arXiv:2611.32130v1 [cond-mat.stat-mech] 24 Nov 2026

网络拓扑对集体非平衡响应施加谱约束

Dingjie Wu（吴丁杰），[1,2] Yaozu Wang，[3] Rong Wang，[1,2,*] 和 Ying Wu[1,2,†]

[1] *State Key Laboratory for Strength and Vibration of Mechanical Structures,Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China*[2] *School of Aerospace Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China*

[3] *College of Intelligence Science and Technology, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*（日期：2026年11月25日）

朗之万系统中的集体非平衡动力学既取决于网络拓扑，也取决于随机驱动。理解拓扑在对随机驱动的响应及非平衡态形成中的作用至关重要。基于微观可逆性原理以及网络上的线性朗之万动力学，我们推导出稳态下短时交叉相关的不对称性和热流的模态分解。该分解揭示了非平衡的两个来源——单个模态的涨落，以及不同模态之间的相关涨落。对于具有独立局部驱动的互易网络，我们推导出两个非平衡响应算子，可给出全局不对称强度和熵产生率的显式表达式。这些算子是与随机驱动无关的加权拉普拉斯矩阵。它们的谱决定了在驱动异质性固定时非平衡水平可达到的上界和下界。对于任意偏离平衡态的情况，这些界对不对称强度都是精确的；对于熵产生率，在平衡态附近则在领先阶成立。最后，我们发现，人类结构连接组的层级模块化组织拓宽了大脑的非平衡工作范围，而静息态脑活动表明，这种拓扑优势有助于维持较低的非平衡水平。我们的研究为理解生物网络组织以及设计具有目标非平衡工作点的网络奠定了基础。

I. 引言

许多复杂系统处于非平衡状态，并可使用朗之万动力学 [1–4]进行建模。在此类系统中，组成单元之间的确定性相互作用与随机驱动共同决定集体动力学，例如，具有内禀生化噪声 [5, 6], 的基因调控网络、由随机活性力 [7, 8]驱动的活性物质，以及接收带噪突触输入 [9, 10]的神经系统。随机驱动激发局部涨落，这些涨落通过单元间的相互作用传播至整个系统，并可产生集体非平衡动力学 [11–13]。在稳态下，这些动力学的特征体现为熵产生率 [14], 、持续热流 [15]和时间反演不对称性 [16]。

从结构上看，不同的网络拓扑会限制局部涨落如何汇聚为集体涨落 [17–19]。近几十年来，通过利用随机驱动放大或抑制涨落 [20–23], 、调节耗散 [24–28] 并提高热力学效率 [29–31], 调控物理系统和生物系统中的网络拓扑，已成为调节集体非平衡行为的有效手段。这些研究表明，可以调节网络拓扑，以实现对随机驱动的特定响应，从而限制系统的非平衡运行范围。然而，网络拓扑调节系统对随机驱动响应的机制及其对集体非平衡动力学的限制作用仍不清楚。理解这些机制将有助于指导人工网络的最优设计，并揭示生物网络在非平衡运行中所具有的结构优势 [32–34]。

从动力学角度看，复杂的网络拓扑决定了支撑一组不同内禀模态 [35–38], 的确定性网络动力学，而集体涨落则可能源于驱动对多个模态的联合激发 [39–41]。有趣的是，不同模态的统计相关涨落与多种非平衡现象 [11, 42–45]密切相关。这种相关性可能源于非正规网络动力学中模态的非正交性 [42, 43]。即使模态彼此正交，空间相关或异质的随机驱动也能使不同模态的激发产生相关性，例如细胞骨架网络中的随机活性力 [11] 以及胶体布朗陀螺中的各向异性噪声 [44]所展示的情形。当两个相关模态以不同速率弛豫时，其滞后交叉相关会因后被观测的模态不同而以不同方式衰减，从而揭示时间反演不对称性

集体动力学中的对称性 [46]。这些观察表明，网络拓扑可能通过不同模态对随机驱动的相关响应，约束集体非平衡动力学。

在本研究中，我们基于微观可逆性原理以及网络上的线性朗之万动力学，首先确定了集体非平衡动力学的两个来源：时间反演不对称性，分别存在于 (i) 单个模态的涨落 和 (ii)两个模态之间的相关涨落中。这种模态表示将短时交叉

* 联系作者：tobous@mail.xjtu.edu.cn
† 联系作者：wying36@xjtu.edu.cn

相关性和稳态热流的不对称性加性分解为两个部分。对于具有独立局部驱动的互易网络，我们推导出两个用于描述全局不对称强度 ω 和熵产生率σ的非平衡响应算子。这两个算子都是由网络动力学决定、且独立于所施加驱动的加权拉普拉斯矩阵。在异质驱动强度固定时，它们的谱给出了 ω 在任意偏离平衡态情况下的精确上下界，以及 σ 在近平衡态下的首阶上下界。广义谱进一步确定了 ω/σ在近平衡态下的上下界。相应的特征向量确定了能够达到这些界限的随机驱动模式。

我们将这一理论框架应用于合成的层级模块化网络，以及利用来自 993 名参与者的弥散加权成像（DWI）数据重建的人类结构连接组。层级组织和多尺度连接权重拓宽了非平衡运行范围，揭示了自然界中广泛存在的层级模块化网络具有非平衡优势。此外，利用静息态功能磁共振成像（fMRI）数据，我们发现静息时特定的随机驱动模式有助于将脑活动维持在较低的非平衡水平，为静息态脑活动中报告的低非平衡水平提供了一种可能的动力学解释 [47, 48]。我们的研究量化了网络拓扑如何约束随机驱动下的集体非平衡响应，为理解生物网络组织以及设计具有理想工作点和运行范围的网络奠定了基础。

II. 集体非平衡响应的拓扑约束

A. 网络上的线性朗之万动力学

我们考虑一个由 N 个节点组成的网络，其动力学遵循过阻尼线性朗之万方程

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = -\mathbf{A}\mathbf{x}(t) + \boldsymbol{\eta}(t), \tag{1}$$

其中$\mathbf{x}(t)$汇集了各节点变量。矩阵$\mathbf{A}$ 表示相互作用网络，例如活性物质中的粒子间相互作用 [12]或神经元之间的突触耦合 [49]。我们假设$\mathbf{A}$ 的所有特征值实部均为正，以确保系统弛豫至唯一的稳态。这类线性动力学也可作为稳定定点附近非线性动力学的局部近似，其中$\mathbf{x}(t)$表示相对于该定点的偏差，$-\mathbf{A}$ 表示在该点处评估的确定性动力学的雅可比矩阵 [50–52]。随机驱动 $\boldsymbol{\eta}(t)$为高斯白噪声，均值为零，协方差为$\langle \boldsymbol{\eta}(t)\boldsymbol{\eta}^{\mathrm{T}}(t')\rangle = 2\mathbf{D}\,\delta(t-t')$，其中$\mathbf{D}$ 是对称正定的扩散矩阵。其对角元 D_{ii}规定了局部驱动强度，而非对角元 D_{ij} 则描述不同节点间驱动的空间相关性。

B. 集体非平衡动力学的模态分解

稳态下的时滞协方差定义为$\mathbf{C}_x(\tau) = \langle \mathbf{x}(t+\tau)\mathbf{x}^{\mathrm{T}}(t)\rangle_0$，其中 $\langle\cdot\rangle_0$ 表示稳态平均。对于方程（1）中的线性动力学，$\mathbf{C}_x(\tau) = \mathbf{G}(\tau)\mathbf{C}_0$，其中 $\tau \geq 0$，而$\mathbf{G}(\tau) = e^{-\mathbf{A}\tau}$是网络传播子，且$\mathbf{C}_0 = \mathbf{C}_x(0)$是零时滞协方差。对于时间反演下为偶的变量，微观可逆性原理要求在平衡态 [53, 54]下，对所有 $\tau > 0$ 均有$\mathbf{C}_x(\tau) = \mathbf{C}_x^{\mathrm{T}}(\tau)$。在非平衡稳态下，对至少一个 $\tau > 0$而言，这种对称性会被破坏，

$$\mathbf{C}_x(\tau) \neq \mathbf{C}_x^{\mathrm{T}}(\tau). \tag{2}$$

零滞后协方差 $\mathbf{C}_0$ 满足 Lyapunov 方程 [55–57],

$$\mathbf{A}\mathbf{C}_0 + \mathbf{C}_0\mathbf{A}^{\mathrm{T}} = 2\mathbf{D}. \tag{3}$$

将其积分解代入 $\mathbf{C}_x(\tau) = \mathbf{G}(\tau)\mathbf{C}_0$,式（2）可得

$$\int_0^\infty e^{-\mathbf{A}(t+\tau)}\mathbf{D}e^{-\mathbf{A}^{\mathrm{T}}t}\,\mathrm{d}t \neq \int_0^\infty e^{-\mathbf{A}t}\mathbf{D}e^{-\mathbf{A}^{\mathrm{T}}(t+\tau)}\,\mathrm{d}t. \tag{4}$$

对于可对角化的 $\mathbf{A} = \mathbf{U}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{U}^{-1}$，$\mathbf{U} = (\mathbf{U}_1, \ldots, \mathbf{U}_N)$由右特征向量组成，而 $\boldsymbol{\Lambda} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_N)$包含相应的特征值。模态坐标 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{x}(t)$满足

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = -\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{y}(t) + \boldsymbol{\xi}(t), \tag{5}$$

其中 $\boldsymbol{\xi}(t) = \mathrm{U}^{-1}\boldsymbol{\eta}(t)$满足 $\langle \boldsymbol{\xi}(t)\boldsymbol{\xi}^{\dagger}(t')\rangle = 2\boldsymbol{\Gamma}\delta(t-t')$。这里，$\boldsymbol{\Gamma} = \mathrm{U}^{-1}\mathrm{D}\mathrm{U}^{-\dagger}$ 是模态扩散矩阵，$\dagger$表示共轭转置。尽管在这些坐标下确定性动力学彼此解耦，变换后的驱动仍可能通过 $\boldsymbol{\Gamma}$ 的非对角元在模态之间保持相关。模态涨落的滞后协方差为 $\mathrm{C}_y(\tau) = \langle \mathrm{y}(t+\tau)\mathrm{y}^{\dagger}(t)\rangle_0 = \mathrm{U}^{-1}\mathrm{C}_x(\tau)\mathrm{U}^{-\dagger}$。由于 U 可逆，$\mathrm{C}_x(\tau)$ 为对称矩阵当且仅当 $\mathrm{C}_y(\tau)$ 为厄米矩阵，因此式（4）等价于

$$\int_0^\infty e^{-\boldsymbol{\Lambda}(t+\tau)}\boldsymbol{\Gamma}e^{-\boldsymbol{\Lambda}^{\dagger}t}\,\mathrm{d}t \neq \int_0^\infty e^{-\boldsymbol{\Lambda}t}\boldsymbol{\Gamma}e^{-\boldsymbol{\Lambda}^{\dagger}(t+\tau)}\,\mathrm{d}t. \tag{6}$$

对角元 $C_{y_iy_i}(\tau) = (\Gamma_{ii}/\,\mathrm{Re}\;\lambda_i)e^{-\lambda_i\tau}$表征单个模态的涨落。非对角元 $C_{y_iy_j}(\tau) = 2\Gamma_{ij}e^{-\lambda_i\tau}/(\lambda_i + \lambda_j^*)$ 表征不同模态之间的相关涨落。比较两种时间排序下的这些协方差可得

$$\frac{C_{y_iy_i}(\tau)}{C^*_{y_iy_i}(\tau)} = e^{-2\mathrm{i}\,\mathrm{Im}\,\lambda_i\,\tau}, \qquad \frac{C_{y_iy_j}(\tau)}{C^*_{y_jy_i}(\tau)} = e^{(\lambda_j^* - \lambda_i)\tau}, \tag{7}$$

其中，$*$ 表示复共轭，第二个比值定义为 $i \neq j$，其中 $\Gamma_{ij} \neq 0$。在平衡态下，对于所有 $\tau > 0$，两个比值都必须等于 1。单个模态的涨落会对时间反演

不对称性作出贡献，当 $\mathrm{Im}\,\lambda_i \neq 0$。在这种情况下，协方差在两种时间排序下获得相反的相位。这一贡献要求特征值为复数，因此只可能出现在满足$\mathbf{A} \neq \mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ [19]的非互易网络中。当 $\Gamma_{ij} \neq 0$ 且 $\lambda_i \neq \lambda_j^*$时，不同模态之间的相关涨落会对时间反演不对称性作出贡献。第一个条件确保模态之间存在非零相关性，第二个条件则意味着这些相关性以不同速率衰减，或在两种时间排序下获得不同相位。非零的 Γ_{ij} 可能源于非正规网络中的模态非正交性（对于某个 $k \neq \ell$，$\mathbf{U}_k^{\dagger}\,\mathbf{U}_\ell \neq 0$ ） [42, 43] ，也可能源于具有空间结构的随机驱动（$\mathbf{D} \not\propto \mathbf{I}$） [11, 44], ，二者均编码在 $\mathbf{\Gamma} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{U}^{-\dagger}$中。补充材料（SM） [58] 中提供了进一步的讨论和示例。

这种模态表示将非平衡可观测量分解为来自单个模态涨落以及模态间相关涨落的加和贡献。我们首先考察短时交叉相关的不对称性 [16, 59],

$$\mathbf{\Omega} = \lim_{\tau \to 0^+} \frac{\mathbf{C}_x(\tau) - \mathbf{C}_x^{\mathrm{T}}(\tau)}{2\tau}, \tag{8}$$

其中，$\Omega_{mn} = \langle x_m(\mathbf{Ax})_n - x_n(\mathbf{Ax})_m \rangle_0/2$ 是联合轨迹在（x_n, x_m）平面上单位时间扫过的平均有向面积。它可以直接根据实验多变量时间序列中的短滞后协方差估算。将上述协方差的短时极限与李雅普诺夫方程结合，可得其谱形式

$$\mathbf{\Omega} = \sum_{i,j=1}^{N} \frac{\lambda_j^* - \lambda_i}{\lambda_i + \lambda_j^*} \Gamma_{ij} \mathbf{U}_i \mathbf{U}_j^{\dagger}. \tag{9}$$

含有 $i = j$ 的项描述单个模态涨落的贡献，而含有 $i \neq j$ 的项则描述不同模态间相关涨落的贡献。因子 Γ_{ij} 表示模态坐标中的驱动协方差，而特征值决定由此产生的涨落对时间反演不对称性的贡献。类似的分解也适用于任意 $\tau > 0$ 下滞后交叉相关$\mathbf{C}_x(\tau) - \mathbf{C}_x^{\mathrm{T}}(\tau)$的不对称性（附录A）。这种谱表示还将短时交叉相关的不对称性与近期推导出的一般化涨落—耗散关系中违反项的 $\tau \to 0^+$ 极限联系起来 [42] （附录 B）。

此外，稳态热流为集体非平衡动力学提供了一种互补的热力学度量 [15]。将迁移率设为单位值后，确定性力在节点 m 处做的平均功率为 $J_m = -\langle (\mathbf{Ax})_m \circ \dot{x}_m \rangle_0$，其中
$\circ$ 表示Stratonovich乘积。当驱动来自相互独立的局域热库时， J_m 表示从节点 m 流入其热库 [60–62]的平均热流。对于一般的扩散矩阵$\mathbf{D}$，我们使用李雅普诺夫方程计算平均值，得到

$$\mathbf{J} = \mathrm{diag}\big(\mathbf{A}\mathbf{C}_0\mathbf{A}^{\mathrm{T}} - \mathbf{A}\mathbf{D}\big) = \mathrm{diag}(\mathbf{A}\mathbf{\Omega}), \tag{10}$$

其中 $\mathbf{J} = (J_1, \ldots, J_N)^{\mathrm{T}}$ （推导过程见附录 C）。该关系将节点热流与短时协方差不对称性直接联系起来。代入式（9）得

$$\mathbf{J} = \sum_{i,j=1}^{N} \frac{\lambda_i(\lambda_j^* - \lambda_i)}{\lambda_i + \lambda_j^*} \Gamma_{ij} \left(\mathbf{U}_i \odot \mathbf{U}_j^*\right), \tag{11}$$

其中 $\odot$ 表示哈达玛积。因此，热流也可以类似地分解为单个模态涨落以及不同模态间相关涨落的贡献。与式（9）相比，额外因子 λ_i 对这些贡献赋予了不同的权重，因此，短时交叉相关的不对称性和热流反映了同一集体涨落的不同方面。

C. 非平衡响应算符与谱界

基于上述两个非平衡可观测量，我们现在推导出全局度量，以量化系统偏离平衡态的程度。考虑具有独立随机驱动$\mathbf{A} = \mathbf{A}^{\mathrm{T}} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{U}^{\mathrm{T}}$ 的互易网络，其中$\mathbf{D} = \mathrm{diag}(\mathbf{d})$, 其中$\mathbf{d} = (d_1, \ldots, d_N)^{\mathrm{T}}$且 $d_m > 0$。均匀驱动会产生平衡态, 而耦合节点之间的 d_m 差异则构成非平衡驱动，这类似于热库之间的温差 [1, 14]。为了量化异质驱动引起的时间反演不对称性，我们定义全局不对称强度为 $\omega = \|\mathbf{\Omega}\|_{\mathrm{F}}^2 = \sum_{m,n}\Omega_{mn}^2$。每个元素$\Omega_{mn}$ 衡量节点 m 与n [13, 63, 64]之间短时交叉相关的不对称性。我们还利用稳态下的熵产生率$\sigma = \sum_m J_m/d_m$来量化热力学耗散，其中 J_m 是流入节点 m [1, 14]处局部热库的平均热流。这两个全局非平衡度量均可用局部驱动强度之差表示,

$$\begin{aligned} \omega &= -\sum_{m<n} \Theta_{mn}^{\Omega}(d_m - d_n)^2, \\ \sigma &= -\sum_{m<n} \Theta_{mn}^{\mathrm{J}} \frac{(d_m - d_n)^2}{d_m d_n}. \end{aligned} \tag{12}$$

矩阵 $\mathbf{\Theta}^{\Omega}$ 和 $\mathbf{\Theta}^{\mathrm{J}}$ 定义了两个非平衡响应算子，将异质驱动与这些非平衡度量联系起来。对于 $\alpha \in \{\Omega, \mathrm{J}\}$，它们的非对角元为

$$\Theta_{mn}^{\alpha} = -2\int_0^{\infty} w^{\alpha}(t) \big[(\mathbf{A}\mathbf{G}(t))_{mn}\big]^2 \,\mathrm{d}t, \tag{13}$$

其中 $w^{\Omega}(t)=2t$， $w^{\mathrm{J}}(t)=1$。它们等价地分解为模态对后可写作

$$\boldsymbol{\Theta}^{\alpha}=\sum_{i<j}\kappa_{ij}^{\alpha}\boldsymbol{\psi}_{ij}, \tag{14}$$

其中 $\boldsymbol{\psi}_{ij}=(\mathbf{U}_i\odot\mathbf{U}j)(\mathbf{U}_i\odot\mathbf{U}j)^{\mathrm{T}}$, $\kappa_{ij}^{\Omega}=2(\lambda_i-\lambda_j)^2/(\lambda_i+\lambda_j)^2$ 以及 $\kappa_{ij}^{\mathrm{J}}=(\lambda_i-\lambda_j)^2/(\lambda_i+\lambda_j)$。这两个算子都是仅由网络结构$\mathbf{A}$ 决定的半正定加权拉普拉斯矩阵（见附录 D）。重要的是，全局不对称强度 ω 是驱动强度$\mathbf{d}$的精确二次型。在接近平衡的状态下，或者等价地，对于弱非均匀驱动$\mathbf{d}=\mathbf{1}+\delta\mathbf{d}$ 且满足 $\|\delta\mathbf{d}\|\ll 1$时，将式（12）在均匀驱动附近展开，也可得到熵产生率的首阶二次型，

$$\begin{aligned}\omega&=\sum_{i<j}\kappa_{ij}^{\Omega}\Gamma_{ij}^2=\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Theta}^{\Omega}\mathbf{d},\\ \sigma&\simeq\sum_{i<j}\kappa_{ij}^{\mathrm{J}}\Gamma_{ij}^2=\delta\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Theta}^{\mathrm{J}}\delta\mathbf{d},\end{aligned} \tag{15}$$

其中 $\Gamma_{ij}=(\mathbf{U}_i\odot\mathbf{U}j)^{\mathrm{T}}\mathbf{d}=(\mathbf{U}_i\odot\mathbf{U}j)^{\mathrm{T}}\delta\mathbf{d}$，其中 $i\neq j$（见附录 E）。这些二次型仅包含不同弛豫率的不同模态之间相关涨落所产生的非负贡献。利用谱分解

$$\boldsymbol{\Theta}^{\alpha}=\sum_{r=1}^{N}\mu_r^{\alpha}\mathbf{v}_r^{\alpha}(\mathbf{v}_r^{\alpha})^{\mathrm{T}}, \tag{16}$$

