

効率とパワーのトレードオフ

大上由人

2024 年 8 月 18 日

1 エントロピー生成率の下限

熱浴のエントロピー生成率は、

$$\theta_{j \rightarrow k}(t) = \log \left(\frac{\omega_{j \rightarrow k}(t)}{\omega_{k \rightarrow j}(t)} \right) \quad (1.1)$$

$$= \log \left(\frac{R_{kj}(t)}{R_{jk}(t)} \right) \quad (1.2)$$

である。このとき、熱浴と系の全エントロピー生成は、

$$\sigma(t) = \frac{d}{dt} S(\mathbf{p})(t) + \langle \hat{\theta}(t) \rangle_t \quad (1.3)$$

である。ここで、 $S(\mathbf{p})$ は系のシャノンエントロピーであり、 $\langle \hat{\theta}(t) \rangle_t$ は時刻 t における熱浴のエントロピー生成の期待値である。このとき、エントロピー生成の下限として、以下が知られている。

Thm: エントロピー生成の下限

エントロピー生成率は、以下の不等式を満たす:

$$\sigma(t) \geq \sum_{j,k(j \neq k)} \frac{(R_{kj}(t)p_j(t) - R_{kj}(t)p_k(t))^2}{R_{kj}(t)p_j(t) + R_{jk}(t)p_k(t)} \geq 0 \quad (1.4)$$

ただし、分子について、

$$\dot{j}_{j \rightarrow k}(t) = R_{kj}(t)p_j(t) - R_{kj}(t)p_k(t) \quad (1.5)$$

である。

この式は、カレントが nonzero であるとき、エントロピー生成が nonzero になることを表している。

Prf

$$\frac{d}{dt}S(\mathbf{p}(t)) = -\frac{d}{dt}\sum_k^{\Omega} p_k(t) \log p_k(t) \quad (1.6)$$

$$= -\sum_k^{\Omega} \frac{d}{dt} p_k(t) \log p_k(t) - \sum_k^{\Omega} p_k(t) \frac{d}{dt} \log p_k(t) \quad (1.7)$$

$$= -\sum_k^{\Omega} \frac{d}{dt} p_k(t) \log p_k(t) - \sum_k^{\Omega} \frac{d}{dt} p_k(t) \quad (1.8)$$

$$= -\sum_k^{\Omega} \frac{d}{dt} p_k(t) \log p_k(t) \quad (\because \text{規格化条件}) \quad (1.9)$$

$$= -\sum_{j,k}^{\Omega} R_{kj}(t) p_j(t) \log p_j(t) \quad (1.10)$$

$$= \sum_{j,k}^{\Omega} R_{kj}(t) p_j(t) \log \left(\frac{p_j(t)}{p_k(t)} \right) \quad (\because \sum_k^{\Omega} R_{kj}(t) = 0) \quad (1.11)$$

である。また、

$$\left\langle \hat{\theta}(t) \right\rangle_t = \sum_{j,k(j \neq k)}^{\Omega} R_{kj}(t) p_j(t) \log \left(\frac{R_{kj}(t)}{R_{jk}(t)} \right) \quad (1.12)$$

$$= \sum_{j,k}^{\Omega} R_{kj}(t) p_j(t) \log \left(\frac{R_{kj}(t) p_j(t)}{R_{jk}(t) p_k(t)} \right) \quad (\because \log 1 = 0) \quad (1.13)$$

である。これらを用いて、

$$\sigma(t) = \frac{d}{dt}S(\mathbf{p}(t)) + \left\langle \hat{\theta}(t) \right\rangle_t \quad (1.14)$$

$$= \sum_{j,k}^{\Omega} R_{kj}(t) p_j(t) \log \left(\frac{R_{kj}(t) p_j(t)}{R_{jk}(t) p_k(t)} \right) \quad (1.15)$$

$$= \sum_{j,k(j \neq k)}^{\Omega} R_{kj}(t) p_j(t) \log \left(\frac{R_{kj}(t) p_j(t)}{R_{jk}(t) p_k(t)} \right) \quad (1.16)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{j,k(j \neq k)}^{\Omega} (R_{kj}(t) p_j(t) - R_{jk}(t) p_k(t)) \log \left(\frac{R_{kj}(t) p_j(t)}{R_{jk}(t) p_k(t)} \right) \quad (\because \text{添え字に対する対称性}) \quad (1.17)$$

$$\geq \sum_{j,k(j \neq k)}^{\Omega} \frac{(R_{kj}(t) p_j(t) - R_{jk}(t) p_k(t))^2}{2(R_{kj}(t) p_j(t) + R_{jk}(t) p_k(t))} \quad \left(\because \frac{1}{2}(a-b) \log(a/b) \geq \frac{(a-b)^2}{2(a+b)} \right) \quad (1.18)$$

