'} = \langle j^{tot}_{S,xx'} \rangle$。假设在平衡位置附近，对 $I(j_S^{tot})$ 使用高斯近似从而：

$$I_{LR}(j_S^{tot}) = \sum_{x'<x} \frac{(j^{tot}_{S,xx'} - \dot{S}^{tot}_{xx'})^2}{4k_B \dot{S}^{tot}_{xx'}} = \sum_{x'<x} \frac{(j_{xx'} - J_{xx'}^{st})^2}{4k_B J_{xx'}^{st}} \frac{A_{xx'}}{T} = \sum_{x'<x} \frac{(j_{xx'} - J_{xx'}^{st})^2}{4k_B J_{xx'}^{st}} J_{xx'}^{st} \frac{A_{xx'}}{T}$$

所以我们看到这个高斯的近似正是对 $I(j)$ 的上界的近似。

LR代表"线性响应"

由于 j_S^{tot} 是由 j 线性决定的，所以记做 $I_{LR}(j)$。

还可以定义得到另一个不等式：let $j = \sum_{xx', x'<x} j_{xx'}$，$J^{st}$ 和 $\dot{S}^{tot}$ 同理。我们有：$I(j) \le I_{LR}(j) = \frac{(j - J^{st})^2}{4k_B (J^{st})^2} \dot{S}^{tot}$

对于熵产，显然有 $I(j_S^{tot}) \le I_{LR}(j_S^{tot}) = \frac{(j_S^{tot} - \dot{S}^{tot})^2}{4k_B \dot{S}^{tot}}$

* 注意：在前面，我们通过 $\psi(q) = \psi^+(q) + \delta\psi^+(q)$ 的分析，证明了近平衡情形下 $I(j)$ 的高斯性。

Application of Uncertainty Relations

考虑一个在微管上行走的马达蛋白，行走速度 $v = \langle \dot{n} \rangle$，负载在马达蛋白上施加外力 f，从而该系统的熵产率为 $T\dot{S}^{tot} = \dot{w}^{chem} - fv$，$\dot{w}^{chem}$ 是马达使用化学能的功率。

定义 ATP 的消耗率（由于 ATP 的消耗和空间的移动有关因此这是一个 Current）。$J_n = \langle \dot{n} \rangle$，从而 $\dot{w}^{chem} = \Delta\mu \langle \dot{n} \rangle$。定义该马达的机械效率 $\eta_s = \frac{fv}{\dot{w}^{chem}} = \frac{fv}{fv + T\dot{S}^{tot}}$

利用 ATP 消耗率满足的不确定关系 $\frac{\tilde{\sigma}_j^2}{(\langle \dot{n} \rangle)^2} \ge \frac{2k_B}{\dot{S}^{tot}} \Rightarrow \dot{S}^{tot} \ge 2k_B (\langle \dot{n} \rangle)^2 / \tilde{\sigma}_j^2$

$$\Rightarrow \eta_s \le \frac{fv}{fv + 2k_B T (\langle \dot{n} \rangle)^2 / \tilde{\sigma}_j^2} = \frac{1}{1 + 2k_B T \langle \dot{n} \rangle^2 / (\tilde{\sigma}_j^2 fv)}$$

由 $\dot{S}^{tot} \ge 0 \Rightarrow \Delta\mu^2 \langle \dot{n} \rangle^2 \ge f^2 v^2 \Rightarrow \langle \dot{n} \rangle^2 \ge f^2 v^2 / \Delta\mu^2$　从而进一步放缩

$$\eta_s \le \frac{1}{1 + 2k_B T fv / (\tilde{\sigma}_j^2 \Delta\mu^2)}$$

↳ 不确定关系的强大之处，它可以应用于任一 Current 上。

类似的做法可以应用于其他模型，例如前面提到的 kinesin model.

First Passage Time

设在我们考察系统的某个 Current 首次穿越某一阈值的时间 $T_{fp}(J_{thr})$。我们知道 J_{thr}/T_{fp} 是个强度量，我们定义 $t_{fp} = T_{fp}/|J_{thr}|$，下面我们将要说明：$t_{fp}$ 满足一个不确定关系：$\sigma_{t_{fp}}^2 / \langle t_{fp} \rangle \ge 2k_B / \dot{S}^{tot}$

若该 Current J 满足的大偏差：$p(J,T) = \exp(-T\, I(J/T))$，设在我们将这个大偏差"反过来"，我们知道 J 是正比于 T 的，而 J 满足大偏差，反过来说 T 是正比于 J 的，所以我们猜测 T_{fp} 也应该满足一个大偏差。假定我们有：

$$p(T_{fp}, J_{thr}) \asymp \begin{cases} \exp(-J_{thr} I_+(T_{fp}/J_{thr})) & \text{if } J_{thr} > 0 \\ \exp(J_{thr} I_-(-T_{fp}/J_{thr})) & \text{if } J_{thr} < 0 \end{cases}$$