我们得到正交归一模态 $\mathbf{v}_r^{\alpha}$，其谱按序排列为 $0=\mu_1^{\alpha}\le\mu_2^{\alpha}\le\cdots\le\mu_N^{\alpha}=\mu_{\max}^{\alpha}$。第一个均匀模态 $\mathbf{v}_1^{\alpha}=\mathbf{1}/\sqrt{N}$ 对应于均匀随机驱动$\mathbf{d}\propto\mathbf{1}$，不会对非平衡态产生贡献。具有正特征值的模态定义了可激发模态，可由非均匀随机驱动 $\delta\mathbf{d}\perp\mathbf{1}$激发，其中 $\omega=\sum_{r=2}^{N}\mu_r^{\Omega}[(\mathbf{v}_r^{\Omega})^{\mathrm{T}}\delta\mathbf{d}]^2$和 $\sigma\simeq\sum_{r=2}^{N}\mu_r^{\mathrm{J}}[(\mathbf{v}_r^{\mathrm{J}})^{\mathrm{T}}\delta\mathbf{d}]^2$。与此同时，仅由网络结构决定的非平衡响应算子，对系统偏离平衡态的总体程度施加了根本性约束。当每个算子的唯一零模都是均匀模态时，瑞利商给出以下适用于任意非零 $\delta\mathbf{d}$ 的界限，

$$\begin{aligned}\mu_{\min+}^{\Omega}&\le\frac{\omega}{\delta\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\delta\mathbf{d}}\le\mu_{\max}^{\Omega},\\ \mu_{\min+}^{\mathrm{J}}&\lesssim\frac{\sigma}{\delta\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\delta\mathbf{d}}\lesssim\mu_{\max}^{\mathrm{J}},\end{aligned} \tag{17}$$

其中，$\mu_{\min+}^{\alpha}$ 和 $\mu_{\max}^{\alpha}$ 分别是 $\boldsymbol{\Theta}^{\alpha}$的最小正特征值和最大特征值。$\omega$ 的界限是精确的，而 σ 的界限仅在平衡态附近近似成立。若所得驱动强度在每个节点都满足 $d_m>0$，则相应的极值随机驱动模式为 $\delta\mathbf{d}\propto\mathbf{v}_{\min+}^{\alpha}$ 和 $\delta\mathbf{d}\propto\mathbf{v}_{\max}^{\alpha}$。在平衡态附近，这两个非平衡响应算子还约束

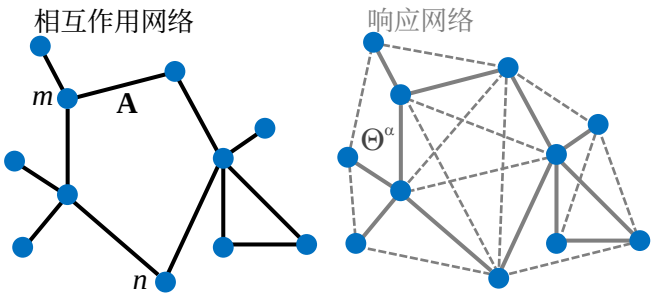

图1. 非平衡响应算子的网络表示。黑色实线（左侧）表示由 $\mathbf{A}$ 描述的直接相互作用。灰色线条（右侧）表示 $\boldsymbol{\Theta}^{\alpha}$ 的选定非零非对角元，其中 $\alpha\in\{\Omega,\mathrm{J}\}$。灰色实线连接直接相互作用的节点，灰色虚线则连接没有直接相互作用的节点，例如 m 和 n。响应算子仅取决于 $\mathbf{A}$，与随机驱动无关，并且纳入了通过直接和间接相互作用的传播。因此，即使相互作用网络是稀疏的，其对应的响应网络通常仍是稠密的。

单位熵产生率对应的全局不对称强度，

$$\rho_{\min}\lesssim\frac{\omega}{\sigma}\lesssim\rho_{\max}, \tag{18}$$

其中，$\rho_{\min}$ 和 $\rho_{\max}$ 分别是 $\boldsymbol{\Theta}^{\Omega}\boldsymbol{\ell}_r=\rho_r\boldsymbol{\Theta}^{\mathrm{J}}\boldsymbol{\ell}_r$ 在子空间 $\boldsymbol{\ell}_r\perp\mathbf{1}$上的最小和最大广义特征值。这些界在平衡态附近近似成立，对应的极值随机驱动模式为 $\delta\mathbf{d}\propto\boldsymbol{\ell}_{\min}$ 和 $\delta\mathbf{d}\propto\boldsymbol{\ell}_{\max}$（见附录 F）。补充材料 [58] 的图 S1 展示了对方程（17）和（18）中的界进行的数值验证。

这些结果共同表明，网络拓扑如何约束随机驱动下集体非平衡响应的范围。该映射$\mathbf{A}\mapsto\{\boldsymbol{\Theta}^{\mathrm{J}},\boldsymbol{\Theta}^{\Omega}\}$ 将结构效应与施加的驱动分离开来。通过网络传播子，这些非平衡响应算子纳入了节点之间通过直接和间接相互作用产生的动力学传播；即使底层网络是稀疏的，它们通常也是稠密的 [图 1]。其特征向量$\mathbf{v}_r^{\alpha}$确定了随机驱动模式。在异质驱动强度固定时，它们的谱 $\{\mu_r^{\alpha}\}$ 决定了平衡态附近全局不对称性强度和熵产生率可达到的上界与下界。这些界限对于 ω 是精确的，而对于 σ，在平衡态附近则是近似的。广义谱 $\{\rho_r\}$ 进一步确定了平衡态附近 ω/σ 的近似范围，相应的极值驱动模式由 $\boldsymbol{\ell}_{\min}$ 和 $\boldsymbol{\ell}_{\max}$给出。

III. 分层模块网络与人脑

现在，我们可以利用这两个非平衡响应算子来比较不同网络拓扑如何影响集体非平衡动力学，重点考察它们的谱 $\{\mu_r^\alpha\}$、广义谱 $\{\rho_r\}$ 以及相关的极值随机驱动模式。层次模块化网络尤其值得关注；这类网络广泛存在于自然界中，也包括人类结构连接组 [65, 66]。在这些网络中，强连接的节点群组形成弱耦合模块，并在多个尺度上嵌套于逐步扩大的模块之中 [图 2(a)]。研究表明，这类拓扑能够带来多种功能优势 [65, 66], ，但其对非平衡运行的潜在益处仍不清楚。更重要的是，先前研究表明，静息态脑活动维持在特定的非平衡态中 [48, 67]。由于人们认为脑活动受到其底层结构连接网络的强烈约束 [66]，这些发现引出了一个问题：哪些内禀模态被激发，从而维持这些非平衡态？为回答这两个问题，我们考虑无向网络上的扩散动力学。该网络具有非负邻接矩阵 $\mathbf{W}$，其描述为$\mathbf{A} = \gamma\mathbf{I} + g\mathbf{L}$ [17, 20, 23]。这里，$\mathbf{L} = \mathbf{diag(W1)} - \mathbf{W}$ 是图拉普拉斯矩阵，而γ 和 g 分别表示局部弛豫率和全局耦合强度。对于$\gamma, g > 0$，动力学是稳定的。为比较不同网络，我们固定 γ 和g ，并使它们的布线成本相匹配。对于静息态脑活动，我们推断随机驱动模式，并探究哪些内禀模态被激活，以维持这些特定的非平衡态。

A. 合成分层模块网络

我们首先构建二值合成分层模块网络，从具有三个嵌套模块层级的 H_3 到均匀随机网络 H_0 [Fig. 2(a)]。随着从 H_3 到 H_0, 逐步移除分层级别，两个谱 $\{\mu_r^\alpha\}$ 变得更加集中，因为它们的下界 $\mu^{\Omega}_{\min+}$和 $\mu^{\mathrm{J}}_{\min+}$均有所提高，而上界则相对保持不变 [Fig. 2(b,c)]。与此同时，上广义界 $\rho_{\max}$ 降低[Fig. 2(d)]。对于这些扩散动力学，弛豫模态是满足$\mathbf{L}\mathbf{U}_i = k_i\mathbf{U}_i$的正交归一拉普拉斯模态，其中 $0 = k_1 < k_2 \le \cdots \le k_N$和$\lambda_i = \gamma + gk_i$。随着分层级别被移除，拉普拉斯下界 k_2 也会提高 [Fig. 2(e)]。对于 H_3–H_1, 各类网络的平均网络，极值随机驱动模式反映了模块划分 [Fig. 2(f– h)]。具体而言，$\mathbf{v}^{\Omega}_{\min+}$、$\mathbf{v}^{\mathrm{J}}_{\min+}$和 $\boldsymbol{\ell}_{\max}$ 都与菲德勒模态 $\mathbf{U}_2$，紧密吻合，该模态与代数连接性 k_2相关。此模态描述最慢的非均匀弛豫，并用于谱划分以识别耦合较弱的模块 [68]。随机 H_0 网络中，这些驱动模式与菲德勒模态之间没有类似的共同吻合关系 [Fig. 2(i)]。

在理想层次网络中，这种对齐是精确的：两个下响应界和上广义界均由同一个驱动方向 $\delta\mathbf{d} \parallel \mathbf{v}^{\Omega}_{\min+} \parallel \mathbf{v}^{\mathrm{J}}_{\min+} \parallel \boldsymbol{\ell}_{\max} \parallel \mathbf{U}_2$ 达到。例如，理想 H_3 的两个规模相等的最大模块之间存在均匀耦合。沿$\mathbf{U}_2$ 驱动，会使这两个模块之间的驱动强度不同，同时保持各模块内部的强度均匀。由此产生的非平衡响应仅由均匀模态$\mathbf{U}_1 = \mathbf{1}/\sqrt{N}$ 与菲德勒模态$\mathbf{U}_2$之间的相关涨落贡献。相应的谱界为 $\mu^{\Omega}_{\min+} = 2(gk_2)^2/[N(2\gamma+gk_2)^2]$,$\mu^{\mathrm{J}}_{\min+} = (gk_2)^2/[N(2\gamma+gk_2)]$, 和 $\rho_{\max} = 2/(2\gamma+gk_2)$（见附录 G）。因此，增大 k_2 会同时提高两个下响应界，并降低上广义界，这与移除分层级别时观测到的谱变化一致。

B. 人脑结构连接组

接下来，我们考察人脑结构连接组的拓扑如何影响两种非平衡响应算子的谱。利用人类连接组计划中 993 名参与者的 DWI数据 [69]，我们构建了由 360 个皮层区域组成的个体加权无向结构连接（SC）网络，并获得 360×360 邻接矩阵（数据处理详见 SM）。SC 网络呈现模块化组织，具有多个嵌套层级 [图 3(a)]。更重要的是，SC 网络呈现多尺度连接权重，其中以弱连接为主（例如，平均而言，93。9% 的权重低于 10^{-2} ），强连接仅占很小比例 [图 3(b)]。为考察 SC 网络是否也呈现宽广的谱界，我们用其构建两类替代网络。（i）在层次模块随机化（HMR）中，每个层次 H_n 的模块内现有加权连接，会在该模块内所有可能的节点对之间均匀随机地重新分配，而模块之间的连接保持不变。这会破坏层次 H_{n+1} 的更精细模块化组织，同时保留每个 H_n 模块内的连接数和连接总权重。（ii）在层次模块均质化（HMH）中，非零权重被转换为 $W_{ij}^{(\upsilon)} = \upsilon W_{ij} + (1-\upsilon)W_m$，其中 W_m 是现有连接的平均权重，且$0 \le \upsilon \le 1$。此处， $\upsilon = 1$ 可还原 SC，而 $\upsilon = 0$则使所有现有连接具有均匀权重，同时保留连接位置、连接数和总权重。因此，HMR 会破坏 SC 的层次模块化组织，而 HMH 则会均质化其多尺度连接权重（替代网络的构建方法详见 SM）。

在 HMR 中，随着下界 $\mu^{\Omega}_{\min+}$ 和 $\mu^{\mathrm{J}}_{\min+}$ 增大，两种谱 $\{\mu_r^\alpha\}$ 都变得更加集中，而

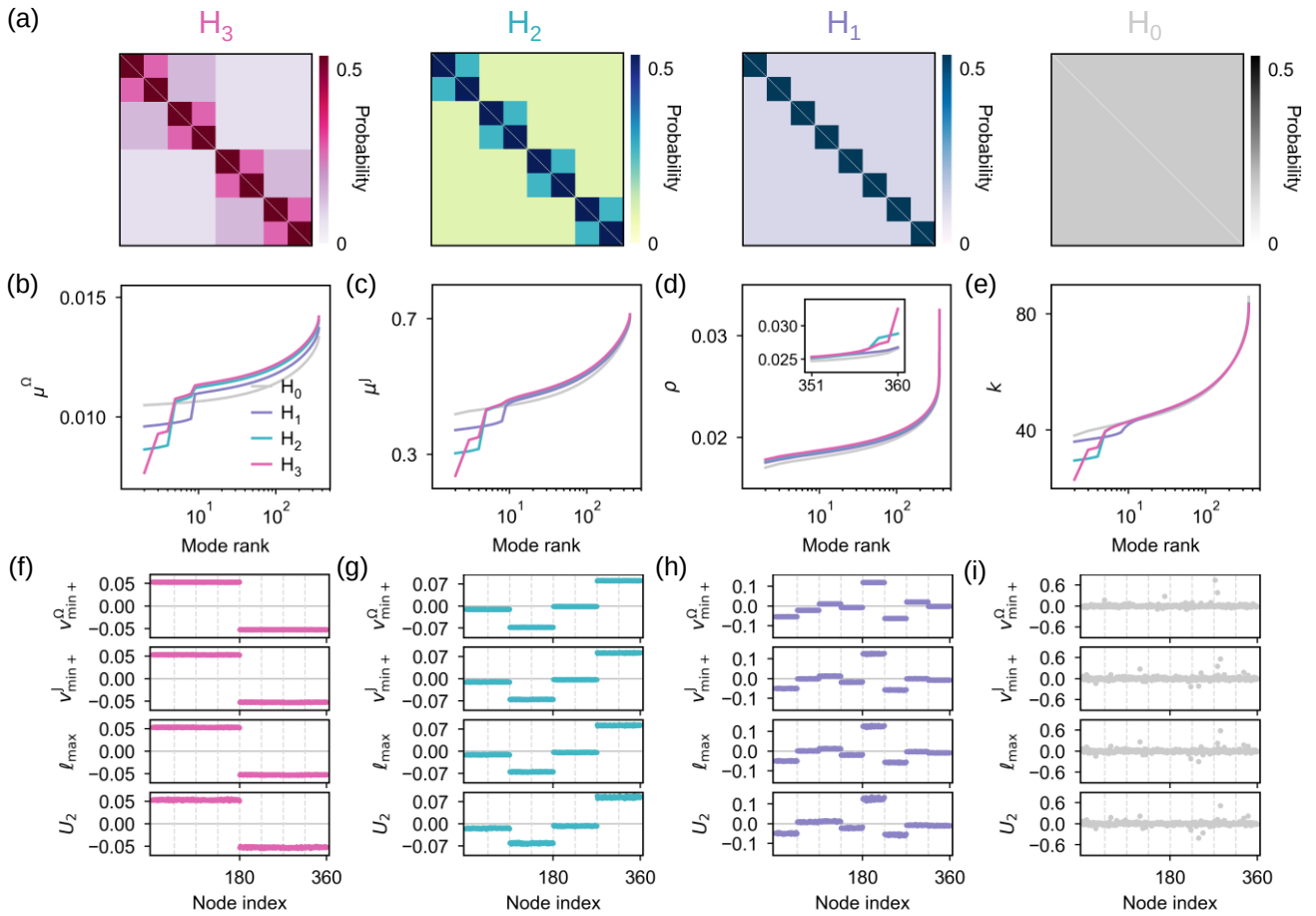

图 2. 合成层次模块化网络中非平衡响应算子的谱和极值随机驱动模式。所有实现均为二值且无向。在 H_3–H_0 中，节点数和连接数固定（网络生成方法见补充材料），$N = 360$ 和平均度 $\langle e \rangle = 60$，从而确保连线成本相同。动力学参数为 $\gamma = g = 1$。(a) 用于生成邻接矩阵 $\mathbf{W}^{H_3}$–$\mathbf{W}^{H_0}$ 的节点对之间连接概率矩阵。H_3 包含三个嵌套层级，分别有 8、4 和 2 个模块。H_2 和 H_1 分别保留较细的两个层级和一个层级，而 H_0 是均匀随机网络。(b–e) 分别为 $\{\mu_r^{\Omega}\}$、$\{\mu_r^{J}\}$、$\{\rho_r\}$ 和 $\{k_i\}$ 的谱。每个实现中的特征值按序排列，并在 100 个实现中按相同秩取平均。响应算子谱和拉普拉斯谱中省略了均匀零模。(d) 中的插图放大显示了上广义界附近的谱。(f–i) H_3–H_0，的极值随机驱动模式，从上到下依次显示 $\mathbf{v}^{\Omega}_{\min+}$、$\mathbf{v}^{J}_{\min+}$、$\boldsymbol{\ell}_{\max}$ 和拉普拉斯菲德勒模态 $\mathbf{U}_2$。对于每个网络类别，首先对相同 100 个实现的邻接矩阵取平均。随后，基于所得的平均网络计算极值驱动模式和菲德勒模态。虚线界定了八个参考组，每组包含 45 个节点。在平均度、网络规模和动力学参数 γ 及 g 变化时，也观察到谱界的类似趋势（补充材料，图 S2–S5）。

它们的上界基本保持不变[图 3(c,d)]。广义谱也变得更窄，主要是由于 $\rho_{\max}$ 减小，而 $\rho_{\min}$ [变化相对较小]图 3(e)]。这些变化与从合成网络中移除分层级别后观察到的情况相似，同时 k_2 有所增加（图 S7）。在 HMH 中，随着上界 $\mu^{\Omega}_{\max}$ 和 $\mu^{J}_{\max}$ 降低，两种谱 $\{\mu_r^{\alpha}\}$ 都变得更加集中，而其下界的变化相对较小 [图 3(f,g)]。广义谱从两端收缩，其中 $\rho_{\min}$ 和 $\rho_{\max}$分别显著上移和下移 [图 3(h)]。完全权重均质化（$\upsilon = 0$）产生最窄的谱范围。随着连接权重变得更加均匀，这些趋势在合成加权层级模块化网络中也得到了重现（图 S6）。

综合合成网络与人类结构连接组的结果表明，在连线成本固定时，层级模块化组织与多尺度连接权重共同拓宽了非平衡运行范围。层级结构使两种响应谱都向更小的非零特征值延伸，而多尺度连接权重则维持了较大的上谱界。

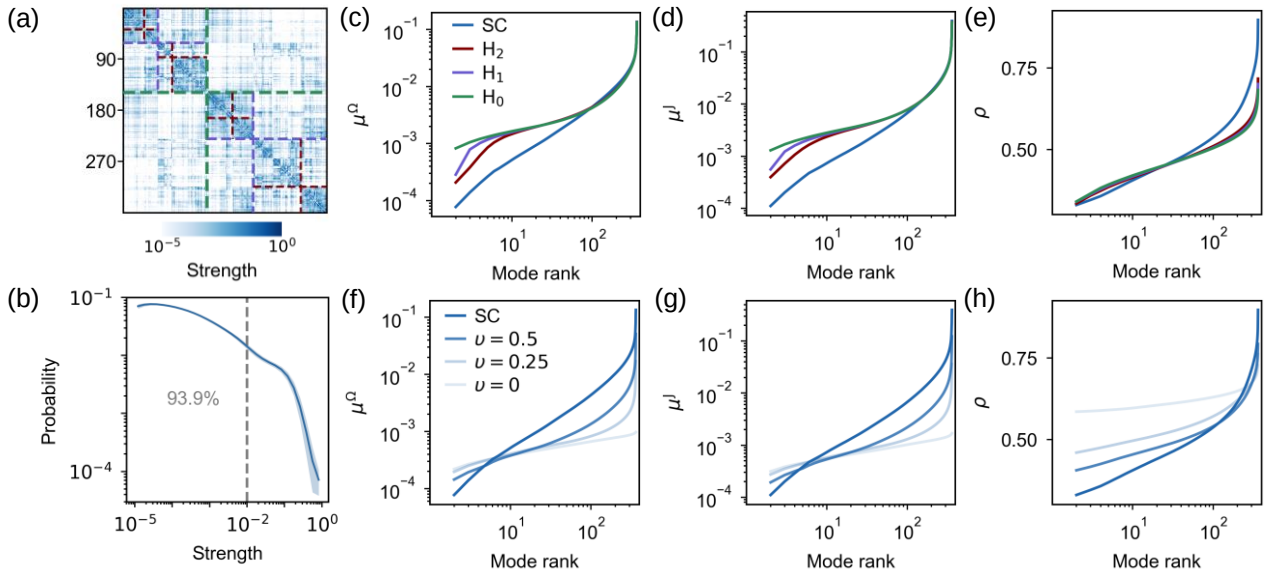

图 3. 人类结构连接组及其替代网络中非平衡响应算子的谱。（a）根据嵌套谱分区 [66]重新排序的一个个体SC网络。虚线标示模块边界。权重按每位参与者的最大连接权重进行归一化。（b）非零连接权重的平均分布，阴影表示参与者之间的一个标准差。虚线标示 10^{-2}，平均而言，93.9%的连接低于该值。（c–e）SC以及层次模块随机化（HMR）替代网络的谱 $\{\mu_r^{\Omega}\}$、 $\{\mu_r^{\mathrm{J}}\}$和 $\{\rho_r\}$。HMR在更细的模块（H_2）、两个最大的模块（H_1）或整个网络（H_0）内随机重新分配现有的加权连接，同时保留所选模块之间的连接。（f–h）层次模块均质化（HMH）替代网络的对应谱。HMH在保留连接位置的同时，将非零权重调整至趋近于整个网络的平均值。逐渐变浅的蓝色曲线表示 $\upsilon = 1$ （SC）、0.5、0.25和0，其中 $\upsilon = 0$ 为所有现有连接赋予统一权重。每个替代网络均保留其经验对应网络的连接数和总权重。所有网络均包含 $N = 360$ 个皮层区域，其扩散动力学为$\mathbf{A} = \gamma\mathbf{I} + g\mathbf{L}$ 和 $\gamma = g = 1$。特征值在每位参与者内部排序，并在993位参与者中按每个秩次取平均。

