# 効率とパワーのトレードオフ

大上由人

2024 年 8 月 8 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、

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

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

である。このとき、熱浴と系の全エントロピー生成は、

$$\sigma(t) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}S(\mathbf{p})(t) + \left\langle \hat{\theta}(t) \right\rangle_t \tag{1.3}$$

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、$\left\langle \hat{\theta}(t) \right\rangle_t$ 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:

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

ただし、分子について、

$$j_{j\to k}(t) = R_{kj}(t)p_j(t) - R_{kj}(t)p_k(t) \tag{1.5}$$

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**

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}S(\mathbf{p}(t)) &= -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_{k}^{\Omega} p_k(t)\log p_k(t) && (1.6)\\
&= -\sum_{k}^{\Omega}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p_k(t)\log p_k(t) - \sum_{k}^{\Omega} p_k(t)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\log p_k(t) && (1.7)\\
&= -\sum_{k}^{\Omega}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p_k(t)\log p_k(t) - \sum_{k}^{\Omega}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p_k(t) && (1.8)\\
&= -\sum_{k}^{\Omega}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p_k(t)\log p_k(t) \quad (\because \text{規格化条件}) && (1.9)\\
&= -\sum_{j,k}^{\Omega} R_{kj}(t)p_j(t)\log p_j(t) && (1.10)\\
&= \sum_{j,k}^{\Omega} R_{kj}(t)p_j(t)\log\left(\frac{p_j(t)}{p_k(t)}\right) \quad \left(\because \sum_{k}^{\Omega} R_{kj}(t) = 0\right) && (1.11)
\end{aligned}
$$

である。また、

$$
\begin{aligned}
\left\langle \hat{\theta}(t) \right\rangle_t &= \sum_{j,k(j\neq k)}^{\Omega} R_{kj}(t)p_j(t)\log\left(\frac{R_{kj}(t)}{R_{jk}(t)}\right) && (1.12)\\
&= \sum_{j,k}^{\Omega} R_{kj}(t)p_j(t)\log\left(\frac{R_{kj}(t)p_j(t)}{R_{jk}(t)p_k(t)}\right) \quad (\because \log 1 = 0) && (1.13)
\end{aligned}
$$

である。これらを用いて、

$$
\begin{aligned}
\sigma(t) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}S(\mathbf{p}(t)) + \left\langle \hat{\theta}(t) \right\rangle_t && (1.14)\\
&= \sum_{j,k}^{\Omega} R_{kj}(t)p_j(t)\log\left(\frac{R_{kj}(t)p_j(t)}{R_{jk}(t)p_k(t)}\right) && (1.15)\\
&= \sum_{j,k(j\neq k)}^{\Omega} R_{kj}(t)p_j(t)\log\left(\frac{R_{kj}(t)p_j(t)}{R_{jk}(t)p_k(t)}\right) && (1.16)\\
&= \frac{1}{2}\sum_{j,k(j\neq k)}^{\Omega} \left(R_{kj}(t)p_j(t) - R_{jk}(t)p_k(t)\right)\log\left(\frac{R_{kj}(t)p_j(t)}{R_{jk}(t)p_k(t)}\right) \quad (\because \text{添え字に対する対称性}) && (1.17)\\
&\geq \sum_{j,k(j\neq k)}^{\Omega} \frac{\left(R_{kj}(t)p_j(t) - R_{jk}(t)p_k(t)\right)^2}{2\left(R_{kj}(t)p_j(t) + R_{jk}(t)p_k(t)\right)} \quad \left(\because \frac{1}{2}(a-b)\log(a/b) \geq \frac{(a-b)^2}{2(a+b)}\right) && (1.18)
\end{aligned}
$$

である。よって示された。□

## 2 Improved Shiraishi-Saito inequality

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

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

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:

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

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

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

である。

**Prf**

jump quantity の平均値は、

$$\begin{aligned}
\langle \hat{g}(t) \rangle_t &= \sum_{j,k(j\neq k)}^{\Omega} p_j(t)\omega_{j\to k}(t) g_{j\to k}(t) && (2.4)\\
&= \sum_{j,k(j\neq k)}^{\Omega} R_{kj}(t)p_j(t) g_{j\to k}(t) && (2.5)\\
&= \frac{1}{2}\sum_{j,k(j\neq k)}^{\Omega} (R_{kj}(t)p_j(t) - R_{jk}(t)p_k(t)) g_{j\to k}(t) && (2.6)\\
&= \frac{1}{2}\sum_{j,k(j\neq k)}^{\Omega} (R_{kj}(t)p_j(t) - R_{jk}(t)p_k(t)) g_{j\to k}(t) \quad (\because \text{添え字に対する対称性}) && (2.7)\\
&= \frac{1}{2}\sum_{j,k(j\neq k)}^{\Omega} \frac{R_{kj}(t)p_j(t) - R_{jk}(t)p_k(t)}{\sqrt{R_{kj}(t)p_j(t) + R_{jk}(t)p_k(t)}}\sqrt{R_{kj}(t)p_j(t) + R_{jk}(t)p_k(t)}\, g_{j\to k}(t) && (2.8)
\end{aligned}$$

である。ここで、Cauchy-Schwarz の不等式を用いると、

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

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、

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

である。よって示された。□

この不等式を変形することで、

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

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、

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

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

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、

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

であるとき、

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

である。

得られた不等式を変形すると、

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

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:

$$\overline{\Xi_g}^{-1}\left(\lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\int_0^\tau \mathrm{d}t\,\langle\hat{g}\rangle_t\right)^2 \leq \lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\int_0^\tau \mathrm{d}t\left\langle\hat{\theta}_t\right\rangle_t \tag{2.17}$$

ただし、$\overline{\Xi_g}$ は、

$$\overline{\Xi}_g = \lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\int_0^\tau \mathrm{d}t\,\Xi_g(t) \tag{2.18}$$

である。

**Prf**

普通の Shiraishi-Saito 不等式より、

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

である。Cauchy-Schwarz の不等式より、

$$\frac{1}{\tau}\int_0^\tau \mathrm{d}t\,\langle\hat{g}(t)\rangle_t \leq \sqrt{\frac{1}{\tau}\int_0^\tau \mathrm{d}t\,\sigma(t)\frac{1}{\tau}\int_0^\tau \mathrm{d}t\,\Xi_g(t)} \tag{2.20}$$

である。ところで、

$$\frac{1}{\tau}\int_0^\tau \mathrm{d}t\,\langle\sigma(t)\rangle_t = \frac{1}{\tau}(S(\mathbf{p}(\tau)) - S(\mathbf{p}(0))) + \frac{1}{\tau}\int_0^\tau \mathrm{d}t\left\langle\hat{\theta}(t)\right\rangle_t \tag{2.21}$$

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

$$\frac{1}{\tau}\int_0^\tau \mathrm{d}t\,\langle g(t)\rangle_t \leq \sqrt{\lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\int_0^\tau \mathrm{d}t\left\langle\theta(\hat{t})\right\rangle_t\overline{\Xi}_g} \tag{2.22}$$

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

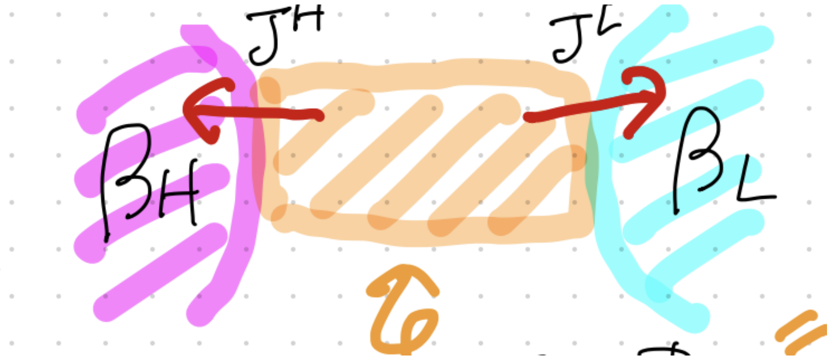


図 1　設定

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 $\beta_\alpha$、遷移レートを $\omega_{j\to k}(t)$、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、