这个结果非平凡的。你可以看出这个 rate function 和他们的 $p(J,T)$ 有关联。 $p(J_{thr}, T_{fp}) = \exp\left[-T_{fp}\, I(J_{thr}/T_{fp})\right]$

$p(T_{fp}, J_{thr}) = \exp\left[-J_{thr}\, I_\tau(T_{fp}/J_{thr})\right]$

注意：这两个概率之间有微妙的差别。第一个概率是在 T_{fp} 时刻流为 J_{thr} 的概率，而第二个则是在 T_{fp} 时刻首次击中 J_{thr} 的概率。但在 J_{thr} 很大时，这样做是可以给出正确的首阶估计。

$\Rightarrow I_\tau(T_{fp}/J_{thr})\cdot J_{thr} = T_{fp}\, I(J_{thr}/T_{fp}) \Rightarrow I_\pm^{(t)}(t_{fp}) = t_{fp}\, I^{(J)}(\pm 1/t_{fp})$. 这个关系对于 T_{fp} 和 J_{thr} 都定义在正向的。因此我们得到两个 rate fun 之间的关联。

同样我们可以给出两个 scaled CGF.

$$\begin{cases} \psi^{(J)}(q) = \lim\limits_{T\to+\infty} \frac{1}{T}\ln\langle\exp(qJ)\rangle \\ \psi_\pm^{(t_{fp})}(q) = \lim\limits_{|J_{thr}|\to+\infty} \frac{1}{|J_{thr}|}\ln\langle\exp(q\, t_{fp})\rangle \end{cases}$$

它们之间有关联：

$\psi_\pm^{(t_{fp})}(q) = -\psi_\pm^{-1}(q)$. 其中 $\pm$ 代表 ψ^{-1} 的两个分支。下面进行证明。

$$\begin{cases} \psi^{(J)}(q) = q\, j^* - I(j^*), & I'(j^*) = q \\ \psi_+^{(t_{fp})}(q) = q\, t_{fp}^* - I_+(t_{fp}^*), & I'(t_{fp}^*) = q \end{cases}$$

接下来的证明，原本使用了非常迷惑的言论：t_{fp}^* "corresponds to" $1/j^*$. 然而，这两个东西是靠 $I'(j^*)$ 和 $I_+'(t_{fp}^*) = q$ 确定的。根据之前我们得到的 $I_\pm^{(t)}(t_{fp}) = t_{fp}\, I(\pm 1/t_{fp})$. $t_{fp}^* = 1/j^*$ 这显然是不成立的。但令我不得而知的一件事是，作者为何在后面默认了这一点。

不管怎样，让我们默认 $t_{fp}^* \leftrightarrow 1/j^*$，并继续接下来的证明。计算：

$\psi(-\psi_+^{(t_{fp})}(q)) = -(q\, t_{fp}^* - I_+(t_{fp}^*))\, j^* - I(j^*) = -q + \frac{1}{t_{fp}^*} I_+(t_{fp}^*) - I\left(\frac{1}{t_{fp}^*}\right) = -q$. 从而可以完成证明。而这个证明也允许我们将 $\psi^{(J)}$ 在0附近的导数与 $\psi^{(t_{fp})}$ 在0附近的导数联系起来。

通过求 scaled CGF 的一阶、二阶导数，我们立刻有：$|\langle j\rangle| = \frac{1}{\langle t_{fp}\rangle}$, $\tilde{\sigma}_j^2 = |\langle j\rangle|^3\, \tilde{\sigma}_{t_{fp}}^2 = \frac{\tilde{\sigma}_{t_{fp}}^2}{|\langle t_{fp}\rangle|^3}$.

对于一些特定的 current（特别是熵！），由于涨落定理的存在，其 SCGF 有对称性，这使得 t_{fp} 对应的 SCGF 也有对称性：$\psi_+^{(t_{fp})}(q) = \psi_-^{(t_{fp})}(q) - \frac{1}{k_B}$.

这样对于任意 current 的 rate function 满足的不等式也可以迁移：$I_\tau(t_{fp}) \le I_{TUR}(t_{fp}) = \frac{(t-\langle t\rangle)^2}{4\langle t\rangle}\, \dot{S}^{tot}$.

→ Fully Irreversible Processes.