在驱动异质性固定时，这些互补效应使全局不对称强度既能更低也能更高，并拓宽了平衡态附近熵产生率的范围。层级结构还提高了广义谱的上界，而多尺度连接权重则降低了其下界，从而拓展了平衡态附近单位熵产生率所对应的全局不对称强度可达范围。

C. 人类静息态大脑的非平衡动力学

为探究静息态脑活动是否处于非平衡态，我们首先从每位参与者的功能性磁共振成像时间序列中，在多个时滞下估计全局不对称性强度 $\hat{\omega}(\tau)$（附录 H）。实证强度随时滞增加而降低，但在所考察的整个范围内仍高于时间打乱的时间序列。生成这些打乱序列时，我们随机选择比例为 p 的时间点进行打乱，并在所有脑区使用相同的时间打乱方式。将p 从 0.25 增加到 0.5 和 1，会逐步降低强度 [图4(a)], ，这表明自发性静息态脑活动维持着具有时间组织性的非平衡动力学。

接下来，我们利用该模型推断与静息态脑活动相关的随机驱动模式，并考察其在维持这些非平衡动力学中的作用。假设脑区之间存在独立随机驱动，且 $\mathbf{D} = \mathrm{diag}(\mathbf{d})$，通过最小化模型与经验零滞后协方差及单滞后协方差不对称性之间的联合拟合误差，得到最优随机驱动模式 $\mathbf{d}$ 和参数 (γ, g)（附录 H）。最优模式呈现空间异质性，其组平均分布如图所示 [图 4(b)]。最优参数估计值和拟合误差见图 S8。纳入额外滞后的拟合也得到相似的空间驱动模式（图 S9）。为确定这种空间组织如何影响全局不对称强度，我们利用每位参与者的结构连接组和最优的 γ 与 g，重新计算非平衡响应算子$\mathbf{\Theta}^{\Omega}$ 及其谱。保持算子不变，我们将每位参与者最优模式的 $\omega = \mathbf{d}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Theta}^{\Omega}\mathbf{d}$ 与在脑区间对驱动强度进行空间打乱 10^5次后得到的值进行比较。最优模式产生的平均 ω 低于

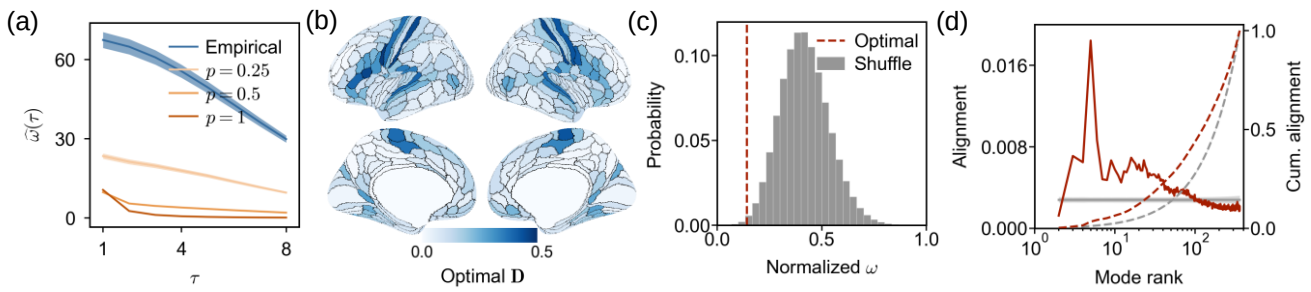

图4. 静息态人脑中的非平衡动力学与推断得到的随机驱动。(a) 根据经验性静息态功能磁共振成像时间序列估算的全局不对称强度 $\widetilde{\omega}(\tau)$（蓝色），以及对时间进行打乱后的序列（橙色渐变），其中 $p = 0.25$、0.5 和 1。随机选取比例为 p 的时间点，在所有脑区间联合打乱。曲线表示参与者均值，阴影表示逐点95%置信区间。(b) 将模型拟合至每位参与者的静息态功能磁共振成像数据后推断出的最优随机驱动模式的组平均值。对每位参与者的区域驱动强度 d_m 进行最小–最大归一化至 $[0, 1]$ 后，再对参与者取平均。(c) 最优驱动模式和空间打乱驱动模式的全局不对称强度 ω。利用最优的 γ 和 g，根据每位参与者的结构连接组重新计算算子 $\mathbf{\Theta}^{\Omega}$。空间打乱会重新分配区域驱动强度，同时保留其分布并固定算子。最优值与 10^5 打乱值 ω 在每位参与者内联合进行最小–最大归一化至 $[0, 1]$。灰色直方图汇集了参与者间归一化后的打乱值，红色虚线表示最优模式的平均归一化强度。我们采用单侧置换检验评估最优模式在参与者间的平均归一化 ω 是否较低；每次置换计算一个组均值。(d) 最优（红色）和空间打乱（灰色）驱动模式与 $\mathbf{\Theta}^{\Omega}$非均匀模态的对齐强度 χ_r。在每位参与者内，非均匀模态按特征值递增排列。实线和虚线分别表示平均对齐强度（左轴）和平均累积对齐强度（右轴）。灰色阴影表示组打乱分布的逐点中心95%区间。结果基于993名参与者和 $N = 360$ 个脑区。补充材料 [58]介绍了磁共振成像采集与处理、皮层分区，以及基于弥散磁共振成像重建结构连接组的方法（所用方法见参考文献 [70–79] ）。

参与者的打乱模式（置换检验，$p < 10^{-4}$） [图4(c)]。最优模式的熵产生率 σ 也较低（图 S10）。为解释这一差异，我们考察最优模式是否更倾向于与特征值较小的 $\mathbf{\Theta}^{\Omega}$相关的内禀模态对齐。由于均匀分量不会对 ω产生贡献，因此对每位参与者，最优模式都以如下方式居中：$\delta\mathbf{d} = \mathbf{d} - d\mathbf{1}$。我们按特征值递增的顺序排列非均匀模态 $r = 2, \ldots, N$，并将其与模态 r 的对齐强度定义为归一化平方投影 $\chi_r = [(\mathbf{v}_r^{\Omega})^{\mathrm{T}} \delta\mathbf{d}]^2 / \|\delta\mathbf{d}\|_2^2$，其中 $\sum_{r=2}^{N} \chi_r = 1$。精确关系 $\omega / \|\delta\mathbf{d}\|_2^2 = \sum_{r=2}^{N} \mu_r^{\Omega} \chi_r$ 表明，在驱动异质性固定的情况下，将对齐从特征值较大的模态转移至特征值较小的模态，会降低全局不对称强度。我们发现，最优模式在谱的低端具有更大的对齐强度，而空间打乱模式在这些模态秩处的对齐强度较低，且平均对齐强度在整个谱上近似均匀。最优模式的累积对齐强度在较低模态秩处也上升得更快[图 4(d)]。纳入额外滞后的拟合在空间打乱和对齐分析中均显示出一致结果（图 S11）。这种优先对齐解释了它们较低的全局不对称强度。因此，随机驱动的这种空间组织可能有助于静息态脑活动维持在相对较低的非平衡水平。

IV. 讨论

随机热力学在解决逆问题方面取得了重大进展，使人们能够从观测到的涨落中推断出非平衡系统潜在的动力学机制和热力学性质。具体而言，先前研究利用电流涨落推断耗散界 [80], ，通过互相关不对称性约束热力学亲和力 [16]，并根据观测到的动力学重构力场和噪声强度 [63,81]。相比之下，尽管先前研究考察了网络拓扑和随机驱动对非平衡系统的影响 [12, 13, 19], ，但网络拓扑本身如何塑造不同随机驱动模式下集体响应这一正向问题，仍未得到充分探索。在此，我们从微观可逆性原理出发，推导出一种模态分解，用以辨析单个模态的涨落以及不同模态间的相关涨落对稳态下短时交叉相关的不对称性和热流的贡献。这将嵌入活性网络中的探针丝 [11] 的模态相关性与关于非正交模态和熵产生的最新研究联系起来 [42]。对 Ornstein–Uhlenbeck过程的补充分析

将稳态熵产生率分解为振荡贡献和非正规贡献 [82]。对于互易线性网络，非平衡响应算子刻画了网络拓扑如何约束不同随机驱动模式下的集体非平衡响应。广义谱进一步将全局不对称强度与近平衡态下的熵产生率联系起来。因此，我们的研究或有助于指导网络拓扑的设计与调节，从而在各种非平衡系统中实现目标工作点和范围 [11, 15]。

人脑连接组呈现出层级模块化组织，这已被证明可带来多种功能优势，包括连接性变化下的动力学稳定性 [83], 、增强的对刺激敏感性 [84] 以及更高的功能多样性 [66]。在此，我们表明，这些优势可扩展至非平衡动力学：层级模块化组织能够拓宽随机驱动下的响应谱，并扩大非平衡运行范围。这一更宽的范围可能有助于容纳静息态和任务相关脑活动期间观察到的不同非平衡状态 [47, 48]。此外，我们的研究结果提示了一种可能的机制，用以解释相较于认知任务，静息时所报告的较低非平衡水平。连接组谐波研究将自发活动与受解剖结构约束的空间模式联系起来 [85], ，而任务研究表明，功能网络在很大程度上保留了静息时存在的内在组织结构 [86]。我们的结果将这种结构与活动之间的联系扩展到了随机驱动的空间组织。推断得到的静息态驱动模式优先与 $\boldsymbol{\Theta}^{\Omega}$ 的模式对齐，这些模式对应较小的特征值。与具有相同区域驱动强度的空间置换相比，推断得到的模式具有更低的全局不对称强度和更低的熵产生率。这种对齐提示了一种可能的机制，用以解释相较于认知任务，静息时所报告的较低非平衡水平 [47, 48]。重新分配区域驱动可能会招募不同的内在模式并调节非平衡水平，从而为与认知需求变化相关的功能重构提供一种可能的动力学基础 [86, 87]。

总之，在驱动异质性固定的情况下，网络拓扑限制了集体非平衡响应的范围，而随机驱动的空间模式则决定了该范围内的运行点。重要的是，非平衡响应算子可支持对具有层级模块化、小世界 [88] 和无标度组织 [89] 的互易线性网络开展更广泛的研究。它们可用于识别扩展或限制非平衡运行范围的结构特征，评估连接性的变化如何改变其边界，并预测重新分配局部驱动如何改变系统的运行点。将这些算子扩展至时间相关驱动 [64], 还将进一步实现对随机输入的空间与时间组织进行联合研究，从而揭示驱动相关时间如何与网络弛豫相互作用，以促进内禀模态的不同贡献。这些发展将为生物系统和工程系统中的网络结构与随机输入如何共同决定非平衡运行状态提供可检验的预测。

致谢

我们感谢 Changsong Zhou 对本研究的启发以及富有见地的讨论。本研究得到国家自然科学基金委员会项目（批准号：12132012、32541016 和 12272292）的资助。

数据可用性

神经影像数据可从人类连接组计划青年成人数据集 [90]获取。本研究生成的数据可在合理请求后向作者索取。

附录A：任意时间滞后下互相关不对称性的模态分解

在稳态下，模态坐标中的零滞后协方差矩阵满足 $\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{C}_y(0) + \mathbf{C}_y(0)\boldsymbol{\Lambda}^\dagger = 2\boldsymbol{\Gamma}$。将这一关系与滞后传播 $\mathbf{C}_{y\,\tau} = \begin{pmatrix} e^{-\boldsymbol{\Lambda}\tau} & 0 \end{pmatrix} \mathbf{C}_y(0)$ 结合，可得模态间互相关，

$$C_{y_i y_j}(\tau) = \frac{2\Gamma_{ij}}{\lambda_i + \lambda_j^*} e^{-\lambda_i \tau}. \tag{A1}$$

通过$\mathbf{C}_x(\tau) = \mathbf{U}\mathbf{C}_y(\tau)\mathbf{U}^\dagger$ y回到节点坐标，可得滞后交叉相关的不对称性，

$$\mathbf{C}_x(\tau) - \mathbf{C}_x^{\mathrm{T}}(\tau) = 2\sum_{i,j=1}^{N} \frac{e^{-\lambda_i \tau} - e^{-\lambda_j^* \tau}}{\lambda_i + \lambda_j^*} \Gamma_{ij} \mathbf{U}_i \mathbf{U}_j^\dagger. \tag{A2}$$

对于任意 $\tau > 0$，这种分解都是精确的。含有 $i = j$ 的项描述了单个模态涨落的贡献，而含有 $i \neq j$ 的项描述了不同模态之间相关涨落的贡献。

为了将这一有限滞后表达式与短时不对称性$\boldsymbol{\Omega}$联系起来，我们使用

$$\lim_{\tau \to 0^+} \frac{e^{-\lambda_i \tau} - e^{-\lambda_j^* \tau}}{\tau} = \lambda_j^* - \lambda_i. \tag{A3}$$

将式（A2）除以 2τ 并取 $\tau \to 0^+$，即可恢复式（9）中 $\boldsymbol{\Omega}$ 的模态分解。

附录 B：短时交叉相关的不对称性与广义涨落-耗散关系

为了将$\mathbf{\Omega}$ 与文献 [42], 中的广义涨落耗散关系联系起来，我们在朗之万动力学中引入一个微弱的外力$\mathbf{f}(t)$,

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = -\mathbf{A}\mathbf{x}(t) + \boldsymbol{\eta}(t) + \mathbf{f}(t). \tag{B1}$$

由此得到的均值变化为

$$\delta\langle \mathbf{x}(t)\rangle = \int_{-\infty}^{t} \mathbf{R}(t-s)\mathbf{f}(s)\,\mathrm{d}s, \tag{B2}$$

其中，$\mathbf{R}(\tau) = e^{-\mathbf{A}\tau}H(\tau)$ 是因果响应矩阵，而 $H(\tau)$ 是赫维赛德函数。在未扰动稳态下，滞后交叉相关矩阵满足$\mathbf{C}_x(\tau) = e^{-\mathbf{A}\tau}\mathbf{C}_0$，其中 $\tau > 0$，且 $\mathbf{C}_0 = \mathbf{C}_x(0)$。对该表达式求导，并将李雅普诺夫方程（式 (3)）从左侧乘以 $\mathbf{R}(\tau)$，得到

$$\begin{aligned} &\partial_\tau \mathbf{C}_x(\tau) = -\mathbf{A}\mathbf{C}_x(\tau), \\ &2\mathbf{R}(\tau)\mathbf{D} = \mathbf{A}\mathbf{C}_x(\tau) + \mathbf{C}_x(\tau)\mathbf{A}^{\mathrm{T}}, \end{aligned} \tag{B3}$$

其中，第二个恒等式利用了$\mathbf{A}$与其传播子的对易性。结合这些恒等式可得广义涨落-耗散关系：

$$2\partial_\tau \mathbf{C}_x(\tau) = -2\mathbf{R}(\tau)\mathbf{D} + \boldsymbol{\Delta}(\tau), \tag{B4}$$

其中

$$\boldsymbol{\Delta}(\tau) = \mathbf{C}_x(\tau)\mathbf{A}^{\mathrm{T}} - \mathbf{A}\mathbf{C}_x(\tau) \tag{B5}$$

量化了平衡态涨落-耗散关系的违反程度。

式 (8) 中定义的短时不对称性满足$\mathbf{\Omega} = (\mathbf{C}_0\mathbf{A}^{\mathrm{T}} - \mathbf{A}\mathbf{C}_0)/2$。因此，将滞后传播代入式 (B5) 得到

$$\boldsymbol{\Delta}(\tau) = e^{-\mathbf{A}\tau}\big(\mathbf{C}_0\mathbf{A}^{\mathrm{T}} - \mathbf{A}\mathbf{C}_0\big) = 2e^{-\mathbf{A}\tau}\mathbf{\Omega}. \tag{B6}$$

因此，有限滞后下的违反项由$\mathbf{\Omega}$ 在未扰动网络动力学下的传播决定。代入式 (9) 中的模态分解可得

$$\boldsymbol{\Delta}(\tau) = 2\sum_{i,j=1}^{N} \frac{\lambda_j^* - \lambda_i}{\lambda_i + \lambda_j^*}\Gamma_{ij}e^{-\lambda_i\tau}\mathbf{U}_i\mathbf{U}_j^{\dagger}. \tag{B7}$$

在短时极限下，

$$\lim_{\tau\to 0^+}\boldsymbol{\Delta}(\tau) = 2\mathbf{\Omega}. \tag{B8}$$

在平衡态下，$\mathbf{\Omega} = \mathbf{0}$，因此在所有正时滞下，违反项均为零。于是，方程（B4）化为平衡涨落-耗散关系，$\partial_\tau \mathbf{C}_x(\tau) = -\mathbf{R}(\tau)\mathbf{D}$。

附录 C：稳态下的热流

我们采用所有节点的共同迁移率为 1 的单位制。根据随机能量学 [60–62]，稳态下从节点 m 流入其环境的平均热流为

$$J_m = -\langle(\mathbf{A}\mathbf{x})_m \circ \dot{x}_m\rangle_0, \tag{C1}$$

其中，$\langle\cdot\rangle_0$ 表示稳态平均，$\circ$ 表示Stratonovich乘积。为计算该平均值，我们首先将随机积分转换为Itˆo约定。在短时间间隔 $h > 0$ 内，噪声增量 $\Delta w_n = \int_t^{t+h}\eta_n(s)\mathrm{d}s$ s 满足

$$\begin{aligned} \langle \Delta w_n \Delta w_m\rangle &= \int_t^{t+h}\mathrm{d}s\int_t^{t+h}\mathrm{d}s'\,2D_{nm}\delta(s-s') \\ &= 2D_{nm}h. \end{aligned} \tag{C2}$$

漂移增量的阶为 h，而噪声增量的典型量级为 $h^{1/2}$。因此，只有噪声会对二次协变作出贡献，从而有 $\mathrm{d}x_n\,\mathrm{d}x_m = 2D_{nm}\mathrm{d}t$。对于线性被积函数 $(\mathbf{A}\mathbf{x})_m$，Stratonovich到Itˆo的转换变为

$$\begin{aligned} (\mathbf{A}\mathbf{x})_m \circ \mathrm{d}x_m &= (\mathbf{A}\mathbf{x})_m\,\mathrm{d}x_m + \frac{1}{2}\sum_n A_{mn}\,\mathrm{d}x_n\,\mathrm{d}x_m \\ &= (\mathbf{A}\mathbf{x})_m\,\mathrm{d}x_m + (\mathbf{A}\mathbf{D})_{mm}\,\mathrm{d}t, \end{aligned} \tag{C3}$$

其中，右侧的积分按 Itô 意义解释。给定$\mathbf{x}(t)$时，噪声增量的条件均值为零，因此 Langevin方程推出

$$\langle(\mathbf{A}\mathbf{x})_m\,\mathrm{d}x_m\rangle_0 = -\langle(\mathbf{A}\mathbf{x})_m^2\rangle_0\,\mathrm{d}t. \tag{C4}$$

将式 (C3) 和式 (C4) 与 J_m的定义结合，可得

$$\begin{aligned} J_m &= \langle(\mathbf{A}\mathbf{x})_m^2\rangle_0 - (\mathbf{A}\mathbf{D})_{mm} \\ &= \big(\mathbf{A}\mathbf{C}_0\mathbf{A}^{\mathrm{T}} - \mathbf{A}\mathbf{D}\big)_{mm}, \end{aligned} \tag{C5}$$