である。よって示された。□

2 Improved Shiraishi-Saito inequality

$g_{j \rightarrow k}(t)$ を、時刻 t における jump quantity とし、

$$g_{j \rightarrow k}(t) = -g_{k \rightarrow j}(t) \quad (j \neq k) \quad (2.1)$$

とする。このとき、以下の不等式が成立する。

Thm: Improved Shiraishi-Saito inequality

jump quantity の平均値は、以下の不等式を満たす:

$$|\langle \hat{g} \rangle_t| \leq \sqrt{\sigma(t) \Xi_g(t)} \quad (2.2)$$

ただし、 $\sigma(t)$ はエントロピー生成率であり、 $\Xi_g(t)$ は、

$$\Xi_g(t) = \frac{1}{4} \sum_{j,k(j \neq k)}^{\Omega} (R_{kj}(t)p_j(t) + R_{jk}(t)p_k(t))g_{j \rightarrow k}(t)^2 \quad (2.3)$$

である。

Prf

jump quantity の平均値は、

$$\langle \hat{g}(t) \rangle_t = \sum_{j,k(j \neq k)}^{\Omega} p_j(t) \omega_{j \rightarrow k}(t) g_{j \rightarrow k}(t) \quad (2.4)$$

$$= \sum_{j,k(j \neq k)}^{\Omega} R_{kj}(t) p_j(t) g_{j \rightarrow k}(t) \quad (2.5)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{j,k(j \neq k)}^{\Omega} (R_{kj}(t)p_j(t) - R_{jk}(t)p_k(t))g_{j \rightarrow k}(t) \quad (2.6)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{j,k(j \neq k)}^{\Omega} (R_{kj}(t)p_j(t) - R_{jk}(t)p_k(t))g_{j \rightarrow k}(t) \quad (\because \text{添え字に対する対称性}) \quad (2.7)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{j,k(j \neq k)}^{\Omega} \frac{R_{kj}(t)p_j(t) - R_{jk}(t)p_k(t)}{\sqrt{R_{kj}(t)p_j(t) + R_{jk}(t)p_k(t)}} \sqrt{R_{kj}(t)p_j(t) + R_{jk}(t)p_k(t)} g_{j \rightarrow k}(t) \quad (2.8)$$

である。ここで、Cauchy-Schwarz の不等式を用いると、

$$|\langle \hat{g} \rangle_t| \leq \sqrt{\sum_{j,k(j \neq k)}^{\Omega} \frac{(R_{kj}(t)p_j(t) - R_{jk}(t)p_k(t))^2}{R_{kj}(t)p_j(t) + R_{jk}(t)p_k(t)} \cdot \frac{1}{4} \sum_{j,k(j \neq k)}^{\Omega} (R_{kj}(t)p_j(t) + R_{jk}(t)p_k(t))g_{j \rightarrow k}(t)^2} \quad (2.9)$$

である。ここで、第一項は $\sigma(t)$ である。第二項を $\Xi_g(t)$ とすると、

$$|\langle \hat{g} \rangle_t| \leq \sqrt{\sigma(t) \Xi_g(t)} \quad (2.10)$$

である。よって示された。□

この不等式を変形することで、

$$\sigma(t) \geq \frac{|\langle \hat{g} \rangle_t|^2}{\Xi_g(t)} \quad (2.11)$$

となる。これは、jump quantity の平均値が nonzero であるとき、エントロピー生成が nonzero になることを表している。

このとき、

$$\Xi_g(t) = \frac{1}{4} \sum_{j,k(j \neq k)}^{\Omega} (R_{kj}(t)p_j(t) + R_{jk}(t)p_k(t))g_{j \rightarrow k}(t)^2 \quad (2.12)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{j,k(j \neq k)}^{\Omega} (R_{kj}(t)p_j(t))g_{j \rightarrow k}(t)^2 \quad (2.13)$$

は一般には有限であることが知られている。とくに、jump quantity が有限かつ、escape rate が有限であるとき、すなわち、

$$|g_{j \rightarrow k}(t)| \leq g_0, \quad \lambda_j \leq \lambda_0 \quad (2.14)$$