在之前的推导中，我们通常有所谓"微观可逆"/Microscopic Reversibility 假设，即在 $x'\to x$ 的跃迁允许的时候，$x\to x'$ 的跃迁同样被允许。但实际中一些情况并不符合此假设。简单起见，考虑一个例子：有一个一维布朗粒子，最初时只允许在 $[1, L_0]$ 之内运行，L_0 处有挡板。在某一 $t_c\in[t_0, t_f]$，L_0 处挡板突然撤走，从而粒子可以在 $[1, L_f]$ 移动。

在这样的过程中，并不对系统做功，从而 $\langle\exp(-W/k_BT)\rangle = 1$，而自由能变 $\Delta F = -T\Delta S = -k_BT\ln L_f/L_0$. 从而 $\langle\exp(\frac{1}{k_BT}(\Delta F - W))\rangle = 1$ 违反。

为了解释这一结果，我们应看看什么时候我们打破了微观可逆假设。称一条轨迹是被允许的，若 $P_x > 0$。若微观可逆不成立，则存在 $P_{\tilde{x}}(\tilde{x}) > 0$ 的路径，$P(x) = 0$。

上面例子中，这样的路径对应于（反向路径中）在撤掉"关门"时刻之后，粒子仍位于 $[L_0, L_f]$ 之间的那些路径。对这样的反向路径，它们对应的正向路径不被允许。从而我们将表达正反路径概率之比的这个项改为：

$$\hat{P}_{\tilde{x}}(\tilde{x}) = \begin{cases} P_{\tilde{x}}(\tilde{x}) & \text{if } x \text{ is reversible} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

此时我们有：$\langle\exp(-S^{tot}(x)/k_B)\rangle = \int Dx\, P_x(x)\exp(-S^{tot}(x)/k_B) = \int D\tilde{x}\, \hat{P}_{\tilde{x}}(\tilde{x}) = p^{rev}$

即所有可逆路径在反向路径中出现的概率

在我们这个例子中，$\langle\exp(-S^{tot}(x)/k_B)\rangle_F = L_0/L_f = p^{rev}$. 不难看我们的例子是显然正确的。

解一个例子. 考虑一个环上的L个态. 对于 $1\le x<L$. $x\to(x+1)$ 和 $(x+1)\to x$ 都允许. $L\to 1$ 也允许. 但 $1\to L$ 不行. 我们称 $1\to L$ 为 fully / absolutely irreversible. 假定所有允许的跃迁都有相同的速率. 且 $x\rightleftharpoons(x+1)$. $x\in[1,L)$ 都不产生熵. 只有 $L\to 1$ 产生. 从而对于 $[t_0,t_f]$ 间所有路径, 它可逆的概率与熵产生联系起来: $\int_{t=t_0}^{t=t_f}\mathcal{D}\vec{x}\cdot p[\vec{x}]\cdot\exp(-S^{tot}[\vec{x}]/k_B)=p^{rev}(t_f)$.
而 $p^{rev}(t)$ 的衰减速率需要确定. $\frac{dp^{rev}}{dt}=p^{rev}(t)\cdot(-p_L^{st}\cdot k_{L1})$
另一种典型的例子是有吸收态的系统. 若一条路径的末端点被吸收. 则其反向路径一定不被允许. 可以用类似方法分析.

Optimal Protocols

设一个系统被 manipulation protocol. $\{\lambda_\alpha(t)\}$ 控制. $\{\lambda_\alpha(t_0)\}$ 与 $\{\lambda_\alpha(t_f)\}$ 已确定. 我们希望找到 $W^{diss}=W-\Delta F$ 最小的 manipulation. (即使得不用于增加自由能又不用于排出熵的功最小).
考虑系统的近平衡过程. 此时有: $\dot{W}=\frac{dF}{dt}+\dot{W}^{diss}(t)$. $\dot{W}^{diss}(t)$ 可以被写成: $\dot{W}^{diss}(t)=\sum_{\alpha\beta}g_{\alpha\beta}(\lambda(t))\,d\lambda_\alpha/dt\cdot d\lambda_\beta/dt$. g 称为"摩擦因子". 是对称半正定阵.
记 $X_{\alpha,x}=\frac{\partial E_x(\lambda)}{\partial\lambda_\alpha}$ 则 $g_{\alpha\beta}(\lambda)=\frac{1}{k_BT}\int_0^{+\infty}dt\cdot C_{\alpha\beta}(t;\lambda)$. 其中 $C_{\alpha\beta}(t;\lambda)=\left\langle\left(X_{\alpha,x(t)}-\langle X_{\alpha,x(0)}\rangle^{eq}\right)\left(X_{\beta,x(0)}-\langle X_{\beta,x(0)}\rangle^{eq}\right)\right\rangle^{eq}$. 每一个 $\langle\ \rangle^{eq}$ 都意味着在平衡态上对 x 取期望.
与之前我们研究 $K_{\alpha\beta}(t)$ 和 $C_{\alpha\beta}(t)$ 是不同的时候假定 $\langle X_{\alpha,x}(0)\rangle^{eq}=0$. 这里减去了0时刻的值.