其中，$\mathbf{C}_0 = \langle\mathbf{x}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\rangle_0$ 是稳态协方差矩阵。李雅普诺夫方程和$\mathbf{\Omega}$ 的定义推出$\mathbf{\Omega} = \mathbf{C}_0\mathbf{A}^{\mathrm{T}} - \mathbf{D}$。因此，热流可汇集为向量$\mathbf{J} = (J_1,\ldots,J_N)^{\mathrm{T}}$，即

$$\mathbf{J} = \mathrm{diag}(\mathbf{A}\mathbf{\Omega}), \tag{C6}$$

其中，diag 将对角线元素提取为一个向量。将式 (9) 中$\mathbf{\Omega}$的模态分解代入，并利用$\mathbf{A}\mathbf{U}_i = \lambda_i\mathbf{U}_i$，即可得到式 (11) 中的热流分解。

附录D：非平衡响应算子的拉普拉斯结构

对于本文所研究的稳定互易网络，$\mathbf{U}$为实正交矩阵，且所有特征值均满足 $\lambda_i > 0$。

由于 $\kappa_{ij}^{\alpha}=\kappa_{ji}^{\alpha}$ 和 $\kappa_{ii}^{\alpha}=0$，式（14）中的模态分解可写为

$$\Theta_{mn}^{\alpha}=\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N}\kappa_{ij}^{\alpha}U_{mi}U_{ni}U_{mj}U_{nj}, \tag{D1}$$

其中 $\alpha\in\{\Omega,\ \mathrm{J}\}$。该表达式在交换 m和 n时保持不变，从而确立了对称性。正交性还给出

$$\sum_{n=1}^{N}\Theta_{mn}^{\alpha}=\sum_{i<j}\kappa_{ij}^{\alpha}U_{mi}U_{mj}\sum_{n=1}^{N}U_{ni}U_{nj}=0, \tag{D2}$$

因为对不同模态求和时，内层求和为零。因此，两个算子都具有行和为零的性质。还需证明它们的非对角元非正。谱权重满足

$$\begin{aligned}\kappa_{ij}^{\mathrm{J}}&=\lambda_i+\lambda_j-\frac{4\lambda_i\lambda_j}{\lambda_i+\lambda_j},\\ \kappa_{ij}^{\Omega}&=2-\frac{8\lambda_i\lambda_j}{(\lambda_i+\lambda_j)^2}.\end{aligned} \tag{D3}$$

对于 $m\neq n$，正交性给出$\sum_i U_{mi}U_{ni}=0$。代入式（D1）后，包含 $\lambda_i+\lambda_j$和常数项的项均消失，因为它们的求和中含有这一零因子。其余各项可通过网络传播子$\mathbf{G}(t)=e^{-\mathbf{A}t}$表示为积分形式，其中

$$(\mathbf{AG}(t))_{mn}=\sum_i\lambda_i U_{mi}U_{ni}e^{-\lambda_i t}.$$

利用 $\int_0^\infty e^{-st}\,\mathrm{d}t=1/s$ 和 $\int_0^\infty te^{-st}\,\mathrm{d}t=1/s^2$（其中 $s>0$），我们得到，对于 $m\neq n$，

$$\begin{aligned}\Theta_{mn}^{\mathrm{J}}&=-2\sum_{i,j=1}^{N}\frac{\lambda_i\lambda_j}{\lambda_i+\lambda_j}U_{mi}U_{ni}U_{mj}U_{nj}\\ &=-2\int_0^\infty\left[(\mathbf{AG}(t))_{mn}\right]^2\mathrm{d}t\le 0,\end{aligned} \tag{D4}$$

and

$$\begin{aligned}\Theta_{mn}^{\Omega}&=-4\sum_{i,j=1}^{N}\frac{\lambda_i\lambda_j}{(\lambda_i+\lambda_j)^2}U_{mi}U_{ni}U_{mj}U_{nj}\\ &=-4\int_0^\infty t\left[(\mathbf{AG}(t))_{mn}\right]^2\mathrm{d}t\le 0.\end{aligned} \tag{D5}$$

将这些不等式与行和为零的条件结合，可得

$$\Theta_{mm}^{\alpha}=-\sum_{n\neq m}\Theta_{mn}^{\alpha}\ge 0. \tag{D6}$$

因此，每个响应算子都是一个对称的加权拉普拉斯矩阵，其边权重 $-\Theta_{mn}^{\alpha}$ 非负，适用于 $m\neq n$。对于任意 $\mathbf{z}\in\mathbb{R}^N$，其二次型为

$$\mathbf{z}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Theta}^{\alpha}\mathbf{z}=-\sum_{m<n}\Theta_{mn}^{\alpha}(z_m-z_n)^2\ge 0, \tag{D7}$$

这证明了其半正定性。

附录 E：全局非平衡度量的二次型

对于具有独立局部驱动$\mathbf{D}=\mathrm{diag}(\mathbf{d})$的互易网络，其中 $d_m>0$，模态坐标下的扩散矩阵为 $\mathbf{\Gamma}=\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\mathbf{D}\mathbf{U}$，其中 $\Gamma_{ij}=(\mathbf{U}_i\odot\mathbf{U}_j)^{\mathrm{T}}\mathbf{d}$。利用弗罗贝尼乌斯范数的正交不变性和公式（9），全局不对称强度可写为

$$\omega=\|\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Omega}\mathbf{U}\|_{\mathrm{F}}^2=2\sum_{i<j}\frac{(\lambda_i-\lambda_j)^2}{(\lambda_i+\lambda_j)^2}\Gamma_{ij}^2=\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Theta}^{\Omega}\mathbf{d}. \tag{E1}$$

对于任意正的驱动强度，该二次型都是精确的。熵产生率可由流入储库的热流得到。将式 (11) 中的 (i,j) 和 (j,i) 项配对，可得

$$\mathbf{J}=-\sum_{i<j}\frac{(\lambda_i-\lambda_j)^2}{\lambda_i+\lambda_j}\Gamma_{ij}(\mathbf{U}_i\odot\mathbf{U}_j)=-\mathbf{\Theta}^{\mathrm{J}}\mathbf{d}. \tag{E2}$$

令 T_m 表示储库 m的温度。由于 J_m是流入该储库的平均热流，其熵流率为

$$\dot{S}_m^{\mathrm{env}}=\frac{J_m}{T_m}. \tag{E3}$$

对于相同的迁移率 μ，爱因斯坦关系将驱动强度与储库温度联系起来:

$$d_m=\mu k_{\mathrm{B}}T_m. \tag{E4}$$

在本文采用的单位制中，$\mu=k_{\mathrm{B}}=1$，因此 $d_m=T_m$。在稳态下，$\dot{S}_{\mathrm{sys}}=0$，总熵产生率等于流入储库的熵流率 [1],

$$\sigma=\dot{S}_{\mathrm{sys}}+\sum_m\dot{S}_m^{\mathrm{env}}=\sum_m\frac{J_m}{T_m}=\sum_m\frac{J_m}{d_m}. \tag{E5}$$

为了用局部驱动强度之间的差值表示 σ，我们利用了附录D中确立的 $\mathbf{\Theta}^{\mathrm{J}}$的行和为零这一性质，

$$\begin{aligned}(\mathbf{\Theta}^{\mathrm{J}}\mathbf{d})_m&=\Theta_{mm}^{\mathrm{J}}d_m+\sum_{n\neq m}\Theta_{mn}^{\mathrm{J}}d_n\\ &=\sum_{n\neq m}\Theta_{mn}^{\mathrm{J}}(d_n-d_m).\end{aligned} \tag{E6}$$

将$\mathbf{J}=-\mathbf{\Theta}^{\mathrm{J}}\mathbf{d}$代入式 (E5)，并利用 $\Theta_{mn}^{\mathrm{J}}=\Theta_{nm}^{\mathrm{J}}$ 合并成对项，得到

$$\begin{aligned}\sigma&=-\sum_m\frac{(\mathbf{\Theta}^{\mathrm{J}}\mathbf{d})_m}{d_m}\\ &=-\sum_m\sum_{n\neq m}\Theta_{mn}^{\mathrm{J}}\frac{d_n-d_m}{d_m}\\ &=-\sum_{m<n}\Theta_{mn}^{\mathrm{J}}\left(\frac{d_n}{d_m}+\frac{d_m}{d_n}-2\right)\\ &=-\sum_{m<n}\Theta_{mn}^{\mathrm{J}}\frac{(d_m-d_n)^2}{d_m d_n}.\end{aligned} \tag{E7}$$

该表达式对于正的驱动强度是精确的。将拉普拉斯恒等式（式 (D7)）应用于式 (E1)，可得到 ω 的相应成对表达式。将这两个表达式结合起来，即可恢复式 (12)。通过围绕均匀单位驱动$\mathbf{d} = \mathbf{1} + \delta\mathbf{d}$展开，可得到 σ 的二次近似。对于 $i \neq j$，正交性意味着 $(\mathbf{U}_i \odot \mathbf{U}_j)^{\mathrm{T}}\mathbf{1} = \mathbf{U}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{U}_j = 0$，因此

$$\Gamma_{ij} = (\mathbf{U}_i \odot \mathbf{U}_j)^{\mathrm{T}}\mathbf{d} = (\mathbf{U}_i \odot \mathbf{U}_j)^{\mathrm{T}}\delta\mathbf{d}. \tag{E8}$$

响应算子的行和为零还给出 $\omega = \delta\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Theta}^{\Omega}\delta\mathbf{d}$ 以及 $\mathbf{J} = -\mathbf{\Theta}^{\mathrm{J}}\delta\mathbf{d}$。在接近平衡态时，$\|\delta\mathbf{d}\|_2 \ll 1$，我们展开 $(1+\delta d_m)^{-1} = 1 - \delta d_m + O(\delta d_m^2)$。$\sigma$ 中的线性项消失，这是因为对称性和行和为零意味着 $\mathbf{1}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Theta}^{\mathrm{J}} = \mathbf{0}^{\mathrm{T}}$。因此，leading contribution 是二次项，

$$\begin{aligned}\sigma &= -\sum_m \frac{(\mathbf{\Theta}^{\mathrm{J}}\delta\mathbf{d})_m}{1+\delta d_m} \\ &= \delta\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Theta}^{\mathrm{J}}\delta\mathbf{d} + O(\|\delta\mathbf{d}\|_2^3) \\ &= \sum_{i<j} \kappa_{ij}^{\mathrm{J}}\Gamma_{ij}^2 + O(\|\delta\mathbf{d}\|_2^3).\end{aligned} \tag{E9}$$

最后一个等式由公式 (14) 和 (E8) 得出。因此，$\mathbf{\Theta}^{\mathrm{J}}$ 决定了接近平衡态时的 leading-order 熵产生率。

附录 F：单位熵产生率的全局不对称强度界

对于弱非均匀驱动 $\mathbf{d} = \mathbf{1} + \delta\mathbf{d}$，其中$\delta\mathbf{d} \perp \mathbf{1}$ 且 $\|\delta\mathbf{d}\|_2 \ll 1$，附录 E 给出

$$\begin{aligned}&\omega = \delta\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Theta}^{\Omega}\delta\mathbf{d}, \\ &\sigma = \sigma_2 + O(\|\delta\mathbf{d}\|_2^3), \qquad \sigma_2 = \delta\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Theta}^{\mathrm{J}}\delta\mathbf{d}.\end{aligned} \tag{F1}$$

ω 的表达式是精确的，而 σ_2 是接近平衡态时熵产生率的 leading quadratic contribution。我们首先证明，对于$\mathbf{1}^{\perp}$中的每个非零驱动扰动，ω/σ_2的比值都有定义。对于满足 $A_{mn} \neq 0$ 的 $m \neq n$，$(\mathbf{AG}(t))_{mn}$的连续性及其在 $t = 0$ 处的非零值确保公式 (D4) 和 (D5) 中的积分表示给出 $\Theta_{mn}^{\alpha} < 0$。因此，每个直接相互作用都会在两个响应网络中生成一条边。对于连通相互作用网络，两个响应网络也都是连通的。它们的拉普拉斯结构进而确保均匀向量是唯一的零模，并且两个算子在 $\mathbf{1}^{\perp}$上都是正定的。在该子空间上，考虑广义特征值问题

$$\mathbf{\Theta}^{\Omega}\boldsymbol{\ell}_r = \rho_r\mathbf{\Theta}^{\mathrm{J}}\boldsymbol{\ell}_r, \qquad \boldsymbol{\ell}_r^{\mathrm{T}}\mathbf{1} = 0, \tag{F2}$$

其中 $r = 1, \ldots, N-1$。对称性和正定性保证存在一组完备的广义特征基，可将其归一化为 $\boldsymbol{\ell}_r^{\mathrm{T}}\mathbf{\Theta}^{\mathrm{J}}\boldsymbol{\ell}_s = \delta_{rs}$，其中 δ_{rs} 是克罗内克 delta。随后，$\mathbf{1}^{\perp}$ 中的任意驱动扰动都可以展开为

$$\delta\mathbf{d} = \sum_{r=1}^{N-1} c_r\boldsymbol{\ell}_r, \qquad c_r = \boldsymbol{\ell}_r^{\mathrm{T}}\mathbf{\Theta}^{\mathrm{J}}\delta\mathbf{d}. \tag{F3}$$

广义特征值方程还给出 $\boldsymbol{\ell}_r^{\mathrm{T}}\mathbf{\Theta}^{\Omega}\boldsymbol{\ell}_s = \rho_s\delta_{rs}$。代入其中的两个二次型，因而得到

$$\omega = \sum_r \rho_r c_r^2, \qquad \sigma_2 = \sum_r c_r^2. \tag{F4}$$

令 $\rho_{\min}$ 和 $\rho_{\max}$ 分别表示最小和最大的广义特征值。由于 $c_r^2 \geq 0$,

$$\rho_{\min}\sum_r c_r^2 \leq \sum_r \rho_r c_r^2 \leq \rho_{\max}\sum_r c_r^2. \tag{F5}$$

对于非零的 $\delta\mathbf{d}$，正定性确保 $\sigma_2 = \sum_r c_r^2 > 0$。两边除以 σ_2，得到

$$\rho_{\min} \leq \frac{\omega}{\sigma_2} = \frac{\sum_r \rho_r c_r^2}{\sum_r c_r^2} \leq \rho_{\max}. \tag{F6}$$

因此，该比值是广义特征值的加权平均值，介于其最小值和最大值之间。这些界均可达到。对于固定且足够小的二次熵产生率$\sigma_2 = \sigma_0 > 0$，驱动扰动 $\delta\mathbf{d} = \sqrt{\sigma_0}\boldsymbol{\ell}_{\max}$满足约束，并给出

$$\omega_{\max} = \sigma_0\boldsymbol{\ell}_{\max}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Theta}^{\Omega}\boldsymbol{\ell}_{\max} = \rho_{\max}\sigma_0. \tag{F7}$$

类似地，$\delta\mathbf{d} = \sqrt{\sigma_0}\boldsymbol{\ell}_{\min}$ 达到下界 $\omega_{\min} = \rho_{\min}\sigma_0$。最后，$\mathbf{\Theta}^{\mathrm{J}}$ 在 $\mathbf{1}^{\perp}$ 上的正定性保证σ_2 下界为 $\|\delta\mathbf{d}\|_2^2$的某个正倍数。因此，式 (F1) 中的三次修正产生的相对误差为 $\|\delta\mathbf{d}\|_2$ 阶，从而得到

$$\frac{\omega}{\sigma} = \frac{\omega}{\sigma_2} + O(\|\delta\mathbf{d}\|_2). \tag{F8}$$

因此，广义特征值在平衡态附近对 ω/σ 的主导阶行为构成界限。当驱动振幅沿$\boldsymbol{\ell}_{\min}$ 或 $\boldsymbol{\ell}_{\max}$趋于零时，该比值分别趋近于$\rho_{\min}$ 或 $\rho_{\max}$。

附录 G：理想层次模块网络中的费德勒模态与谱界

考虑一个理想的 H_3 网络，其中有 $N = 2n$ 个节点，被划分为两个大小相等的最大模块。不同模块中的任意一对节点都以权重$b > 0$相连接，而同一模块内任意一对不同节点之间则以大于 b的权重相连接。归一化的均匀模态和菲德勒模态为

$$\mathbf{U}_1 = \frac{1}{\sqrt{N}}\begin{pmatrix}\mathbf{1}_n \\ \mathbf{1}_n\end{pmatrix}, \qquad \mathbf{U}_2 = \frac{1}{\sqrt{N}}\begin{pmatrix}\mathbf{1}_n \\ -\mathbf{1}_n\end{pmatrix}. \tag{G1}$$

由于$\mathbf{U}_2$ 在每个模块内均为常数，只有模块间连接会对 $\mathbf{L}\mathbf{U}_2 = Nb\,\mathbf{U}_2$产生贡献。相对于边权重为 b的完全图，额外的模块内权重提高了所有其余非均匀特征值。因此，对于 $j > 2$， $k_2 = Nb$ 和 $k_j > k_2$ 。对于$\mathbf{A} = \gamma \mathbf{I} + g\mathbf{L}$，相应的弛豫率为$\lambda_1 = \gamma$ 和 $\lambda_2 = \gamma + gk_2$。我们首先推导对任意非均匀驱动均成立的界限，然后证明沿 $\mathbf{U}_2$ 方向的驱动可以达到这些界限。相关谱边缘的变分表达式为

$$\begin{aligned} \mu^{\Omega}_{\min+} &= \min_{\delta\mathbf{d}} \frac{\omega}{\|\delta\mathbf{d}\|_2^2}, \\ \mu^{\mathrm{J}}_{\min+} &= \min_{\delta\mathbf{d}} \frac{\sigma_2}{\|\delta\mathbf{d}\|_2^2}, \\ \rho_{\max} &= \max_{\delta\mathbf{d}} \frac{\omega}{\sigma_2}, \end{aligned} \tag{G2}$$

其中，极值是在非零 $\delta\mathbf{d} \perp \mathbf{1}$ 上取得的。对于$\mathbf{d} = \mathbf{1} + \delta\mathbf{d}$，均匀模态 $\mathbf{U}_1 = \mathbf{1}/\sqrt{N}$ 给出$\Gamma_{1j} = \mathbf{U}_j^{\mathrm{T}}\delta\mathbf{d}/\sqrt{N}$ 对于 $j > 1$。正交归一性与 $\delta\mathbf{d} \perp \mathbf{1}$ 因此意味着

$$\Gamma_{1j} = \frac{\mathbf{U}_j^{\mathrm{T}}\delta\mathbf{d}}{\sqrt{N}}, \qquad \sum_{j=2}^{N} \Gamma_{1j}^2 = \frac{\|\delta\mathbf{d}\|_2^2}{N}. \tag{G3}$$

对于 $\alpha = \Omega$ 和 $\alpha = \mathrm{J}$，权重 κ_{1j}^{α} 均随 $\lambda_j \geq \lambda_1$增加，因此 $\kappa_{1j}^{\alpha} \geq \kappa_{12}^{\alpha}$ 对于 $j > 1$。仅保留涉及均匀模态的非负贡献，可得

$$\begin{aligned} \omega &\geq \sum_{j=2}^{N} \kappa_{1j}^{\Omega}\Gamma_{1j}^2 \geq \frac{\kappa_{12}^{\Omega}}{N}\|\delta\mathbf{d}\|_2^2, \\ \sigma_2 &\geq \sum_{j=2}^{N} \kappa_{1j}^{\mathrm{J}}\Gamma_{1j}^2 \geq \frac{\kappa_{12}^{\mathrm{J}}}{N}\|\delta\mathbf{d}\|_2^2. \end{aligned} \tag{G4}$$

由 $\kappa_{ij}^{\Omega} = 2\kappa_{ij}^{\mathrm{J}}/(\lambda_i + \lambda_j)$ 可得该比值的上界，

$$\frac{\omega}{\sigma_2} = \frac{\sum_{i<j} \frac{2}{\lambda_i+\lambda_j}\kappa_{ij}^{\mathrm{J}}\Gamma_{ij}^2}{\sum_{i<j} \kappa_{ij}^{\mathrm{J}}\Gamma_{ij}^2} \leq \frac{2}{\lambda_1 + \lambda_2}. \tag{G5}$$

该比值是 $2/(\lambda_i + \lambda_j)$ 的加权平均值，权重均为非负数，而 $\lambda_1 + \lambda_2$ 是不同模态中最小的总和。由于这些不等式对每个非零 $\delta\mathbf{d} \perp \mathbf{1}$均成立，式 (G2) 中的变分表达式给出

$$\mu^{\Omega}_{\min+} \geq \frac{\kappa_{12}^{\Omega}}{N}, \quad \mu^{\mathrm{J}}_{\min+} \geq \frac{\kappa_{12}^{\mathrm{J}}}{N}, \quad \rho_{\max} \leq \frac{2}{\lambda_1 + \lambda_2}. \tag{G6}$$