であるとき、

$$\Xi_g(t) \leq \frac{1}{2} g_0^2 \lambda_0 \quad (2.15)$$

である。

得られた不等式を変形すると、

$$\sigma(t) \geq \frac{|\langle \hat{g} \rangle_t|^2}{\Xi_g(t)} \quad (2.16)$$

である。これは、jump quantity の平均値が nonzero であるとき、エントロピー生成率が nonzero になることを表している。

また、時間平均をとることで、以下の不等式が成り立つことが知られている。

Thm:Improved Shiraishi-Saito inequality(時間平均)

jump quantity の時間平均値は、以下の不等式を満たす:

$$\overline{\Xi}_g^{-1} \left(\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \langle \hat{g} \rangle_t \right)^2 \leq \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \langle \hat{\theta} \rangle_t \quad (2.17)$$

ただし、 $\overline{\Xi}_g$ は、

$$\overline{\Xi}_g = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \Xi_g(t) \quad (2.18)$$

である。

Prf

普通の Shiraishi-Saito 不等式より、

$$\langle \hat{g} \rangle_t \leq \sqrt{\sigma(t) \Xi_g(t)} \quad (2.19)$$

である。Cauchy-Schwarz の不等式より、

$$\frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \langle \hat{g}(t) \rangle_t \leq \sqrt{\frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \sigma(t) \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \Xi_g(t)} \quad (2.20)$$

である。ところで、

$$\frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \langle \sigma(t) \rangle_t = \frac{1}{\tau} (S(\mathbf{p}(\tau)) - S(\mathbf{p}(0))) + \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \langle \hat{\theta}(t) \rangle_t \quad (2.21)$$

である。この右辺第一項は、 $\tau \rightarrow \infty$ で、 $S(\mathbf{p}(\tau)) - S(\mathbf{p}(0)) \rightarrow 0$ である。よって、

$$\frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \langle g(t) \rangle_t \leq \sqrt{\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \langle \theta(t) \rangle_t \overline{\Xi}_g} \quad (2.22)$$

である。よって示された。□

この不等式は、jump quantity の平均値が nonzero であるとき、(カレントが nonzero であるとき) 平均の (熱浴での) 散逸が nonzero になることを表している。

ここで、長時間平均により Shanon エントロピーの項が消えることは重要である。というのも、シャノンエントロピーを知るためには粒子のミクロな状態を知らなくてはならないが、実際問題それが難しいためである。

3 熱機関のパワーと効率のトレードオフ

設定

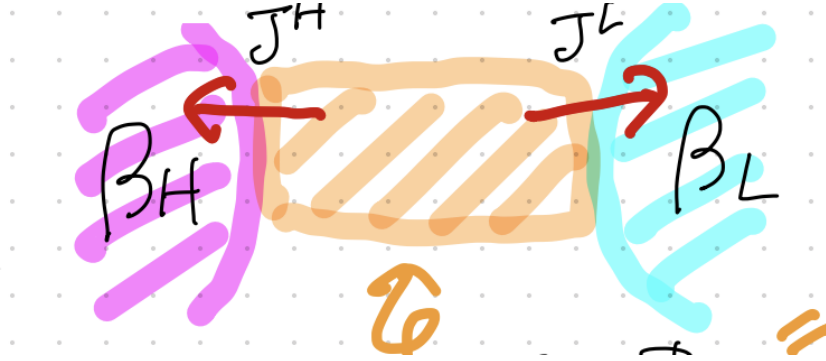


図1 設定

系が二つの熱浴に接触しているとする。 $\alpha = H, L$ で、それぞれの熱浴の逆温度を β_α 、遷移レートを $\omega_{j \rightarrow k}(t)$ 、系のエネルギーを $E_j(t)$ とする。このとき、局所詳細釣り合い条件は、

$$\log \frac{\omega_{j \rightarrow k}(t)}{\omega_{k \rightarrow j}(t)} = \beta_{\alpha(j,k)}(E_j(t) - E_k(t)) \quad (3.1)$$

である。 $(\alpha(j,k) = H, L)$

熱浴への熱の流れは、

$$J_{j \rightarrow k}^\alpha(t) = \begin{cases} E_j(t) - E_k(t) & \alpha(j,k) = \alpha \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.2)$$

である。また、エントロピー生成は、

$$\theta_{j \rightarrow k}(t) \beta_{\alpha(j,k)}(E_j(t) - E_k(t)) \quad (3.3)$$

$$= \beta_H J_{j \rightarrow k}^H(t) + \beta_L J_{j \rightarrow k}^L(t) \quad (3.4)$$