$g_{\alpha\beta}(\lambda)=\frac{1}{k_BT}\int_0^{+\infty}dt\cdot C_{\alpha\beta}(t;\lambda)$. 下给证明:

$F=-k_BT\ln Z$　　$\frac{dF}{dt}=-k_BT\cdot\frac{1}{Z}\cdot\frac{d(\sum_x\exp(-E_x/k_BT))}{dE_x}\cdot\frac{dE_x}{d\lambda}\cdot\frac{d\lambda}{dt}=\sum_x\frac{1}{Z}\exp(-E_x/k_BT)\frac{dE_x}{d\lambda}\cdot\frac{d\lambda}{dt}$

$$\dot{W}=\frac{dF}{dt}+\dot{W}^{diss}(t)\Rightarrow\dot{W}^{diss}(t)=\dot{W}-\frac{dF}{dt}$$
$$=\sum_\alpha\frac{d\lambda_\alpha}{dt}\langle X_\alpha(t;\lambda(t))\rangle_{\lambda(t)}-\sum_\alpha\frac{d\lambda_\alpha}{dt}\langle X_\alpha(\lambda(t))\rangle^{eq}_{\lambda(t)}$$

根据之前面对 Linear Response Theory 的研究. 在特定的弱扰动的条件下. 可以假定 X_α 对平衡态的偏离可写为:
$\langle X_\alpha(t;\lambda(t))\rangle_\lambda-\langle X_\alpha(\lambda(t))\rangle^{eq}_{\lambda(t)}=\sum_\beta\int_{-\infty}^{t}K_{\alpha\beta}(t-t';\lambda^{(0)})(\lambda_\beta(t')-\lambda^{(0)})$. 其中 $\lim_{t\to-\infty}\lambda(t)=\lambda^{(0)}$. $\lambda(t)=\lambda^{(0)}\Theta(-t)\exp(\epsilon t)$.
利用K与相关函数之间的关系. $K_{\alpha\beta}(t;\lambda)=-\frac{\Theta(t)}{k_BT}\frac{d}{dt}C_{\alpha\beta}(t;\lambda)$.

$$LHS=\sum_\beta\int_{-\infty}^{t}-\frac{\Theta(t')}{k_BT}\frac{d}{dt}C_{\alpha\beta}(t';\lambda(t'))(\lambda_\beta(t')-\lambda^{(0)})$$

→有限上有限.

→ $\frac{d\Theta(t)}{dt}$ 仅在零点处不为0. 而此处 $C_{\alpha\beta}(0)=0$.

$$=\sum_\beta\int_{-\infty}^{t}-\frac{1}{k_BT}\frac{d\left(\Theta(t)C_{\alpha\beta}(t';\lambda(t'))(\lambda_\beta(t')-\lambda^{(0)})\right)}{dt}+\sum_\beta\int_{-\infty}^{t}\frac{d\lambda_\beta(t)}{dt}(C_{\alpha\beta}\Theta(t))+\sum_\beta\int_{-\infty}^{t}\frac{d\Theta(t)}{dt}(C_{\alpha\beta}(\ ),\lambda_\beta(\ ))$$

从而 $\dot{W}^{diss}(t)=\frac{1}{k_BT}\sum_{\alpha\beta}\frac{d\lambda_\alpha}{dt}\int_{-\infty}^{t}dt'\cdot C_{\alpha\beta}(t-t';\lambda(t))\cdot\frac{d\lambda_\beta(t')}{dt'}$　作一个变量替换. $\tau=t-t'$.
$$=\frac{1}{k_BT}\sum_{\alpha\beta}\frac{d\lambda_\alpha}{dt}\int_0^{+\infty}d\tau\,C_{\alpha\beta}(\tau;\lambda(t))\frac{d\lambda_\beta(t')}{dt'}\Big|_{t'=t-\tau}$$
假定相关函数 $C_{\alpha\beta}(\tau;\lambda(t))$ 随 τ 快速衰减. 换言之. 系统在两个时间点之间没有长程关联. 从而我们可以做Taylor展开. $\frac{d\lambda_\beta(t')}{dt'}\Big|_{t'=t-\tau}=\frac{d\lambda_\beta}{dt}-\tau\frac{d^2\lambda_\beta}{dt^2}+O(\tau^2)$
在一定的条件下. 可以认为相关特征时间 τ 是小量. 从而只需把高阶项舍掉. 从而有 $\dot{W}^{diss}(t)=\sum_{\alpha\beta}\frac{d\lambda_\alpha}{dt}g_{\alpha\beta}(\lambda(t))\frac{d\lambda_\beta}{dt}$.