为证明可达性，选取 $\delta\mathbf{d} = a\mathbf{U}_2$，使其非零且 a足够小。于是，一个模块中的驱动强度为$1 + a/\sqrt{N}$，另一个模块中的驱动强度为 $1 - a/\sqrt{N}$。均匀模块间耦合使其余弛豫模式可以选为仅支撑于任一模块内，且在该模块内总和为零。由于$\mathbf{D}$在每个模块内均为常数，这些模式也是$\mathbf{D}$的特征向量。因此，涉及这些模式的 $\mathbf{\Gamma}$的所有非对角元均为零，只剩下 $\Gamma_{12} = \Gamma_{21} = a/\sqrt{N}$。因此，只有这一对（1,2）对 ω 和 σ_2有贡献。利用 $\|\delta\mathbf{d}\|_2^2 = a^2$，我们得到

$$\frac{\omega}{\|\delta\mathbf{d}\|_2^2} = \frac{\kappa_{12}^{\Omega}}{N}, \quad \frac{\sigma_2}{\|\delta\mathbf{d}\|_2^2} = \frac{\kappa_{12}^{\mathrm{J}}}{N}, \quad \frac{\omega}{\sigma_2} = \frac{2}{\lambda_1 + \lambda_2}. \tag{G7}$$

这些数值使式 (G6) 中的三个界限全部达到饱和。因此，代入 $\lambda_1 = \gamma$ 和 $\lambda_2 = \gamma + gk_2$ 即可得到精确的谱边缘，

$$\begin{aligned} \mu^{\Omega}_{\min+} &= \frac{\kappa_{12}^{\Omega}}{N} = \frac{2(gk_2)^2}{N(2\gamma + gk_2)^2}, \\ \mu^{\mathrm{J}}_{\min+} &= \frac{\kappa_{12}^{\mathrm{J}}}{N} = \frac{(gk_2)^2}{N(2\gamma + gk_2)}, \\ \rho_{\max} &= \frac{2}{2\gamma + gk_2}. \end{aligned} \tag{G8}$$

沿$\mathbf{U}_2$ 方向驱动，因此在驱动异质性固定时，同时使 ω 和 σ_2 最小化，并使ω/σ_2最大化。这三个极值对应于相同的驱动方向$\delta\mathbf{d} \parallel \mathbf{v}^{\Omega}_{\min+} \parallel \mathbf{v}^{\mathrm{J}}_{\min+} \parallel \boldsymbol{\ell}_{\max} \parallel \mathbf{U}_2$。同样的论证也适用于理想的 $\mathbf{H}_2$ 和 $\mathbf{H}_1$ 网络，其中规模最大的保留模块大小相同、模块间耦合均匀，且模块内连接更强。沿菲德勒模态驱动同样可使式 (G8) 中的三个界限全部达到。

附录 H：经验协方差估计与扩散矩阵推断

1. 经验协方差估计与时间反演不对称性

对于每位参与者，将四段静息态运行拼接起来，形成时间序列$\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^N$，包含$N = 360$ 个脑区和 $T = 4800$ 个时间点，其中 t以重复时间（$\mathrm{TR} = 0.72$秒）为单位测量。对区域信号去均值，并以相同因子重新缩放，使区域样本方差的均值为 1，同时保留区域方差比。为确保各时滞的采样一致，所有协方差估计均使用相同的 $M = T - K$ 个起始时间点，其中 K为所考虑的最大时滞。对于 $k = 0, \ldots, K$，经验协方差为

$$\mathbf{C}_k^{\mathrm{emp}} = \frac{1}{M-1}\sum_{t=1}^{M} \mathbf{x}(t+k)\mathbf{x}(t)^{\mathrm{T}}. \tag{H1}$$

这些矩阵表示去均值信号的未归一化交叉相关性。在正时滞下，它们的不对称性为

$$\mathbf{B}_k = \mathbf{C}_k - \mathbf{C}_k^{\mathrm{T}}. \tag{H2}$$

相同的记号也适用于下文使用的经验矩阵、模型矩阵和基矩阵。短时展开$\mathbf{B}(\tau) = 2\tau\mathbf{\Omega} + O(\tau^2)$表明，$\mathbf{B}(\tau)/(2\tau)$在$\tau \to 0^{+}$时趋近于$\mathbf{\Omega}$。这启发我们定义全局不对称强度$\omega = \|\mathbf{\Omega}\|_{\mathrm{F}}^2$的有限时滞对应量。对于每位参与者，该量在$\tau = k > 0$处估计为

$$\widehat{\omega}(\tau) = \left\| \frac{\mathbf{B}_k^{\mathrm{emp}}}{2\tau} \right\|_{\mathrm{F}}^2 = \frac{\|\mathbf{B}_k^{\mathrm{emp}}\|_{\mathrm{F}}^2}{4\tau^2}. \tag{H3}$$

为评估静息态脑活动的非平衡特征，我们将实测全局不对称强度与时间序列经时间置乱后的全局不对称强度进行比较。对于每位参与者，均匀且不重复地选取$p \in \{0.25, 0.5, 1\}\, pT$个时间点。随后，在选定位置之间随机置乱相应的全脑活动向量，其余位置保持不变。因此，所有脑区共享相同的时间置乱方式，这既保留了瞬时空间活动模式的集合，又打乱了它们的时间顺序。$p = 1$的情形对应于对整个时间序列进行置乱。在每个p，为每位参与者生成一个置乱序列，并使用相同的估计量重新计算其滞后协方差和全局不对称强度。随后，在每个滞后时间下，分别对实测强度和置乱强度在参与者间取平均。

2. 扩散矩阵的推断

对于每位参与者，我们通过将模型拟合至实测零时滞协方差和滞后交叉相关的不对称性，推断各脑区的驱动强度。根据个体的结构连接矩阵$\mathbf{W}$的图拉普拉斯矩阵$\mathbf{L}$，构造相互作用矩阵$\mathbf{A}(\gamma, g) = \gamma\mathbf{I} + g\mathbf{L}$。针对每个候选参数对$(\gamma, g)$优化驱动强度，随后选取归一化拟合误差最小的参数对。对于独立随机驱动，扩散矩阵为$\mathbf{D} = \mathrm{diag}(\mathbf{d})$，其中$d_i > 0$表示脑区$i$的驱动强度。模型的零时滞协方差和滞后协方差满足

$$\mathbf{A}\mathbf{C}_0^{\mathrm{mod}} + \mathbf{C}_0^{\mathrm{mod}}\mathbf{A} = 2\mathbf{D}, \qquad \mathbf{C}_k^{\mathrm{mod}} = e^{-k\mathbf{A}}\mathbf{C}_0^{\mathrm{mod}}. \tag{H4}$$

为表示其对驱动强度的依赖关系，我们写作$\mathbf{D} = \sum_{i=1}^{N} d_i \mathbf{E}_i$，其中$\mathbf{E}_i$的唯一非零元素为$(E_i)_{ii} = 1$。仅在区域$i$施加单位驱动得到协方差基矩阵$\mathbf{C}_k^{(i)}$，其满足

$$\mathbf{A}\mathbf{C}_0^{(i)} + \mathbf{C}_0^{(i)}\mathbf{A} = 2\mathbf{E}_i, \qquad \mathbf{C}_k^{(i)} = e^{-k\mathbf{A}}\mathbf{C}_0^{(i)}. \tag{H5}$$

根据李雅普诺夫方程的线性性质以及滞后传播，

$$\mathbf{C}_k^{\mathrm{mod}} = \sum_{i=1}^{N} d_i \mathbf{C}_k^{(i)}, \qquad \mathbf{B}_k^{\mathrm{mod}} = \sum_{i=1}^{N} d_i \mathbf{B}_k^{(i)}. \tag{H6}$$

对于模型、经验矩阵和基矩阵，我们使用常见记号$\mathbf{T}_0 = \mathbf{C}_0$和$\mathbf{T}_k = \mathbf{B}_k$表示$k \geq 1$。拟合目标函数是弗罗贝尼乌斯残差的平方和，每个残差均以其经验目标的平方范数归一化，

$$\mathcal{L}_{\mathcal{T}}(\gamma, g, \mathbf{d}) = \sum_{k \in \mathcal{T}} w_k \left\| \mathbf{T}_k^{\mathrm{mod}}(\gamma, g, \mathbf{d}) - \mathbf{T}_k^{\mathrm{emp}} \right\|_{\mathrm{F}}^2, \tag{H7}$$

其中，$\mathcal{T}$是拟合时滞的集合（例如，对$\mathbf{C}_0$和$\mathbf{B}_1$进行联合拟合时的$\mathcal{T}_{01} = \{0, 1\}$），而$w_k = \|\mathbf{T}_k^{\mathrm{emp}}\|_{\mathrm{F}}^{-2}$。将式 (H6) 代入式 (H7)，并使用弗罗贝尼乌斯内积$\langle \mathbf{X}, \mathbf{Y} \rangle_{\mathrm{F}} = \mathrm{Tr}(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Y})$，可得

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\mathcal{T}} &= \sum_{k \in \mathcal{T}} w_k \left\| \sum_{i=1}^{N} d_i \mathbf{T}_k^{(i)} - \mathbf{T}_k^{\mathrm{emp}} \right\|_{\mathrm{F}}^2 \\ &= \mathbf{d}^{\mathrm{T}} \mathcal{G}_{\mathcal{T}} \mathbf{d} - 2\mathbf{z}_{\mathcal{T}}^{\mathrm{T}} \mathbf{d} + \beta_{\mathcal{T}}. \end{aligned} \tag{H8}$$

其中系数为

$$\begin{aligned} [\mathcal{G}_{\mathcal{T}}]_{ij} &= \sum_{k \in \mathcal{T}} w_k \left\langle \mathbf{T}_k^{(i)}, \mathbf{T}_k^{(j)} \right\rangle_{\mathrm{F}}, \\ [\mathbf{z}_{\mathcal{T}}]_i &= \sum_{k \in \mathcal{T}} w_k \left\langle \mathbf{T}_k^{(i)}, \mathbf{T}_k^{\mathrm{emp}} \right\rangle_{\mathrm{F}}, \\ \beta_{\mathcal{T}} &= \sum_{k \in \mathcal{T}} w_k \|\mathbf{T}_k^{\mathrm{emp}}\|_{\mathrm{F}}^2. \end{aligned} \tag{H9}$$

由于

$$\mathbf{y}^{\mathrm{T}} \mathcal{G}_{\mathcal{T}} \mathbf{y} = \sum_{k \in \mathcal{T}} w_k \left\| \sum_{i=1}^{N} y_i \mathbf{T}_k^{(i)} \right\|_{\mathrm{F}}^2 \geq 0 \tag{H10}$$

对于每个$\mathbf{y} \in \mathbb{R}^N$，矩阵$\mathcal{G}_{\mathcal{T}}$都是半正定的。因此，对于固定的$(\gamma, g)$，最优驱动强度由以下凸二次规划求得

$$\mathbf{d}_{\mathcal{T}}^{*}(\gamma, g) = \arg\min_{\mathbf{d} > \mathbf{0}} \left[\tfrac{1}{2} \mathbf{d}^{\mathrm{T}} \mathcal{G}_{\mathcal{T}} \mathbf{d} - \mathbf{z}_{\mathcal{T}}^{\mathrm{T}} \mathbf{d} \right]. \tag{H11}$$

在拟合得到的驱动强度下，归一化拟合误差为

$$\mathcal{E}_{\mathcal{T}}(\gamma, g) = \frac{\mathcal{L}_{\mathcal{T}}\big(\gamma, g, \mathbf{d}_{\mathcal{T}}^{*}(\gamma, g)\big)}{\beta_{\mathcal{T}}}. \tag{H12}$$

在搜索网格$\mathcal{P}$上最小化此误差，可得到最优参数对及其对应的扩散矩阵，

$$\begin{aligned} (\gamma_{\mathcal{T}}^{*}, g_{\mathcal{T}}^{*}) &= \arg\min_{(\gamma, g) \in \mathcal{P}} \mathcal{E}_{\mathcal{T}}(\gamma, g), \\ \mathbf{D}_{\mathcal{T}}^{*} &= \mathrm{diag}[\mathbf{d}_{\mathcal{T}}^{*}(\gamma_{\mathcal{T}}^{*}, g_{\mathcal{T}}^{*})]. \end{aligned} \tag{H13}$$

对于每位参与者，我们使用 MATLAB 的 quadprog 中的内点凸算法，在每个网格点求解方程（H11）。数值优化设置和拟合结果见补充材料。

[1] U. Seifert, 《随机热力学、涨落定理与分子机器》, Rep. Prog. Phys. **75**, 126001 2012( )。[2] J. O'Byrne、Y. Kafri、J. Tailleur 和 F. van Wijland, 《活性物质中的时间不可逆性：从微观到宏观》, Nat. Rev. Phys.**4**, 167 (2022)。[3] F. S. Gnesotto、F. Mura、J. Gladrow 和 C. P. Broedersz, 《生命系统中的详细平衡破缺与非平衡动力学：综述》, Rep. Prog. Phys. **81**, 066601 2018( )。[4] C. Battle、C. P. Broedersz、N. Fakhri、V. F. Geyer、J. Howard、C. F. Schmidt 和 F. C. MacKintosh, 《活性生物系统中介观尺度上的详细平衡破缺》, Science **352**, 604 (2016)。[5] J. Paulsson, 《随机基因表达模型》, Phys. Life Rev. **2**, 157 (2005)。[6] T. Aslyamov、K. Ptaszy´nski 和 M. Esposito, 《宏观涨落响应理论及其在基因调控网络中的应用》, 《物理评论快报》**136**, 067102 (2026)。[7] ´E. Fodor、C. Nardini、M. E. Cates、J. Tailleur、P. Visco 和 F. van Wijland, 《活性物质离平衡态有多远？》, 《物理评论快报》**117**, 038103 (2016)。[8] E. Flenner、G. Szamel 和 L. Berthier, 《自驱动粒子的非平衡玻璃态动力学》, Soft Matter**12**, 7136 (2016)。[9] A. Destexhe、M. Rudolph、J.-M. Fellous 和 T. J. Sejnowski, 《波动的突触电导在新皮层神经元中重现类似体内的活动》, Neuroscience **107**, 13 (2001)。[10] F. S. Chance、L. F. Abbott 和 A. D. Reyes, 《背景突触输入引起的增益调制》, Neuron **35**, 773 (2002)。[11] J. Gladrow、C. P. Broedersz 和 C. F. Schmidt, 《肌动蛋白-肌球蛋白网络中探针丝的非平衡动力学》, 《物理评论E》**96**, 022408 (2017)。[12] F. Mura、G. Gradziuk 和 C. P. Broedersz, 《驱动软生物组装体中的非平衡标度行为》, 《物理评论快报》**121**, 038002 (2018)。[13] G. Gradziuk、F. Mura 和 C. P. Broedersz, 《内部驱动弹性组装体中非平衡度量的标度行为》, 《物理评论E》**99**, 052406 (2019)。[14] C. Godr`eche 和 J.-M. Luck, 《刻画 Ornstein–Uhlenbeck 过程的非平衡稳态》, J. Phys. A: Math. Theor. **52**, 035002 (2019)。[15] S. Ciliberto、A. Imparato、A. Naert 和 M. Tanase, 《热涨落产生的热通量与熵》, 《物理评论快报》**110**, 180601 (2013)。[16] N. Ohga、S. Ito 和 A. Kolchinsky, 《交叉相关不对称性的热力学界限》, 《物理评论快报》**131**, 077101 (2023)。[17] J. Ren、W.-X. Wang、B. Li 和 Y.-C. Lai, 《噪声连接耦合振子网络中的动力学相关与拓扑》, 《物理评论快报》**104**, 058701 (2010)。[18] J. T. Lizier、F. Bauer、F. M. Atay 和 J. Jost, 《相对同步性与网络结构及基元之间的解析关系》, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **120**, e2303332120 (2023)。[19] R. Nartallo-Kaluarachchi、M. Asllani、G. Deco、M. L. Kringelbach、A. Goriely 和 R. Lambiotte, 《有向网络中的详细平衡破缺与熵产生相关工作，Phys. Rev. E 110, 034313 (2024)。[20] G. Korniss, 《噪声环境中加权无关联复杂网络的同步：优化及其与传输效率的联系》, Phys. Rev. E 75, 051121 (2007)。[21] T. Yanagita 和 A. S. Mikhailov, 《设计具有增强噪声同步容忍度的振荡器网络》, Phys. Rev. E 85, 056206 (2012)。[22] G. Hennequin、T. P. Vogels 和 W. Gerstner, 《随机平衡神经网络中的非正规放大》, Phys. Rev. E 86, 011909 (2012)。[23] H. Ronellenfitsch、J. Dunkel 和 M. Wilczek, 《最优噪声消除网络》, Phys. Rev. Lett. 121, 208301 (2018)。[24] F. Corson, 《最优传输网络中的涨落与冗余》, Phys. Rev. Lett. 104, 048703 (2010)。[25] T. Herpich、J. Thingna 和 M. Esposito, 《集体功率：非平衡相变的最小热力学模型》, Phys. Rev. X 8, 031056 (2018)。[26] D. Zhang、Y. Cao、Q. Ouyang 和 Y. Tu, 《耦合分子振荡器同步的能量成本与最优设计》, Nat. Phys. 16, 95 (2020)。[27] N. Freitas、J.-C. Delvenne 和 M. Esposito, 《受驱RLC网络的随机与量子热力学》, Phys. Rev. X 10, 031005 (2020)。[28] J. Meibohm 和 M. Esposito, 《远离平衡的同步随机振荡器的最小耗散原理》, Phys. Rev. E 110, L042102 (2024)。[29] H. Vroylandt、M. Esposito 和 G. Verley, 《增强功率和效率的集体效应》, 《欧洲物理快报》120, 30009 (2017)。[30] I. N. Mamede、K. Proesmans 和 C. E. Fiore, 《相互作用系统的热力学：拓扑与集体效应的作用》, Phys. Rev. Research 5, 043278 (2023)。[31] F. S. Filho、G. A. L. For˜ao、D. M. Busiello、B. Cleuren 和 C. E. Fiore, 《强大的有序集体热机》, Phys. Rev. Research 5, 043067 (2023)。[32] G. Lan、P. Sartori、S. Neumann、V. Sourjik 和 Y. Tu, 《感觉适应中的能量–速度–精度权衡》, Nat. Phys. 8, 422 (2012)。[33] C. Zheng 和 E. Tang, 《生物网络中稳健且高效全局振荡的拓扑机制》, 《自然·通讯》15, 6453 (2024)。[34] R. Nartallo-Kaluarachchi、M. Kringelbach、G. Deco、R. Lambiotte 和 A. Goriely, 《脑动力学的非平衡物理》, 《物理报告》1152, 1 (2026)。[35] M. E. J. Newman, 《复杂网络的结构与功能》, 《SIAM评论》45, 167 (2003)。[36] S. Boccaletti、V. Latora、Y. Moreno、M. Chavez 和 D.-U. Hwang, 《复杂网络：结构与动力学》, 《物理报告》424, 175 (2006)。[37] L. M. Pecora 和 T. L. Carroll, 《同步耦合系统的主稳定函数》, Phys. Rev. Lett. 80, 2109 1998( )。[38] H. Nakao 和 A. S. Mikhailov, 《网络组织的激活子–抑制子系统中的图灵斑图》, Nat. Phys. 6, 544 (2010)。[39] D. Hunt、G. Korniss 和 B. K. Szymanski, 《具有时间延迟的噪声环境中的网络同步：基本极限与权衡》, Phys. Rev. Lett. 105,