である。仮定

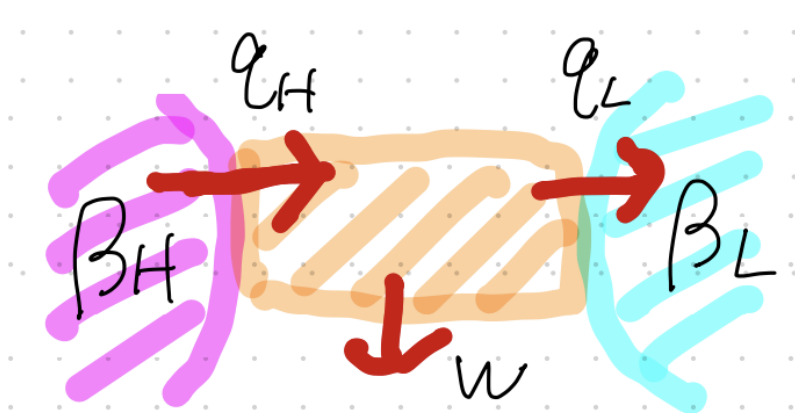


図2 仮定

以下の極限が存在し、その極限值が正であるとする：

$$q_H = - \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \left\langle \hat{J}^H(t) \right\rangle_t > 0 \quad (3.5)$$

$$q_L = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \left\langle \hat{J}^L(t) \right\rangle_t > 0 \quad (3.6)$$

これは、高温熱浴から系に入ってくる熱流および、低温熱浴に流れる熱流の時間平均である。また、このとき、平均のパワー（仕事率）は、

$$W = q_H - q_L \quad (3.7)$$

であり、効率は、

$$\eta = \frac{W}{q_H} = 1 - \frac{q_L}{q_H} \quad (3.8)$$

である。このとき、以下の不等式が成立する。

Thm: 熱機関の、パワーと効率のトレードオフ

熱機関のパワーと効率は、以下の不等式を満たす：

$$(q_H + q_L)^2 \leq \bar{\Xi} \beta_L q_H (\eta_C - \eta) \quad (3.9)$$

Prf

今、

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \left\langle \hat{\theta}_t \right\rangle_t = -\beta_H q_H + \beta_L q_L \quad (3.10)$$

$$= -\beta_H q_H + \beta_L (q_H - W) \quad (3.11)$$

$$= \beta_L q_H \left(-\frac{\beta_H}{\beta_L} + 1 - \frac{W}{q_H} \right) \quad (3.12)$$

$$= \beta_L q_H (\eta_C - \eta) (\geq 0) \quad (3.13)$$

である。また、

$$g_{j \rightarrow k}(t) = \hat{J}_{j \rightarrow k}^L(t) - \hat{J}_{j \rightarrow k}^H(t) \quad (3.14)$$

とする。このとき、Shiraishi-Saito 不等式より、

$$\left(\frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \left\langle \hat{g}(t) \right\rangle_t \right)^2 \leq \bar{\Xi} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \left\langle \hat{\theta}_t \right\rangle_t \quad (3.15)$$

である。ここで、

$$\bar{\Xi} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \frac{1}{2} \sum_{j,k(j \neq k)}^\Omega R_{kj}(t) p_j(t) (E_j(t) - E_k(t))^2 \quad (3.16)$$

である。(これは、どれくらい active に熱のやり取りをするかを表している。) このとき、

$$\left(\frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \langle \hat{g}(t) \rangle_t \right)^2 = (q_H + q_L)^2 \quad (3.17)$$

である。よって、

$$(q_H + q_L)^2 \leq \bar{\Xi} \beta_L q_H (\eta_C - \eta) \quad (3.18)$$

である。よって示された。□

上で得られた不等式を変形すると、

$$\bar{\Xi} \beta_L (\eta_C - \eta) \geq \frac{(q_H + q_L)^2}{q_H} \geq q_H + q_L \quad (3.19)$$

となる。これは、効率がカルノーサイクルに近づくと、 q_H, q_L が 0 に近づくことを表している。このもとで、パワーは 0 に近づくことがわかる。

あるいは、以下のようにも変形できる:

$$W \leq \bar{\Xi} \beta_L \frac{q_H}{(q_H + q_L)^2} (\eta_C - \eta) W \quad (3.20)$$

$$= \bar{\Xi} \beta_L \frac{q_H}{(q_H + q_L)^2} \eta (\eta_C - \eta) \quad (\because W = q_H \eta) \quad (3.21)$$

$$\leq \bar{\Xi} \beta_L \eta (\eta_C - \eta) \quad (3.22)$$

これは、効率がカルノーサイクルに近づくと、パワーが 0 に近づくことを直接的に示している。