对于一些特定例子，例如在高度和位置可调的简谐势阱中的布朗粒子. $\frac{dx}{dt} = -\mu_p \cdot k \cdot (x-l) + \xi(t)$, $\langle \xi(t) \rangle = 0$. $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\mu_p k_B T \cdot \delta(t-t')$.

经过计算可知，两个共轭变量 $\frac{\partial E(x)}{\partial l} = -k(x-l)$, $\frac{\partial E(x)}{\partial k} = \frac{1}{2}(x-l)^2$. $C(t; l, k) = \begin{pmatrix} k \cdot k_B T \cdot \exp(-\mu_p k |t|) & 0 \\ 0 & (k_B T/k)^2 \exp(-2\mu_p k |t|)/2 \end{pmatrix} \Rightarrow g(l, k) = \begin{pmatrix} 1/\mu_p & 0 \\ 0 & k_B T/4\mu_p k^3 \end{pmatrix}$.

求解对应的优化问题. $\Rightarrow$ $dl/dt = \text{Const}$. $dk^{1/2}/dt = \text{Const}$.

从几何的角度看. Optimal Protocol 的意义是显然的. $\{\lambda_\alpha(t)\}$ 张成的空间内的曲线长度为 $\mathcal{L}[\lambda] = \int_0^{t_f} dt \sqrt{\sum_{\alpha\beta} g_{\alpha\beta}(\lambda(t)) \, d\lambda_\alpha/dt \, d\lambda_\beta/dt}$.

利用C-S不等式可得 $W^{diss} T \geq \mathcal{L}^2$.

→ Martingales.

指一个随机过程 $x(t)$. 对于 $t > t_1 > t_2 \cdots$ 在给定 $t_1, t_2, t_3 \cdots$ 的条件下对 $x(t)$ 进行估计. 若 $\langle x(t) | x(t_1), x(t_2), x(t_3), \cdots \rangle = x(t_1)$. 则称该随机过程是鞅. 换言之. 在已知 $x(t_1)$ 的情形下. 对 $x(t)$ 的最好估计是 $x(t_1)$. 或者说鞅是一个"没有漂移"的随机过程. 若某一随机时刻 t 可由已经过的轨迹 $x(t')$, $t' < t$ 中已有的信息来确认是否达到. 则称 t 为鞅的停时.

有一重要定理称为 Doob选择定理. 它宣称 $\langle x \rangle_{t_{stop}} = x(t_0)$. 要使用它，应至少满足以下三条件之一.

• 停时有界. $t_{stop} \leq c$. • 平均停止时间有界. $\langle t_{stop} \rangle < +\infty$. 且增量有界. $|x(t+dt) - x(t)| \leq c$ • 过程本身有界. $|x(t)| \leq c$. $t \leq t_{stop}$

不满足以上条件的例子包括一维对称随机游走的首达时间.

鞅论的主要应用有. 对于处于稳态的系统 $\exp(-S^{tot}(\vec{x})/k_B)$ 是鞅. 下面证明. 为了证明鞅性. 我们只需计算. $\langle \exp(-S^{tot}(t)/k_B) | \exp(-S^{tot}(t_1)/k_B) \rangle$

$\exp(S^{tot}(\vec{x})/k_B) = \frac{P_{\vec{x}}}{P_{\tilde{x}}} = \frac{P_{x_0} \cdot P_{\vec{x}|x_0}}{P_{x_f} \cdot P_{\tilde{x}|x_f}}$ 用 $\vec{x}_1$ 表示 $[t_0, t_1)$ 间的轨迹. 用 $\vec{x}_2$ 代表 $[t_1, t_2]$ 间的轨迹. 熵产生同样分成两部分. $S^{tot}(t) = S_1 + S_2(\vec{x}_2)$.

从而计算:

$$\langle \exp(-S^{tot}(t)/k_B) | \exp(-S^{tot}(t_1)/k_B) \rangle = \frac{\int D\vec{x}_1 \cdot D\vec{x}_2 \cdot P_{\vec{x}} \exp(-S^{tot}(t)/k_B) \, \delta(S^{tot}(t_1) - S_1)}{\int D\vec{x}_1 \int D\vec{x}_2 \, P_{\vec{x}} \cdot \delta(S^{tot}(t_1) - S_1)}$$

$$= \frac{\int D\vec{x}_1 \cdot D\vec{x}_2 \cdot P_{\vec{x}_1} \cdot P_{\vec{x}_2} \cdot \exp(-S_1/k_B) \cdot \exp(-S_2(\vec{x}_2)/k_B) \, \delta(S^{tot} - S_1)}{\int D\vec{x}_1 \cdot D\vec{x}_2 \cdot P_{\vec{x}_1} \cdot P_{\vec{x}_2} \cdot \delta(S^{tot}(t_1) - S_1)}$$