068701 (2010)。[40] M. Tyloo、T. Coletta 和 Ph. Jacquod，《复杂网络中的同步稳健性与广义基尔霍夫指数》，Phys. Rev. Lett. **120**, 084101 (2018)。[41] J. Hindes、I. B. Schwartz 和 M. Tyloo，《受异质及空间相关噪声引起的大涨落和小涨落影响的Kuramoto网络稳定性》，Chaos **33**, 113129 (2023)。[42] Y. V. Fyodorov、E. Gudowska-Nowak、M. A. Nowak 和 W. Tarnowski，《非正交特征向量、涨落耗散关系与熵产生》，Phys. Rev. Lett. **134**, 087102 (2025)。[43] M. Asllani、R. Lambiotte 和 T. Carletti，《非正规网络的结构与动力学行为》，Sci. Adv. **4**, eaau9403 (2018)。[44] A. Argun、J. Soni、L. Dabelow、S. Bo、G. Pesce、R. Eichhorn 和 G. Volpe，《最小微观热机的实验实现》，Phys. Rev. E **96**, 052106 (2017)。[45] G. Falasco、M. Baiesi、L. Molinaro、L. Conti 和 F. Baldovin，《局部热库谐链中的能量分配》，Phys. Rev. E **92**, 022129 (2015)。[46] A. Crisanti、A. Puglisi 和 D. Villamaina，《非平衡与信息：交叉相关的作用》，Phys. Rev. E**85**, 061127 (2012)。[47] M. L. Kringelbach、Y. Sanz Perl、E. Tagliazucchi 和 G. Deco，《迈向自然情境神经科学：观影相较于静息和任务状态时大脑层级趋于扁平化的潜在机制》，Sci. Adv. **9**, eade6049 (2023)。[48] G. Deco、C. W. Lynn、Y. Sanz Perl 和 M. L. Kringelbach，《对涨落耗散定理的违反揭示了脑状态不同的非平衡动力学》，Phys. Rev. E**108**, 064410 (2023)。[49] G. Hennequin、T. P. Vogels 和 W. Gerstner，《平衡网络中的瞬态动力学最优控制支持复杂运动的生成》，Neuron **82**, 1394 (2014)。[50] C. Kwon、P. Ao 和 D. J. Thouless，《不动点附近随机动力学的结构》，Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **102**, 13029 (2005)。[51] A. J. McKane 和 T. J. Newman，《人口随机性的共振放大产生的捕食者—猎物周期》，Phys. Rev. Lett. **94**, 218102 (2005)。[52] P. Thomas、R. Grima 和 A. V. Straube，《利用投影算子从线性噪声近似中严格消除快速随机变量》，Phys. Rev. E **86**, 041110 (2012)。[53] L. Onsager，《不可逆过程中的互易关系 I》，Phys. Rev. **37**, 405 (1931)。[54] H. B. G. Casimir，《论Onsager 原理的微观可逆性》，Rev. Mod. Phys. **17**, 343 (1945)。[55] M. C. Wang 和 G. E. Uhlenbeck，《论布朗运动理论 II》，Rev. Mod. Phys. **17**, 323 (1945)。[56] M. Lax，《非平衡稳态中的涨落》，Rev. Mod. Phys. **32**, 25 (1960)。[57] L. S. Ferreira、F. L. Metz 和 P. Barucca，《具有异质温度的Ornstein–Uhlenbeck过程协方差矩阵的随机矩阵系综》，Phys. Rev. E**111**, 014151 (2025)。[58] 请参阅 [出版商将插入URL的]补充材料，其中包含更多推导、谱界的数值验证、神经影像数据处理以及稳健性分析。

[59]J. Gu，利用动力学活性和熵产生对交叉相关不对称性的热力学界限，《物理评论E》**109**，L042101（2024）。[60] K. Sekimoto，Langevin方程与热力学，《理论物理进展补刊》**130**，17（1998）。[61] U. Seifert，随机轨迹上的熵产生与积分涨落定理，《物理评论快报》**95**，040602（2005）。[62] T. Harada 和 S.-i. Sasa，连接能量耗散与涨落-响应关系违背的等式，《物理评论快报》**95**，130602（2005）。[63] F. S. Gnesotto、G. Gradziuk、P. Ronceray 和 C. P. Broedersz，学习布朗运动影片中的非平衡动力学，《自然·通讯》**11**，5378（2020）。[64] G. Gradziuk、G. Torregrosa 和 C. P. Broedersz，有色噪声线性系统中的不可逆性，《物理评论E》**105**，024118（2022）。[65] D. S. Bassett、D. L. Greenfield、A. Meyer-Lindenberg、D. R. Weinberger、S. W. Moore 和 E. T. Bullmore，大脑和计算机电路中拓扑复杂信息处理网络的高效物理嵌入，《公共科学图书馆·计算生物学》**6**，e1000748（2010）。[66] R. Wang、P. Lin、M. Liu、Y. Wu、T. Zhou 和 C. Zhou，层级连接组模式与临界态共同实现人脑功能多样性最大化，《物理评论快报》**123**，038301（2019）。[67] M. Gilson、E. Tagliazucchi 和 R. Cof´e，人脑中多变量Ornstein–Uhlenbeck过程的熵产生与意识水平相关，《物理评论E》**107**，024121（2023）。[68] M. Fiedler，图的代数连通度，《捷克斯洛伐克数学杂志》**23**，298（1973）。[69] D. C. Van Essen、S. M. Smith、D. M. Barch、T. E. J. Behrens、E. Yacoub 和 K. Ugurbil（WU-Minn HCP 联盟），WU-Minn人类连接组计划：概述，NeuroImage **80**，62（2013）。[70] S. M. Smith、C. F. Beckmann、J. Andersson、E. J. Auer- bach、J. Bijsterbosch、G. Douaud、E. Duff、D. A. Fein- berg、L. Griffanti、M. P. Harms、M. Kelly、T. Laumann、K. L. Miller、S. Moeller、S. Petersen、J. Power、G. Salimi-Khorshidi、A. Z. Snyder、A. T. Vu、M. W. Woolrich、J. Xu、E. Yacoub、K. U˘gurbil、D. C. Van Essen 和 M. F. Glasser（WU-Minn HCP 联盟），人类连接组计划中的静息态功能磁共振成像，NeuroImage **80**，144（2013）。[71] M. F. Glasser、S. N. Sotiropoulos、J. A. Wilson、T. S. Coalson、B. Fischl、J. L. Andersson、J. Xu、S. Jbabdi、M. Webster、J. R. Polimeni、D. C. Van Essen 和 M. Jenkinson（WU-Minn HCP 联盟），人类连接组计划的最简预处理流程，NeuroImage **80**，105（2013）。[72] M. F. Glasser、T. S. Coalson、E. C. Robinson、C. D. Hacker、J. Harwell、E. Yacoub、K. Ugurbil、J. Andersson、C. F. Beckmann、M. Jenkinson、S. M. Smith 和 D. C. Van Essen，人类大脑皮层的多模态分区，Nature **536**，171（2016）。[73] J.-D. Tournier、R. Smith、D. Raffelt、R. Tabbara、T. Dhollander、M. Pietsch、D. Christiaens、B. Jeurissen、C.-H. Yeh 和 A. Connelly，MRtrix3：用于医学图像处理与可视化的快速、灵活、开放软件框架，NeuroImage **202**，116137（2019）。[74] T. Dhollander、D. Raffelt 和 A. Connelly，无需配准T1即可从单壳层或多壳层扩散磁共振数据中无监督估计三组织响应函数

图像，ISMRM扩散MRI突破障碍研讨会，里斯本，葡萄牙，第5页（2016），研讨会摘要。[75] T. Dhollander、R. Mito、D. Raffelt 和 A. Connelly，改进的白质响应函数估计：用于三组织约束球面反卷积，国际磁共振医学学会第27届年会论文集，摘要编号0555（2019），会议摘要。[76] B. Jeurissen、J.-D. Tournier、T. Dhollander、A. Con- nelly 和 J. Sijbers，用于改进多壳层扩散MRI数据分析的多组织约束球面反卷积，NeuroImage **103**，411（2014）。[77] R. E. Smith、J.-D. Tournier、F. Calamante 和 A. Con- nelly，解剖学约束纤维束示踪：有效利用解剖信息改进扩散MRI流线纤维追踪，NeuroImage **62**，1924（2012）。[78] J.-D. Tournier、F. Calamante 和 A. Connelly，通过对纤维取向分布进行二阶积分改进概率流线纤维束示踪，国际磁共振医学学会第18届年会论文集，摘要编号1670（2010），会议摘要。[79] R. E. Smith、J.-D. Tournier、F. Calamante 和 A. Con- nelly，SIFT2：利用流线纤维束示踪对脑白质连接进行高密度定量评估，《神经影像》**119**，338（2015）。[80] T. R. Gingrich、G. M. Rotskoff 和 J. M. Horowitz，从电流涨落推断耗散，J. Phys. A: Math. Theor. **50**，184004（2017）。

[81] A. Frishman 和 P. Ronceray，《从随机轨迹中学习力场》，Phys. Rev. X **10**，021009（2020）。[82] R. Nagayama、A. Kolchinsky 和 S. Ito，《Ornstein–Uhlenbeck 过程耗散的振荡-非正规分解》，arXiv:2606.07263。[83] P. A. Robinson、J. A. Henderson、E. Matar、P. Riley 和 R. T. Gray，《皮层网络架构的动力学重连与稳定性约束》，《物理评论快报》**103**，108104（2009）。[84] P. Moretti 和 M. A. Mu˜noz，《脑网络中的格里菲思相与临界性的延展》，《自然·通讯》**4**，2521（2013）。[85] S. Atasoy、I. Donnelly 和 J. Pearson，《人脑网络以连接组特异性谐波的形式运作》，《自然·通讯》**7**，10340（2016）。[86] M. W. Cole、D. S. Bassett、J. D. Power、T. S. Braver 和 S. E. Petersen，《人脑的内在网络架构与任务诱发网络架构》，Neuron **83**，238（2014）。[87] J. M. Shine、P. G. Bissett、P. T. Bell、O. Koyejo、J. H. Balsters、K. J. Gorgolewski、C. A. Moodie 和 R. A. Pol- drack，《功能性脑网络的动力学：认知任务表现期间的整合网络状态》，Neuron **92**，544（2016）。[88] D. J. Watts 和 S. H. Strogatz，《“小世界”网络的集体动力学》，Nature **393**，440（1998）。[89] A.-L. Barab´asi 和 R. Albert，《随机网络中标度的涌现》，Science **286**，509（1999）。[90] WU-Minn HCP 联盟，《人类连接组计划青年成人数据集》，https://www.humanconnectome.org/study/ hcp-young-adult。

《网络拓扑对集体非平衡响应施加谱约束》的补充材料

Dingjie Wu, [1,2] Yaozu Wang, [3] Rong Wang, [1, 2, *] 和 Ying Wu[1, 2, †]

[1] *State Key Laboratory for Strength and Vibration of Mechanical Structures, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China* [2] *School of Aerospace Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China* [3] *College of Intelligence Science and Technology, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*（日期：2026年11月25日）

附录A：网络拓扑与平衡条件

我们考虑一个实可对角化的相互作用矩阵$\mathbf{A}$，其 Re $\lambda_i > 0$，以及一个实对称正定扩散矩阵$\mathbf{D}$。与正文一样，所有变量在时间反演下均为偶变量。令 $R_i(\tau)$ 和 $R_{ij}(\tau)$（其中 $i \neq j$）分别表示正文公式（7）中的第一比值和第二比值。平衡态要求，对于所有 $\tau > 0$，每个有定义的比值都等于 1。由于 $\mathbf{\Gamma} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{U}^{-\dagger} \succ 0$，每个对角元 Γ_{ii} 均为正。因此，对于所有时滞，$R_i(\tau)$ 总是有定义且等于 1，当且仅当 Im $\lambda_i = 0$。对于不同模态，当$\Gamma_{ij} \neq 0$时，$R_{ij}(\tau)$ 有定义；对于所有时滞，它等于 1，当且仅当 $\lambda_i = \lambda_j^*$。这些条件区分出以下四种情形。

a. 互易网络。对于$\mathbf{A} = \mathbf{A}^{\mathrm{T}}$，所有特征值均为实数，且$\mathbf{U}$ 可以取为实正交矩阵。因此，对于每个模态，$R_i(\tau) = 1$。对于均匀独立驱动，$\mathbf{D} = \mathbf{I}$，模态扩散矩阵为 $\mathbf{\Gamma} = \mathbf{I}$，因此对于 $i \neq j$，$\Gamma_{ij} = 0$，并且满足平衡条件。空间异质性驱动或相关驱动可以在$\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\mathbf{D}\mathbf{U}$中产生非对角元。此时，弛豫率不同的相关模态对于 $\tau > 0$满足 $R_{ij}(\tau) \neq 1$。例如，

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} 1 & 0.5 \\ 0.5 & 1 \end{pmatrix}. \tag{A1}$$

这里，$\lambda_1 = 1$、$\lambda_2 = 2$和 $\Gamma_{12} = \Gamma_{21} = 0.5$，得到对于 $\tau > 0$，$R_{12}(\tau) = e^{\tau} \neq 1$。当$\mathbf{D}$ 与$\mathbf{A}$对易时，空间结构化驱动仍与平衡态相容。例如，

$$\mathbf{A} = \mathbf{D} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}. \tag{A2}$$

在$\mathbf{A}$的正交归一特征基中，$\mathbf{\Gamma} = \mathbf{\Lambda}$ 为对角矩阵，因此满足平衡条件。

b. 非互易正规网络。对于$\mathbf{A} \neq \mathbf{A}^{\mathrm{T}}$，但$\mathbf{A}\mathbf{A}^{\mathrm{T}} = \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$，存在正交归一复特征基，且至少有一对共轭特征值对为非实数。对于一般的$\tau > 0$，相应的比值 $R_i(\tau)$ 不等于 1，因此对于任意$\mathbf{D} \succ 0$，都不处于平衡态。对于$\mathbf{D} = \mathbf{I}$，$\mathbf{\Gamma} = \mathbf{I}$，因此不同模态互不相关，时间反演不对称性源于单个模态的涨落。空间异质性或相关驱动还可以在 $\mathbf{\Gamma} = \mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{D}\mathbf{U}$中产生非对角元。例如，

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0.5 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0.5 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{A3}$$

在一个合适的正交归一特征基中，

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} 1+\mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1-\mathrm{i} \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{0.5}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{0.5}{\sqrt{2}} & 1 & \frac{0.5}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{0.5}{\sqrt{2}} & 1 \end{pmatrix}. \tag{A4}$$

这里，$R_1(\tau) = e^{-2\mathrm{i}\tau}$和 $R_{12}(\tau) = e^{(1-\mathrm{i})\tau}$，表明贡献既来自各个模态自身的涨落，也来自不同模态之间的相关涨落。

c. 谱完全为实数的非正规网络。对于$\mathbf{A}\mathbf{A}^{\mathrm{T}} \neq \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$ 且对所有 i 均有 $\lambda_i \in \mathbb{R}$ 的情况，$\mathbf{U}$ 可以取为实矩阵，但不一定正交。因此，$R_i(\tau) = 1$，任何时间反演不对称性都源于不同模态之间的相关涨落。对于$\mathbf{D} = \mathbf{I}$，$\mathbf{\Gamma} = (\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\mathbf{U})^{-1}$由于模态不正交而具有非零非对角元。只要 $\Gamma_{ij} \neq 0$ 和 $\lambda_i \neq \lambda_j$，$R_{ij}(\tau) \neq 1$ 对于$\tau > 0$。例如，

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{D} = \mathbf{I}. \tag{A5}$$

在适当的实特征基下，

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}. \tag{A6}$$

这里，$R_{12}(\tau) = e^{\tau} \neq 1$ 对于 $\tau > 0$。当 $\mathbf{A}\mathbf{D} = \mathbf{D}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ 时，空间相关驱动可以恢复平衡态。对于相同的 $\mathbf{A}$，选择

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{A7}$$

在相同的特征基中给出 $\mathbf{\Gamma} = \mathbf{I}$，满足平衡条件。

* 通讯作者：tobous@mail.xjtu.edu.cn † 通讯作者：wying36@xjtu.edu.cn

d. 具有非实特征值的非正规网络。对于$\mathbf{A}\mathbf{A}^{\mathrm{T}} \neq \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$，只要至少存在一对非实特征值，对于一般的 $\tau > 0$ 和任意 $\mathbf{D} \succ 0$，相应的 $R_i(\tau) \neq 1$。与情形 (iii) 一样，模态非正交性和随机驱动的空间结构共同决定 $\mathbf{\Gamma}$ 的非对角元。例如，

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{D} = \mathbf{I}. \tag{A8}$$

在适当的特征基下，

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} 1+\mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1-\mathrm{i} \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} 1.25 & -0.5 & 0.25 \\ -0.5 & 1 & -0.5 \\ 0.25 & -0.5 & 1.25 \end{pmatrix}. \tag{A9}$$

这里，时间反演不对称性源于均匀独立驱动下单个模态的涨落，以及不同模态之间的相关涨落。

附录 B：谱界的数值验证

我们在正文式（17）和式（18）中，将谱界应用于一个含有$N = 12$ 个节点的二元规则环上；每个节点都与其两侧最近的两个邻居相连 [图1(a)]。相互作用矩阵为 $\mathsf{A} = \gamma\mathsf{I} + g\mathsf{L}$，其中 $\gamma = g = 1$。对于每个给定的驱动异质性幅度，我们随机抽取 10^5 种模式 $\mathsf{d} = \mathbf{1} + \delta\mathsf{d}$，满足 $\delta\mathsf{d} \perp \mathbf{1}$ 且 $d_m > 0$。范数$\|\delta\mathsf{d}\|_2$ 按对数尺度从 10^{-3} 变化至 1，同时将平均驱动强度固定为 1。全局不对称强度 ω 和熵产生率 σ根据正文式（12）中的精确表达式计算。图1(b–d)将这些量及其比值与谱预测进行比较。在(b)和(c)图中，虚线分别表示 $\mu^{\alpha}_{\min+}\|\delta\mathsf{d}\|_2^2$ 和$\mu^{\alpha}_{\max}\|\delta\mathsf{d}\|_2^2$，其中 $\alpha =$分别为 Ω 和 J。在(d)图中，虚线表示广义谱的下界和上界，分别为 $\rho_{\min}$ 和 $\rho_{\max}$。在整个测试范围内，所有抽样得到的全局不对称强度均处于其谱界之内，这与其对驱动强度的精确二次依赖关系一致。对于较弱的驱动异质性，抽样得到的熵产生率及其比值 ω/σ 也处于预测区间内。随着异质性增大，部分熵产生率会超过二次预测上界，而这些比值则超出广义谱界的上下界。这种差异源于精确熵产生率中的因子 $1/(d_m d_n)$。在驱动近乎均匀时，将这些因子替换为 1，可得正文式（15）中的主导阶二次型 $\sigma_2 = \delta\mathsf{d}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Theta}^{\mathrm{J}}\delta\mathsf{d}$。响应谱和广义谱能够精确界定 σ_2 和 ω/σ_2。因此，将它们应用于精确熵产生率及其与 ω 的比值，仅适用于近 equilibrium 区域，此时驱动异质性带来的高阶贡献较小。

附录 C：层次模块化网络的生成与谱界

本节中，响应谱界指的是 $\mu^{\alpha}_{\min+}$和 $\mu^{\alpha}_{\max}$，其中 $\alpha = \Omega, \mathrm{J}$。广义拉普拉斯谱界和非零拉普拉斯谱界分别为（$\rho_{\min}, \rho_{\max}$）和（$k_2, k_N$）。

1. 二值合成层次模块化网络

a. 网络生成。我们生成无自连接的无向二元网络。对于每组参数设置，各层级类别中的节点数 N 和连接数$E = N\langle e\rangle/2$ 均保持固定。最细分区包含 $M_1 = 2^H$ 个模块，每个模块有$n = N/M_1$ 个节点；这些模块递归两两配对，形成更大的模块。节点对根据同时包含这两个节点的最小层级组进行分类。对应地，每个节点的候选邻居数为$c_1 = n - 1$和 $c_\ell = 2^{\ell-2}n$，分别对应 $\ell = 2$、……、$H + 1$。目标连接概率为

$$p_\ell = p_1 r^{\ell-1}, \quad p_1 = \frac{\langle e\rangle}{\sum_{\ell=1}^{H+1} c_\ell r^{\ell-1}}, \quad 0 < r < 1, \tag{C1}$$

参数的选取满足 $p_1 \leq 1$。类别 ℓ 中的未取整连接数为 $E_\ell = N c_\ell p_\ell/2$。~我们首先设定 $E_\ell = \lfloor E_\ell \rfloor$，再将剩余连接分配给小数部分最大的类别，以确保$\sum_\ell E_\ell = E$。层级类别 H_h（其中$h = 0$、……、H）保留类别 1、……、h，并合并其余类别。合并后的目标概率和连接数为

$$p^{(h)}_{\mathrm{out}} = \frac{\sum_{\ell=h+1}^{H+1} c_\ell p_\ell}{\sum_{\ell=h+1}^{H+1} c_\ell}, \qquad E^{(h)}_{\mathrm{out}} = \sum_{\ell=h+1}^{H+1} E_\ell. \tag{C2}$$

对于 $M_1 = 8$，H_3 包含三个嵌套层级，分别有 8、4 和 2 个模块。类别 H_2 和 H_1 分别保留了含 8 和 4 个模块的层级，以及含 8 个模块的层级。在 H_0, 中，所有节点对都属于同一类别，其中$p^{(0)}_{\text{外}} = \langle e\rangle/(N - 1)$。在每个保留或合并后的类别中，按照规定数量对无序节点对进行均匀无放回抽样。各类别使用相同的类别计数E_ℓ独立抽样。因此，每个实现都恰好有 E 条连接，其中 H_0 作为均匀随机参照。

b. 参数设置。基线网络具有$N = 360$、$\langle e\rangle = 60$、$M_1 = 8$和 $r = 0.5$。动力学遵循$\mathbf{A} = \gamma\mathbf{I} + g\mathbf{L}$，基线参数为 $\gamma = g = 1$，弛豫率为 $\lambda_i = \gamma + gk_i$。对于每个网络类别和参数设置，我们生成 100 个实现。