$$= \frac{\int D\vec{x}_2 \cdot P_{\vec{x}_2|x_{t_1}} \cdot P_{x_{t_1}|S_1} \cdot \exp(-S_2(\vec{x}_2)/k_B)}{\int D\vec{x}_2 \, P_{\vec{x}_2}} \cdot \exp(-S_1/k_B). \quad P_{x_{t_1}|S_1} = \frac{\int D\vec{x}_1 \cdot P_{\vec{x}_1} \cdot \delta(S^{tot}(t_1) - S_1) \, \delta^K_{x(t_1), x_{t_1}}}{\int D\vec{x}_1 \cdot P_{\vec{x}_1} \, \delta(S^{tot}(t_1) - S_1)}.$$

代入 $\frac{P_{\vec{x}_2|x_{t_1}} \, P_{x_{t_1}}}{P_{\hat{x}_2|x_t} \cdot P_{x_t}} = \exp(S^{tot}(\vec{x}_2)/k_B)$ 有:

$$\langle \exp(-S^{tot}(t)/k_B) | \exp(-S^{tot}(t_1)/k_B) \rangle = \exp(-S_1/k_B) \cdot \frac{\int D\vec{x}_2 \cdot \cancel{P_{\vec{x}_2|x_{t_1}}} \cdot P_{x_{t_1}|S_1}}{1} \cdot \frac{P_{\hat{x}_2|x_t} \cdot P_{x_t}}{\cancel{P_{\vec{x}_2|x_{t_1}}} \cdot P_{x_{t_1}}} = \exp(-S^{tot}(t_1)/k_B) \int D\hat{x}_2 \, P_{x_t} \cdot P_{\hat{x}_2|x_t} \cdot \frac{P_{x_{t_1}|S_1}}{P_{x_{t_1}}}$$

$$= \exp(-S_1/k_B) \int D\hat{x}_2 \cdot P_{\hat{x}_2} \cdot \frac{P_{x_{t_1}|S_1}}{P_{x_{t_1}}}$$

要弄清楚这个问题需要一个概念：可不依赖于轨道的倒序。所有到达 x_0 的反向路径的总的概率等于 $p^{st}(x_0)$。 这些轨迹的反向概率和正向概率相等。 我们来详细的看这个问题。

看以下的问题，这根据节证明，对于轨迹 $(x_n,\cdots,x_0)$，有 $P_{\hat{\Diamond}} = \sum_{x_1}\cdots\sum_{x_n} p^{st}(x_n)\, W_{x_n,x_{n-1}}\cdots W_{x_1,x_0} = p^{st}(x_0)$。对于连续的情形，只需要改成积分。

从而上面我们可以按照之前的 x_{t_1} 拆开取：$\int Dx_2 \cdot p_{x_t}\, P_{\hat{\Diamond}|x_t} \cdot \frac{P_{x_{t_1}|x_1}}{p_{x_{t_1}}} = \int Dx_n\, p_{x_t} \cdot \frac{(\ )}{(\ )} = \sum_{x_1} p_{x_1} \frac{P_{A|S_1}}{p_{x_1}} = \sum_1 P_{A|S_1} = 1$。从而得证。

由 Doob 选择定理有：$\langle \exp(-S^{tot}/k_B) \rangle_{t_{stop}} = 1$。

特别地，当将停时设为对于某一 $c>1$，首次达到 $\exp(-S^{tot}/k_B) \geq c$ 的时间。 虽然这个时间可能是无穷大的。 但有 $0 < \langle \exp(-S^{tot}/k_B) \rangle_{t_{stop}} \leq c$，因而它满足 Doob's Theorem 的条件。 对于那些没有碰到 c 的轨迹，在 $t \to \infty$ 时有 $\exp(-S^{tot}/k_B) \to 0$。

从而我们有 $p_c \cdot \langle \exp(-S^{tot}/k_B) \rangle_c = 1$。 其中 $\langle\cdots\rangle_c$ 是在停时上的均值。 显然，若轨迹连续，则立刻有 $p_c = 1/c$。 这给 p_c 也是不低的熵产生小于 $\bar{s} = -k_B \ln c$ 文本的概率。

换言之，$p(S^{tot} \leq \bar{s}$ for some finite $t) = \exp(\bar{s}/k_B)$。 这显然是 s 最小值的一个分布。 从而立刻有：$p(\inf S^{tot} \geq \bar{s}) = \frac{1}{k_B}\exp(\bar{s}/k_B)$。

从而我们发现了一条轨迹上熵产生小于 0 的概率是指数衰减的。 对于不连续的情况，由于它可以直接"走"过 $\bar{s}$，跳到比 $\bar{s}$ 熵更低的点上，因此 $\exp(\bar{s}/k_B)$ 是一个上界。

→ Random time.

对于连续系统的熵产生，我们可用一种技巧，称为 random time transformation，具体而言我们有个例子，即在 Ito 积分下一步可得的熵产生。

此时需要引入 $(dx)^2$，从而所有对 x 的导数都要展开到二阶。 从而内能变化：

$$\frac{d}{dt}\varepsilon(x,t) = \frac{\partial}{\partial t}\varepsilon(x,t) + \frac{\partial}{\partial x}\varepsilon(x,t) \cdot \frac{dx}{dt} + D \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2}\varepsilon(x,t),$$

做功：$\frac{d}{dt} w(x(t),t) = \frac{\partial}{\partial t}\varepsilon(x,t) + f(x,t) \cdot \frac{dx}{dt} + D \cdot \frac{\partial}{\partial x} f(x,t)$。

这一项乘 dt，

所以 $\varepsilon(x+dx,t) - \varepsilon(x,t)$

并不会有影响。

$\sim [f(x+dx,t) - f(x,t)]dx \sim \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x} f(x,t) \cdot dx^2$ 不应当忽略了！

从而（按定义）热一律立刻有：$\frac{d}{dt} q(x(t),t) = \frac{d}{dt} w(x(t),t) - \frac{d}{dt}\varepsilon(x(t),t) = f(x,t) \cdot \frac{dx}{dt} + D \cdot \frac{\partial}{\partial x} f(x,t)$。

系统的熵变为：$\frac{d}{dt} S^{sys} = -k_B \left[\frac{1}{p(x,t)} \frac{\partial}{\partial t} p(x,t) + \frac{1}{p(x,t)} \frac{\partial}{\partial x} p(x,t) \cdot dx/dt + \frac{D}{p(x,t)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} p(x,t) - \frac{D}{p^2(x,t)} \left[\frac{\partial}{\partial x} p(x,t) \right]^2 \right] = \cdots$

通过反复使用 Ito 公式计算，有：

$$\frac{d}{dt} S^{tot}(x(t),t) = (\ ) + (\ ) = k_B \left[-\frac{2}{p(x,t)} \frac{\partial}{\partial t} p(x,t) + \frac{J^2(x,t)}{D \cdot p^2(x,t)} + \frac{\sqrt{2}J(x,t)}{\sqrt{D} \cdot p(x,t)} \xi(t) \right]$$

简单起见，设熵产生速度 $v_s(x,t) = \frac{J^2(x,t)}{D \cdot p^2(x,t)}$。

从而 $\frac{dS^{tot}}{dt} = k_B \left[-2 \cdot \frac{\partial}{\partial t} \ln p(x,t) + v_s(x,t) + \sqrt{2 v_s(x,t)}\, \xi(t) \right]$。 对于稳态情形有 $\frac{d}{dt}[\exp(-S^{tot}/k_B)] = -\exp(-S^{tot}/k_B) \cdot \sqrt{2 v_s(x)}\, \xi(t)$，

恰好与前面证明的结论（关于稳态情形）相符合。在这里我们引入所谓"随机时间" $dt_{rnd} = v_s(x,t)\, dt$，代入有：

$\frac{d}{dt_{rnd}} S^{tot} = k_B + k_B \sqrt{2}\, \xi'(t_{rnd})$。 也就是说在 t_{rnd} 这一"时钟"的测量下，所有系统有一致的熵产率，这也说明了为何 Doob 选择定理的结果适用于全部系统。

Population Genetics.

下面我们将随机和一个群体的遗传行为作些类比。一个核心要点：热二指出的熵有对应于"群体适应度"的分析。

我们将群体中的个体上影响其繁殖率的特性称为表型，考虑一个 $N^{tot}(t_0) \gg 1$ 的种群进行演化，繁殖总是一分为二的。

在某一 t_f 时，群体有 $N^{tot}(t_f)$ 个个体。对于每个个体，我们用其表型 x_i 和祖先集合（称为"谱系"）来研究它。

在实际中，种群数目并非指数增长，一种简单的模型是令数目保持不变：分裂一次，移除一个其他个体。我们考虑 $N(t_f)$ 时刻所有的祖先集合，它们的数目从 $N(t_f) \to N(t_0)$ 单调递减。

让我们考虑单个 clone，即初始种群中一个个体的所有后代。采样这些后代有两个途径。（在这种采样中，我们暂不考虑将移除的个体移除）

- 编时采样：从初始种群选一个，而后向下随机从其后代中选一个。
- 回溯采样：从 t_f 时刻种群中选择一个然后回溯。

设 $p_{\tilde{x}}$ 为某采样或采样到表型为 x 的分裂过 p 次的个体的谱系 ⚠ 谱系指的是根→叶的一条路径 的概率。$n_{p,x}$ 为 t_f 时刻分裂 p 次表型为 x 的个体数目，则：