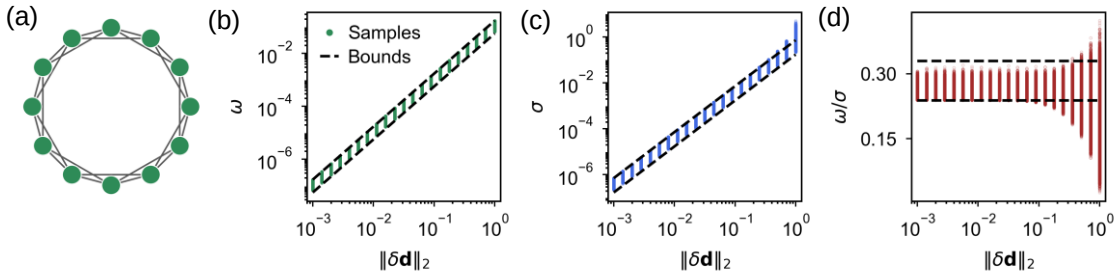

图1. 谱界的数值验证。(a) 一个具有 $N = 12$ 个节点的二元规则环，每个节点均与两侧的两个最近邻相连。(b–d) 全局不对称强度 ω、熵产生率 σ及其比值 ω/σ，分别根据精确稳态表达式计算，作为驱动异质性 $\|\delta\mathbf{d}\|_2$的函数。在每个范数下，点表示 10^5 随机驱动模式$\mathbf{d} = \mathbf{1} + \delta\mathbf{d}$，其中 $\delta\mathbf{d} \perp \mathbf{1}$ 和 $d_m > 0$。动力学参数为 $\gamma = g = 1$。黑色虚线表示正文中方程（17）和（18）的谱预测。关于 ω 的界在整个测试范围内都是精确的，而关于 σ 和 ω/σ 的界仅在平衡态附近的 leading order 下成立。

每次只改变一个参数。网络规模在固定 $\langle e\rangle = 60$时变化为 $N = 360$、720、1440，平均度在固定 $N = 360$时变化为 $\langle e\rangle = 30$、60、90。参数 $M_1 = 8$ 和 $r = 0.5$ 始终保持不变。在每个实现内对特征值排序，并在每个秩上取平均。计算响应算子和拉普拉斯谱时，省略均匀零模。

c. 局部弛豫率的影响。 图2展示了在固定 $g = 1$下，随着 γ 变化，H_3 和H_0 的谱。增大 γ 会提高所有弛豫率，同时保持弛豫模态和速率差不变。较大的总和 $\lambda_i + \lambda_j$ 会减小 κ_{ij}^{Ω} 和 κ_{ij}^{J}，从而降低响应算子谱的两个界。广义谱也会向下移动，使其下界和上界均降低。

d. 耦合强度的影响。 图3展示了在固定 γ =1 时，随着 g 变化，H_3 和 H_0 的谱。增大 g 会扩大弛豫速率差异$g\,(k_i - k_j)$，使 κ_{ij}^{Ω} 和 κ_{ij}^{J} 均增大，并提高两个响应谱界。在强耦合下，$\{\mu_r^{\Omega}\}$ 的谱界趋近于有限极限，这是因为速率差平方和速率和平方都随 g按相同比例缩放。相反，$\{\mu_r^{\mathrm{J}}\}$的谱界则近似随 g线性增长。广义谱界减小，并且在强耦合下近似按 $1/g$ 缩放。

e. 平均度的影响。图4展示了在固定 $N = 360$ 和 $\gamma = g = 1$时，随着 $\langle e\rangle$变化，H_3 和 H_0 的谱。增大 $\langle e\rangle$ 会提高目标连接概率，同时保持它们在不同层级类别间的比例不变。拉普拉斯谱整体上移，与谱和 $\sum_i k_i = N\langle e\rangle$ 增大相一致。在所测试的范围内，$\{\mu_r^{\mathrm{J}}\}$ 的两个界均增大，而 $\{\mu_r^{\Omega}\}$ 和 $\{\rho_r\}$ 的界均减小。 $\{\mu_r^{\Omega}\}$ 的界减小，这与耦合增强时其界增大的情况不同：改变连接性会同时改变拉普拉斯特征值和模态，而改变 g 则会按比例缩放现有耦合。在平均度较高时，H_3 和 H_0 之间的差异变得更加显著。

f. 网络规模的影响。图5展示了在固定 $\langle e\rangle = 60$ 和 $\gamma = g = 1$时，随着 N 增大，H_3 和 H_0 的谱。当 $M_1 = 8$ 固定时，增大 N 会扩大各个模块并降低连接密度。拉普拉斯谱略微展宽，其上界 k_N 增大，而非零特征值的均值 $N\langle e\rangle/(N-1)$ 则基本保持不变。$\{\mu_r^{\Omega}\}$ 的两个界均减小，而 $\{\mu_r^{\mathrm{J}}\}$ 的界减小幅度较小。广义谱界也有所下降，尤其是 H_3，中的 $\rho_{\max}$，使其与 H_0 的差异缩小。在这些参数扫描中，与 H_0 相比，H_3 的下响应界 $\mu_{\min+}^{\Omega}$ 和 $\mu_{\min+}^{\mathrm{J}}$ 仍较小，而上广义界 $\rho_{\max}$ 较大。

2. 加权合成分层模块化网络

a. 网络生成。 加权网络通过为每个二元网络实现中现有的连接赋予正权重来构建。对于每个实现，我们独立抽取样本 $z_e \sim \mathcal{N}(0,1)$、 $e = 1$、……、 E，并设定

$$W_e = E\,\frac{\exp\left[z_e\sqrt{\ln(1+\mathrm{CV}^2)}\right]}{\sum_{q=1}^{E}\exp\left[z_q\sqrt{\ln(1+\mathrm{CV}^2)}\right]}. \tag{C3}$$

在每个实现中，各层级类别和 CV 值使用相同的高斯样本。对于每个类别，权重会随机分配给现有连接，并且在 CV 变化时保持分配不变。权重以对称方式分配，从而保持 $W_{ij} = W_{ji}$。归一化将平均连接权重固定为 1，并将连接总权重固定为 $\sum_{e=1}^{E} W_e = E$。因此，匹配的层级类别共享同一个权重集合，而改变 CV 会在二元连接结构和总权重固定的情况下改变权重异质性。当 CV 为 $= 0$时，可恢复二元网络。对于一组正的连接权重，

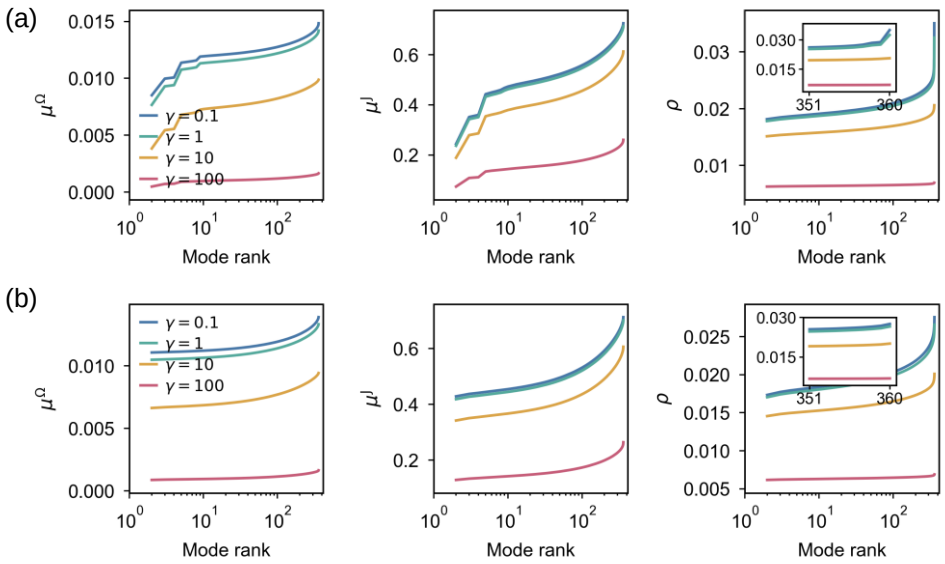

图 2. 局部弛豫率 γ 对谱界的影响。第 (a) 和 (b) 行分别显示 H_3 和 H_0,。各列从左至右显示 $\{\mu_r^{\Omega}\}$、 $\{\mu_r^{J}\}$和 $\{\rho_r\}$。颜色表示 $\gamma = 0.1$，1，10，100，其中 $g = 1$ 并采用基准二值网络参数。

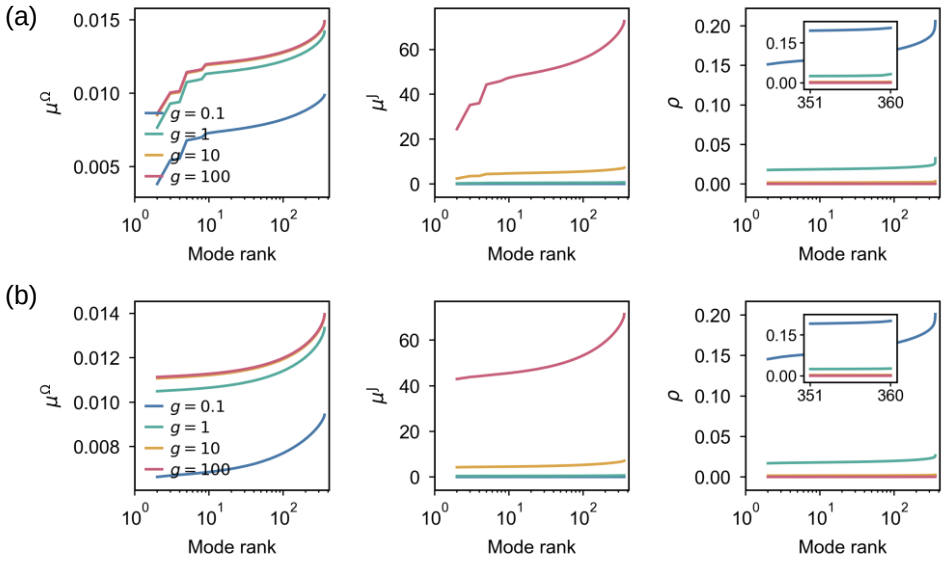

图 3. 耦合强度 g 对谱界的影响。第 (a) 和 (b) 行分别显示 H_3 和 H_0,。各列从左至右显示 $\{\mu_r^{\Omega}\}$、 $\{\mu_r^{J}\}$和 $\{\rho_r\}$。颜色表示 $g = 0.1$，1，10，100，其中 $\gamma = 1$ 并采用基准二值网络参数。

定义 $W_m = E^{-1}\sum_{e=1}^{E} W_e$。经验变异系数为

$$\mathrm{CV}_{\mathrm{emp}} = \frac{\sqrt{E^{-1}\sum_{e=1}^{E}(W_e - W_m)^2}}{W_m}. \qquad \text{(C4)}$$

此处 $W_m = 1$，但有限采样可能导致变异系数 $_{\mathrm{emp}}$ 与底层对数正态分布规定的变异系数之间存在差异。

b. 参数设置。我们令变异系数 $= 0$，0。5，1，1。5，2，取值为 $N = 360$、$\langle e\rangle = 60$、$M_1 = 8$、$r = 0.5$ 和 $\gamma = g = 1$。每个网络类别包含 100 个实现。在每个实现中对谱进行排序，并按各个秩取平均；计算响应算子和拉普拉斯谱时，省略均匀零模。

c. 权重异质性的影响。图 6 展示了随着变异系数增加，H_3 和 H_0 的谱。两个响应算子的谱主要通过其上界 $\mu_{\max}^{\Omega}$ 和 $\mu_{\max}^{J}$ 的显著增加而变宽，而

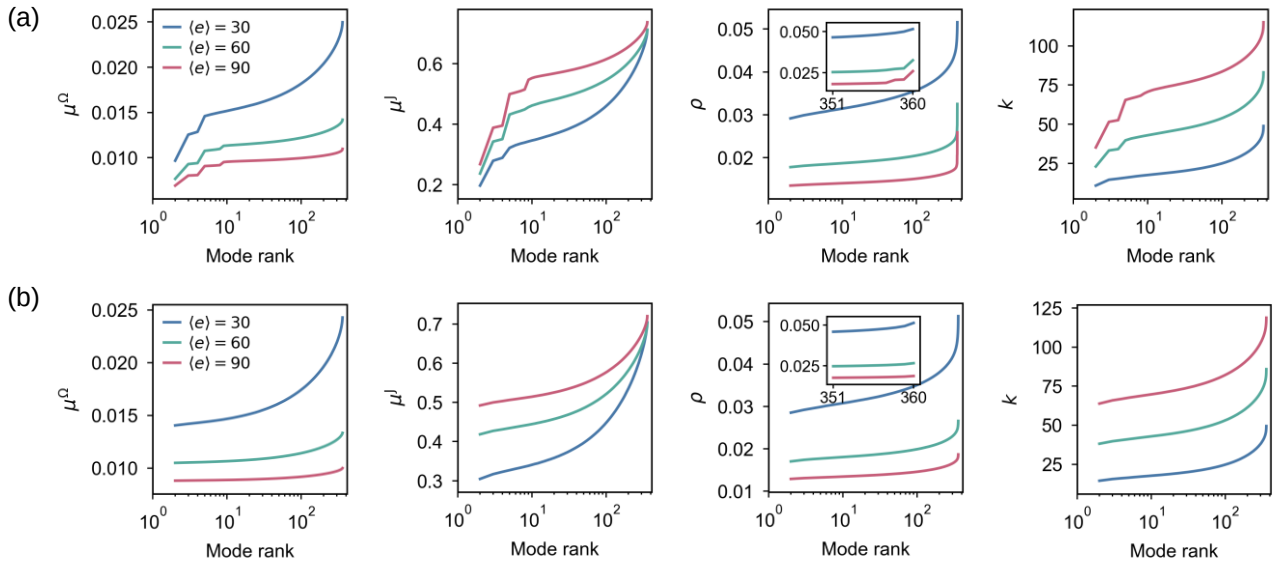

图4. 平均度 $\langle e\rangle$ 对谱界的影响。第(a)行和第(b)行分别显示H_3 和H_0, 。各列从左到右依次显示$\{\mu_r^{\Omega}\}$、 $\{\mu_r^{\mathrm{J}}\}$、 $\{\rho_r\}$和 $\{k_i\}$ 。颜色表示 $\langle e\rangle = 30$， 60， 90， 其中 $N = 360$、 $\gamma = g = 1$以及其余网络参数均固定为基准值。

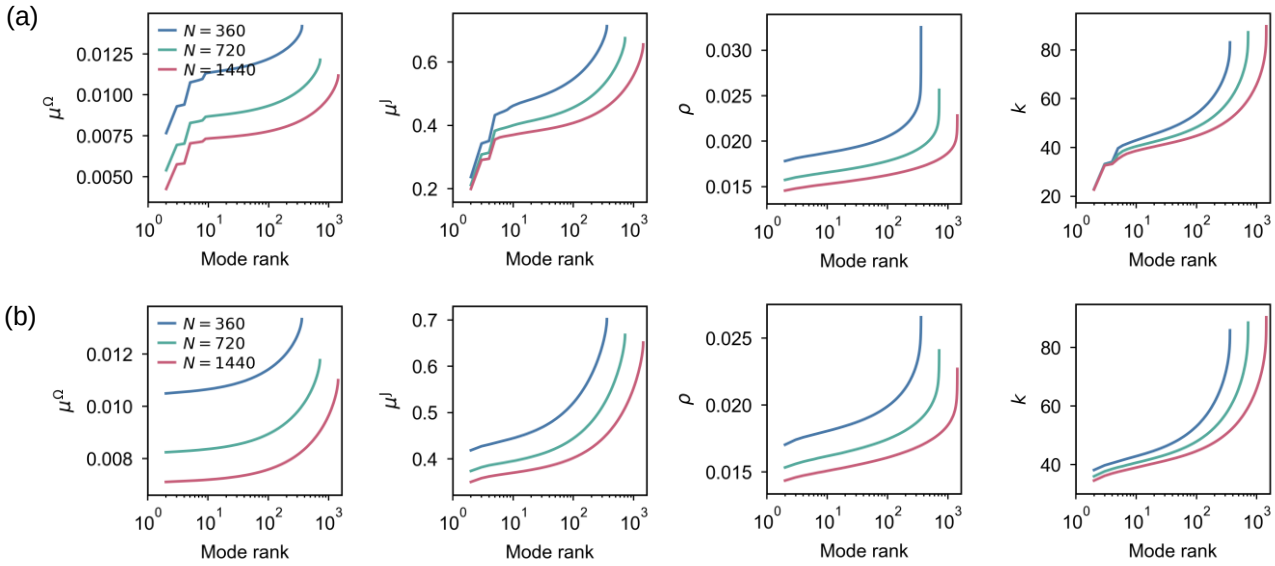

图5. 网络规模 N 对谱界的影响。第(a)行和第(b)行分别显示H_3 和H_0, 。各列从左到右依次显示 $\{\mu_r^{\Omega}\}$、 $\{\mu_r^{\mathrm{J}}\}$ $\{\rho_r\}$ $\{k_i\}$ $N = 360$ 720 1440 $\langle e\rangle = 60$ $\gamma = g = 1$ 、，和。颜色表示，，，其中，，以及其余网络参数均固定为基准值。

其下界的变化相对较小。拉普拉斯上界 k_N 也随之增加，在保持谱和 $\sum_i k_i = 2E$ 不变的同时引入更快的弛豫率。与此同时，下义化界 $\rho_{\min}$ 降低。对于有贡献的模态对而言，这一趋势与$\kappa_{ij}^{\Omega}/\kappa_{ij}^{\mathrm{J}} = 2/(\lambda_i + \lambda_j)$一致，因为更大的弛豫率之和会产生更小的比值。这些效应在层级网络和随机网络中均会出现。

3. 结构连接性网络中的 HMR 和 HMH

根据每位参与者的加权无向结构连接矩阵 $\mathbf{W}$，分别构建替代网络，其中包含 $N = 360$ 和 $W_{ii} = 0$。其 E 现有连接的权重记为 W_e，每条无向连接仅计一次。这两种方法均保留节点数量

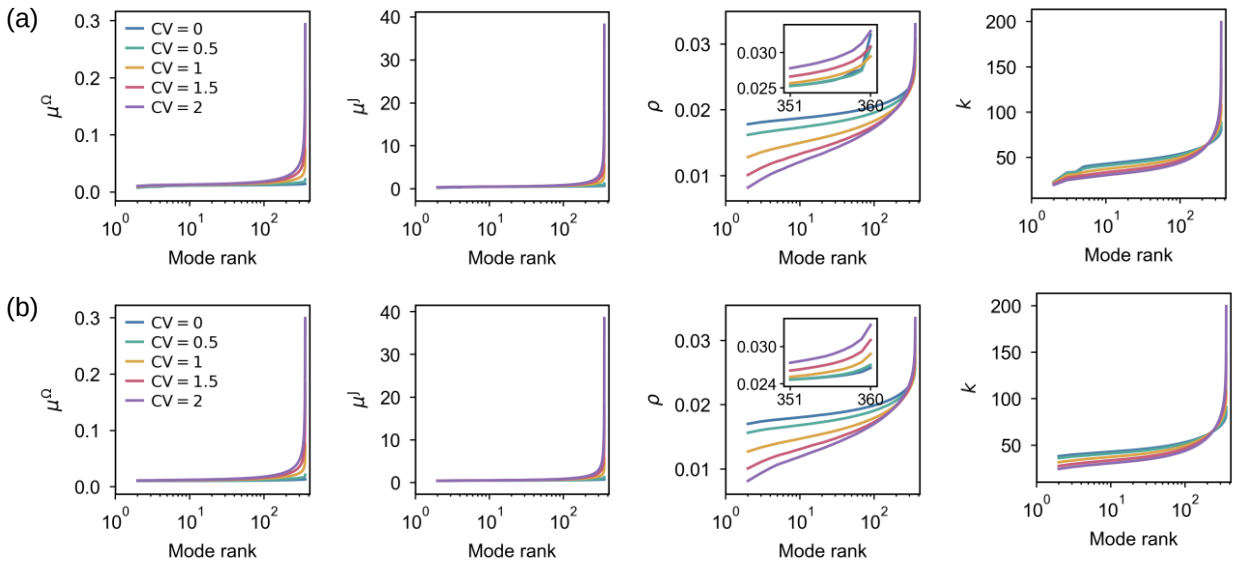

图6. 权重异质性对谱界的影响。行 (a) 和 (b) 分别显示 H_3 和 H_0,。列从左到右依次显示 $\{\mu_r^{\Omega}\}$、 $\{\mu_r^{\mathrm{J}}\}$、 $\{\rho_r\}$ 和 $\{k_i\}$。颜色表示 CV $= 0$，0。5，1，1。5，2，其中 $\gamma = g = 1$ 和基线网络参数保持不变。随着 CV 变化，二元连接结构和连接总权重保持固定。