对回溯采样 $p^{ret}_{p,x} = n_{p,x}/N(t_f)$，这是显然的。对于编时，以 $\frac{1}{N(t_0)}$ 的概率选中一棵树，以 $\frac{1}{N(t_0)} 2^{-p}$ 的概率选中分裂 p 次的叶子，则 $p^{chr}_{p,x} = \frac{2^{-p}}{N(t_0)} \cdot n_{p,x}$ 选中 (p,x) 的谱系。

定义种群的增长率 $\Lambda = \frac{1}{T} \ln[N(t_f)/N(t_0)]$，两种采样到某一条谱系的概率有关系：$p^{ret}_{p,x} = \exp(T \cdot (\tilde{h}_p - \Lambda)) \cdot p^{chr}_{p,x}$，$\tilde{h}_p = \frac{1}{T} p \ln 2$。

在这里，$p^{ret}_{p,x}$ 和 $p^{chr}_{p,x}$ 类比于正向、反向概率，而 $T(\tilde{h}_p - \Lambda)$ 类比于熵产生。

下面我们估计某一表型的适应度，它可以定义为拥有某一表型的个体的期望后代数目，然而这可能难以计算，我们做如下定义：$p^{ret}_x = \sum_p p^{ret}_{p,x}$；$p^{chr}_x = \sum_p p^{chr}_{p,x}$。

定义表型 x 的 fitness landscape / 适应度景观：$h_x = \frac{1}{T} \ln \frac{N(t_f) \cdot p^{ret}_x}{N(t_0) \cdot p^{chr}_x} = \Lambda + \frac{1}{T} \ln \frac{p^{ret}_x}{p^{chr}_x} \Rightarrow p^{ret}_x = \exp(T(h_x - \Lambda)) p^{chr}_x$。

利用 $p^{chr}_{p|x} = p^{chr}_{p,x}/p^{chr}_x$ 和 $p^{ret}_{p,x} = \frac{N(t_0)}{N(t_f)} \cdot 2^p \cdot p^{chr}_{p,x}$，可以给出 h_x 的另一表达：$h_x = \frac{1}{T} \ln \sum_p 2^p p^{chr}_{p|x}$。

下面考虑所谓表型切换 / phenotype switching 现象，它描述了在选择压力下群体中个体表型变化的现象。设个体表型从 $x' \to x$ 的切换速率为 $k_{xx'}$，在切换时，一个个体只有 $\exp(d_{xx'})$ 概率存活 $(d_{xx'} < 1)$。定义一个谱系的表型路径 $\tilde{x} = ((x_0,t_0),(x_1,t_1),\cdots,(x_n,t_n),t_f)$。设表型为 x 时，个体的生长率为 r_x，则历经表型轨迹 $\tilde{x}$ 的个体其期望后代数目为：

$$N_{\tilde{x}} = \exp(r_{x_n}(t_f - t_n)) \cdot \prod_{l=0}^{n-1} \left(\exp\left(r_{x_l} (t_{l+1} - t_l) + d_{x_{l+1} x_l} \right) \right) = \exp\left[\sum_x r_x \tau_x(\tilde{x}) + \sum_{x \neq x'} d_{xx'} n_{xx'}(\tilde{x}) \right]$$

$\tau_x(\tilde{x})$ 是在 x 上的驻留时间，而 $n_{xx'}(\tilde{x})$ 为 $x' \to x$ 的跳跃次数。

显然，一个种群表型路径的概率可用前述主方程路径的概率测度写出，从而 t_f 时刻该种群数目 $N^{tot}(t_f) = \int \mathcal{D}\tilde{x} \cdot N_{\tilde{x}} \cdot P_{\tilde{x}} \cdot N^{tot}(t_0)$。

增长率 $\Lambda = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \ln \langle N_{\tilde{x}} \rangle = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \ln \left\langle \exp\left[\sum_x r_x \tau_x(\tilde{x}) + \sum_{x \neq x'} d_{xx'} n_{xx'}(\tilde{x}) \right] \right\rangle$ 它只含 $\tau(\tilde{x})$ 和 $n_{xx'}(\tilde{x})$ 的 scaled CGF，从而可计算其 rate function $\mathcal{I}(f,k)$。

有：$\Lambda = \psi^{(\tau,n)}(r,d) = \sup_{f_x} \left[\sum_x r_x f_x + \sum_{x \neq x'} d_{xx'} k_{xx'} f_{x'} - \mathcal{I}(k,f) \right]$。极值处的 k 有其他用处。