和连接数量以及每位参与者的连接总权重，不进行额外的归一化或阈值处理。

a. 层次模块随机化。嵌套划分根据按特征值递增排序的经验拉普拉斯模态确定。$\mathbf{U}_2$ 的符号将网络划分为两个模块，而$\mathbf{U}_3$ 的符号则将每个模块进一步细分，最多形成四个更精细的模块。随机化过程中，这些划分保持不变。在每个选定模块内，从所有可能的节点对中均匀抽取无序节点对，且不重复抽取，并使其数量与经验连接数相等。原始非零权重随机分配给这些节点对，从而保留模块内的连接数和权重集合。选定模块之间的连接保持不变。对于 H_2,，在更精细的模块内进行随机化；对于 H_1,，在两个最大的模块内进行随机化；对于 H_0,则在整个网络范围内进行随机化。每种条件均直接由经验结构连接生成，每位参与者各有一次独立实现。节点度和节点强度不受约束。

b. 层次模块均质化。连接位置保持不变，现有权重则转换为

$$W_e^{(\upsilon)} = \upsilon W_e + (1-\upsilon)W_m, \qquad 0 \le \upsilon \le 1, \tag{C5}$$

其中， $W_m = E^{-1}\sum_{e=1}^{E} W_e$ 是现有连接的平均权重。缺失连接保持为零，并对权重进行对称分配。 υ 的每个值都直接应用于经验权重。当 $\upsilon = 1$时，可恢复经验结构连接，而 $\upsilon = 0$ 则为每个现有连接赋予 W_m 。利用公式（C4），变异系数

满足

$$\mathrm{CV}(\upsilon) = \upsilon\,\mathrm{CV}_{\mathrm{emp}}, \tag{C6}$$

其中，$\mathrm{CV}_{\mathrm{emp}}$ 根据经验结构连接权重计算。

c. HMR 和 *HMH* 中的拉普拉斯谱。图 7 比较了经验结构连接及其替代网络的拉普拉斯谱。在 HMR 中，逐步扩大随机化区域会提高下界 k_2，而上界 k_N 则相对保持不变。在 HMH 中，降低 υ 会提高 k_2 并降低 k_N；完全权重均质化（$\upsilon = 0$）则会产生最窄的谱。这两种处理均保留谱和$\sum_i k_i = 2EW_m$。在 γ和 g固定时，这些变化会缩小非均匀弛豫率的范围 $\lambda_i = \gamma + gk_i$, $i \ge 2$。

附录D：参与者与数据处理

1. 数据采集

数据集来自 WU–Minn 人类连接组计划（HCP）青年成人数据库 [1]，包含 993 名健康青年成人（年龄范围为 22–36 岁）的结构磁共振成像（MRI）、扩散加权成像（DWI）和静息态功能磁共振成像（fMRI）数据。每位参与者在两次扫描会话中完成了四次静息态功能磁共振成像扫描序列，每次扫描序列包含 1，200 个时间点，重复时间为 TR $= 0.72$ 秒 [2],，总计 4，800 个时间点。

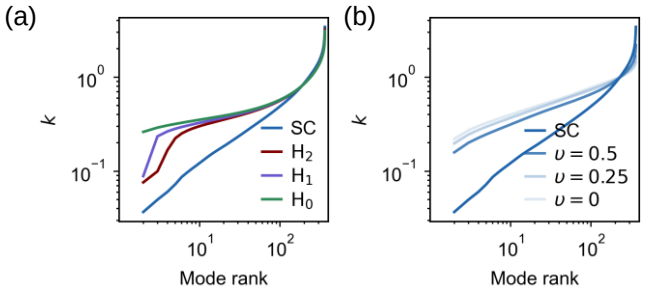

图7. 人类结构连接组和替代网络的拉普拉斯谱。(a) HMR，蓝色、红色、紫色和绿色曲线分别表示 SC、H_2, H_1，和 H_0, 。(b) HMH，颜色逐渐变浅的蓝色曲线分别表示 $\upsilon = 1$ (SC)、0.5、0.25 和 0。所有网络均包含 $N = 360$ 个皮层区域。对每位参与者的特征值分别排序，并对 993 位参与者中各排名的特征值取平均。省略了均匀零模。

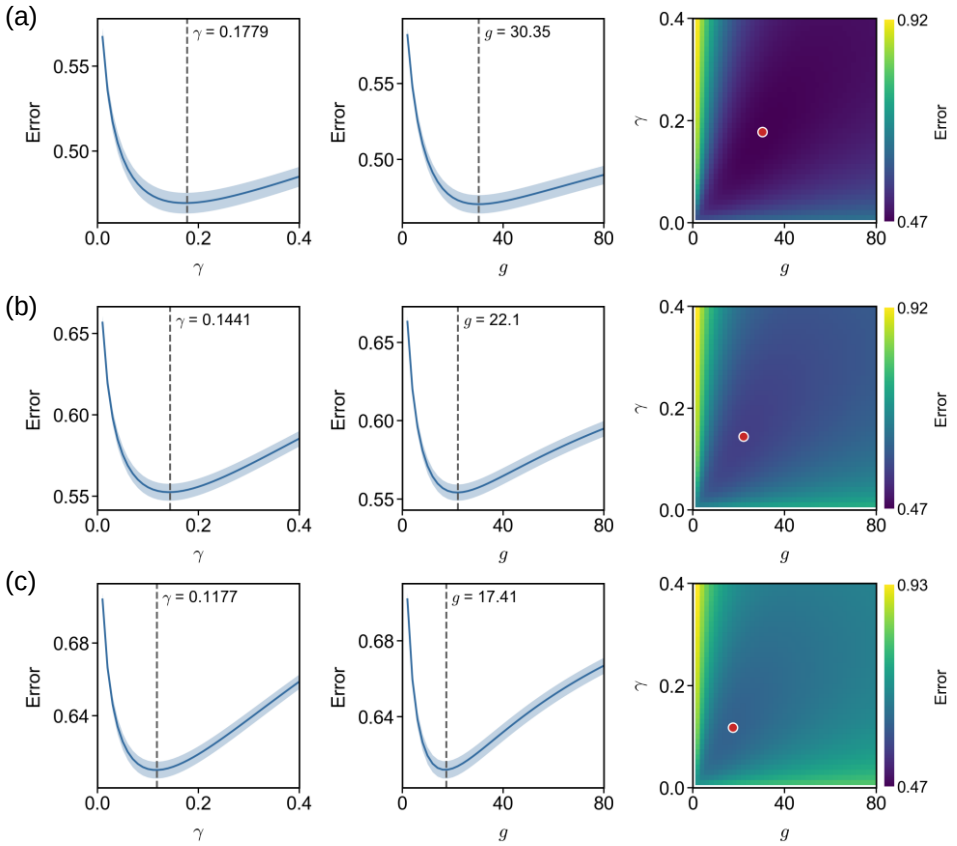

图8. 对不同拟合时滞集合进行参数优化。行 (a–c) 分别对应 $\mathcal{T}_{01}$、 $\mathcal{T}_{012}$ 和 $\mathcal{T}_{0123}$。左列和中列分别显示 γ 和 g 的平均拟合误差剖面：在每位参与者内对另一个参数进行最小化后，再对参与者取平均。阴影表示均值的逐点 95% 置信区间。右侧面板显示参与者平均误差景观，采用统一的颜色刻度。虚线和红色标记表示各参与者最优参数估计值的均值。

2. 静息态功能磁共振成像数据处理

我们使用了经过 HCP最小预处理流程 [3]预处理的静息态功能磁共振成像数据。预处理包括校正梯度非线性、头部运动和磁敏感性诱导畸变，随后进行配准至结构图像、对齐至标准空间，并投影到皮层表面。预处理后的数据以CIFTI格式的灰坐标时间序列提供。使用HCP多模态分区图谱 [4]将大脑皮层划分为360个区域（每个半球180个）。

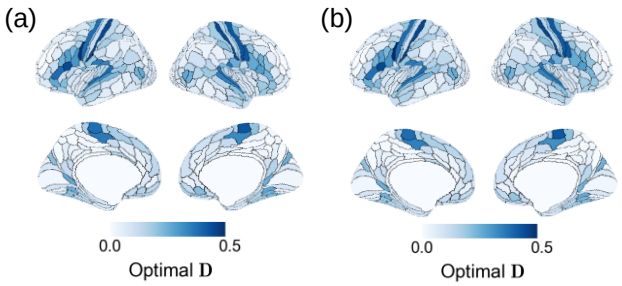

图9。使用额外滞后推断的最优随机驱动模式。面板 (a) 和 (b) 分别显示 $\mathcal{T}_{012}$ 和 $\mathcal{T}_{0123}$ 的组平均模式。在每位参与者内进行平均之前，将区域驱动强度进行最小–最大归一化至 $[0,1]$ 。顶部和底部行分别显示外侧视图和内侧视图。两个面板使用相同的颜色刻度。

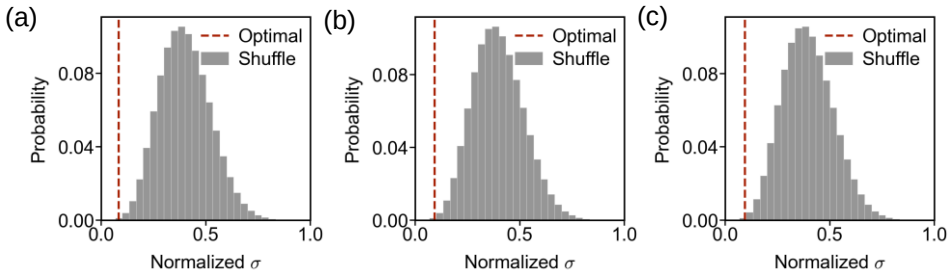

图10。最优驱动模式和空间打乱驱动模式的熵产生率。面板 (a–c) 分别对应于 $\mathcal{T}_{01}$、 $\mathcal{T}_{012}$ 和 $\mathcal{T}_{0123}$。在每位参与者内，将最优熵产生率和 10^5 空间打乱熵产生率共同进行最小–最大归一化至 $[0,1]$ 。灰色直方图显示所有归一化空间打乱熵产生率在 30 个等宽区间中的比例。红色虚线表示各参与者最优模式的平均归一化 σ 。

对于每次扫描，先对每个区域内的皮层灰坐标信号取平均，以获得区域血氧水平依赖（BOLD）时间序列，然后进行0.01至0.1 Hz的带通滤波，以减少缓慢漂移和高频涨落。未进行全局信号回归。时间处理在每次扫描中分别进行，之后按照采集顺序连接四次扫描，从而为后续分析得到每个区域4,800个时间点。

3. 弥散磁共振成像数据处理

DWI数据使用 HCP 最小预处理流程进行预处理 [3]，，包括校正梯度非线性、受试者运动、涡流和磁敏感性诱导畸变，随后配准至对应的 T1加权图像。进一步处理在 MRtrix3 [5] 中完成。使用 *dhollander* 算法 [6]，估计白质、灰质和脑脊液的响应函数，随后进行多壳层、多组织约束球面反卷积 [7]。解剖约束的纤维束追踪使用由 T1 加权图像生成的五组织类型图像，并启用回溯功能 [8]。使用 iFOD2算法 [9], 生成概率性流线，并根据白质纤维取向分布进行动态播种。每位参与者生成一千万条流线，随后使用 SIFT2 [10]进行加权。流线端点被分配至同一多模态分区图谱定义的 360 个皮层区域。区域 i 与 j 之间的结构连接权重定义为 $W_{ij} = \sum_{s \in \mathcal{S}_{ij}} \mu_s$，其中 $\mathcal{S}_{ij}$ 包含连接这两个区域的流线，而 μ_s 是流线 s的 SIFT2 权重。由此，为每位参与者生成一个非负、加权、无向的 360×360 结构连接矩阵，并将自连接设为零。

附录 E：优化设置与推断随机驱动的稳健性

1. 参数优化与拟合误差

正文附录 H 中的推断程序分别应用于 993 名参与者，每名参与者均有$N = 360$个脑区。搜索网格包含$\gamma = 0.01$, 0.02，.....，0.40 和 $g = 2$，4，.....，80，共 1600 个候选参数对。对于每一组参数对，使用 MATLAB 的 quadprog 中的内点凸算法优化驱动强度，并满足 $d_i \geq 10^{-6}$。使拟合目标的均方相对弗罗贝尼乌斯误差最小的参数对，

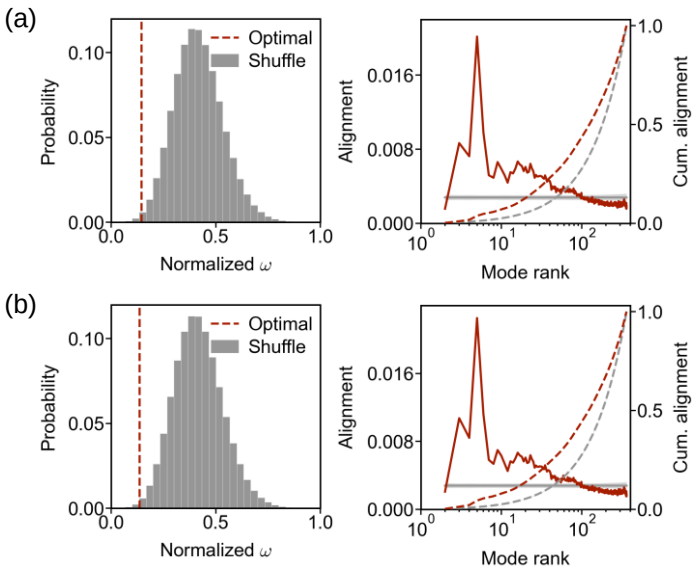

图11. 纳入额外滞后的拟合所对应的全局不对称强度和驱动对齐度。行(a)和(b)分别对应$\mathcal{T}_{012}$ 和 $\mathcal{T}_{0123}$。左侧面板展示了每位参与者内部对最优强度和 10^5 置乱强度进行联合最小–最大归一化后的 ω。灰色直方图汇总了所有参与者的归一化置乱强度，红色虚线表示最优模式的均值。右侧面板展示了最优模式（红色）和置乱模式（灰色）与 $\boldsymbol{\Theta}^{\Omega}$非均匀模态的对齐情况，这些模态按每位参与者内部特征值递增的顺序排列。实线表示平均对齐强度（左轴），虚线表示平均累积对齐度（右轴）。灰色阴影表示组水平置乱分布的逐点中心95%区间。

以及与之对应的优化后驱动强度，共同定义了最优拟合。主要分析使用 $\mathcal{T}_{01}=\{0,1\}$，联合拟合零滞后协方差和一阶滞后互相关不对称性。其他拟合使用 $\mathcal{T}_{012}=\{0,1,2\}$ 和$\mathcal{T}_{0123}=\{0,1,2,3\}$，时滞以采样间隔（TR $=0.72$秒）为单位。对于每种拟合方案，均使用相同的网格与约束重新优化所有参数和驱动强度。图 8 总结了拟合误差和参数估计值。群体汇总纳入了整个网格上的误差均为有限值且最优参数估计值为有限值的拟合结果。

2. 利用额外滞后推断空间驱动模式

使用$\mathcal{T}_{012}$ 和 $\mathcal{T}_{0123}$ [图 9]推断出的组平均驱动模式，保留了正文图 4(b)所示 $\mathcal{T}_{01}$ 拟合的主要空间特征。可视化时采用参与者层面的最小-最大归一化，而响应分析则使用原始拟合驱动强度。

3. 空间洗牌下的熵产生

对于每位参与者和每种拟合方案，我们使用最优的 $\boldsymbol{\Theta}^{\mathrm{J}}$ 和，根据个体结构连接组构建$\boldsymbol{\Theta}^{\mathrm{J}}$。固定算子后，我们计算稳态下的精确熵产生率，$\sigma=-\sum_m(\boldsymbol{\Theta}^{\mathrm{J}}\mathbf{d})_m/d_m$，分别对应最优驱动模式和其区域强度的 10^5 种空间置换。对每位参与者独立抽取置换，并保留驱动强度的分布。在每位参与者的每种拟合方案内，我们对最优速率和打乱后的速率进行联合最小–最大归一化，使其处于 $[0,1]$。针对每个置换索引，我们对参与者的归一化打乱速率取平均，得到组均值。在三种拟合方案中，最优模式的平均归一化 σ 均低于所有 10^5 个打乱后的组均值（置换检验，$p<10^{-4}$）[图 10]。

4. 纳入额外时滞的拟合所对应的全局不对称强度和模态对齐度

使用相同的空间置换，我们在每位参与者和每种拟合方案中固定 $\omega=\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Theta}^{\Omega}\mathbf{d}$，并评估 $\boldsymbol{\Theta}^{\Omega}$。归一化和组置换检验遵循上述针对 σ所述的流程。我们按照正文中的方法计算对齐强度。对于每个置换索引，我们对参与者在相同模态秩上的对齐强度取平均，并对连续模态秩求和，以获得累积对齐曲线。10^5 组曲线给出了各项指标的均值和逐点中心95%区间。对于两种

额外的滞后拟合中，最优模式的归一化 ω 均值低于打乱模式，并且与对应较小特征值的模态对齐得更强。

其累积对齐度在较低模态秩处也上升得更快 [图 11]，，与正文图4(c,d)一致。

[1] D. C. Van Essen、S. M. Smith、D. M. Barch、T. E. J. Behrens、E. Yacoub 和 K. Ugurbil（WU-Minn HCP 联盟），WU-Minn 人类连接组计划：概述，NeuroImage **80**，62（2013）。[2] S. M. Smith、C. F. Beckmann、J. Andersson、E. J. Auer- bach、J. Bijsterbosch、G. Douaud、E. Duff、D. A. Fein- berg、L. Griffanti、M. P. Harms、M. Kelly、T. Laumann、K. L. Miller、S. Moeller、S. Petersen、J. Power、G. Salimi- Khorshidi、A. Z. Snyder、A. T. Vu、M. W. Woolrich、J. Xu、E. Yacoub、K. U˘ gurbil、D. C. Van Essen 和 M. F. Glasser（WU-Minn HCP 联盟），人类连接组计划中的静息态功能磁共振成像，NeuroIm- age **80**，144（2013）。[3] M. F. Glasser、S. N. Sotiropoulos、J. A. Wilson、T. S. Coalson、B. Fischl、J. L. Andersson、J. Xu、S. Jbabdi、M. Webster、J. R. Polimeni、D. C. Van Essen 和 M. Jenkinson（WU-Minn HCP 联盟），人类连接组计划的最简预处理流程，NeuroImage **80**，105（2013）。[4] M. F. Glasser、T. S. Coalson、E. C. Robinson、C. D. Hacker、J. Harwell、E. Yacoub、K. Ugurbil、J. Andersson、C. F. Beckmann、M. Jenkinson、S. M. Smith 和 D. C. Van Essen，人类大脑皮层的多模态分区，Nature **536**，171（2016）。[5] J.-D. Tournier、R. Smith、D. Raffelt、R. Tabbara、T. Dhollander、M. Pietsch、D. Christiaens、B. Jeurissen、C.-H. Yeh 和 A. Connelly，MRtrix3：一种快速、灵活且开放的医学图像处理软件框架——和可视化，NeuroImage **202**, 116137 (2019). [6] T. Dhollander, R. Mito, D. Raffelt, and A. Connelly, 改进三组织约束球面反卷积的白质响应函数估计，《国际磁共振医学学会》第27届年会论文集，摘要编号 0555 (2019)，会议摘要。[7] B. Jeurissen, J.-D. Tournier, T. Dhollander, A. Connelly, and J. Sijbers, 多组织约束球面反卷积用于改进多壳层扩散MRI数据分析，NeuroImage **103**, 411 (2014). [8] R. E. Smith, J.-D. Tournier, F. Calamante, and A. Connelly, 解剖学约束纤维束示踪：通过有效利用解剖信息改进扩散MRI流线纤维追踪，NeuroImage **62**, 1924 (2012). [9] J.-D. Tournier, F. Calamante, and A. Connelly, 通过对纤维取向分布进行二阶积分改进概率流线纤维束示踪，《国际磁共振医学学会》第18届年会论文集，摘要编号 1670 (2010)，会议摘要。[10] R. E. Smith, J.-D. Tournier, F. Calamante, and A. Connelly, SIFT2：利用流线纤维束示踪实现脑白质连接的密集定量评估，NeuroImage **119**, 338 (2015).