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

である。($\alpha(j,k) =$ H,L)
熱浴への熱の流れは、

$$J^{\alpha}_{j\to k}(t) = \begin{cases} E_j(t) - E_k(t) & \alpha(j,k) = \alpha \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{3.2}$$

である。また、エントロピー生成は、

$$\begin{aligned} \theta_{j\to k}(t)\beta_{\alpha(j,k)}(E_j(t) - E_k(t)) & \qquad (3.3) \\ = \beta_{\mathrm{H}} J^{\mathrm{H}}_{j\to k}(t) + \beta_{\mathrm{L}} J^{\mathrm{L}}_{j\to k}(t) & \qquad (3.4) \end{aligned}$$

である。**仮定**

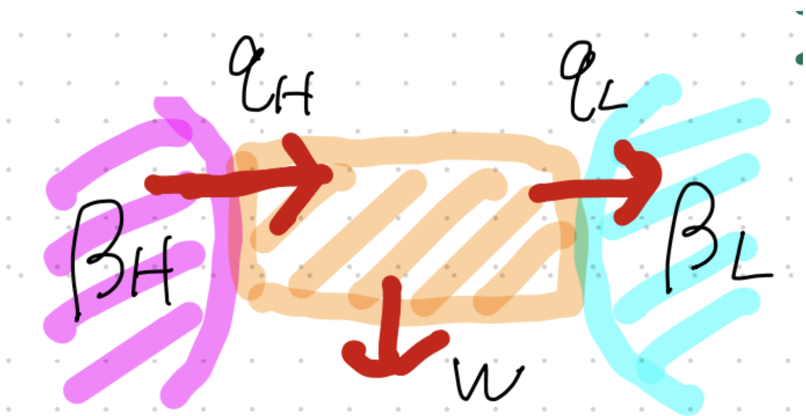


図 2　仮定

以下の極限が存在し、その極限値が正であるとする:

$$q_H = -\lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\int_0^\tau \mathrm{d}t \left\langle \hat{J}^H(t)\right\rangle_t > 0 \tag{3.5}$$

$$q_L = \lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\int_0^\tau \mathrm{d}t \left\langle \hat{J}^L(t)\right\rangle_t > 0 \tag{3.6}$$

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、

$$W = q_H - q_L \tag{3.7}$$

であり、効率は、

$$\eta = \frac{W}{q_H} = 1 - \frac{q_L}{q_H} \tag{3.8}$$

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:

$$(q_H + q_L)^2 \leq \Xi\beta_L q_H(\eta_{\mathrm{C}} - \eta) \tag{3.9}$$

**Prf**

今、

$$\begin{aligned}
\lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\int_0^\tau \mathrm{d}t \left\langle \hat{\theta}_t\right\rangle_t &= -\beta_H q_H + \beta_L q_L && (3.10)\\
&= -\beta_H q_H + \beta_L(q_H - W) && (3.11)\\
&= \beta_L q_H\left(-\frac{\beta_H}{\beta_L} + 1 - \frac{W}{q_H}\right) && (3.12)\\
&= \beta_L q_H(\eta_{\mathrm{C}} - \eta)(\geq 0) && (3.13)
\end{aligned}$$

である。また、

$$g_{j\to k}(t) = \hat{J}^L_{j\to k}(t) - \hat{J}^H_{j\to k}(t) \tag{3.14}$$

とする。このとき、Shiraishi-Saito 不等式より、

$$\left(\frac{1}{\tau}\int_0^\tau \mathrm{d}t\,\langle \hat{g}(t)\rangle_t\right)^2 \leq \Xi \lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\int_0^\tau \mathrm{d}t \left\langle \hat{\theta}_t\right\rangle_t \tag{3.15}$$

である。ここで、

$$\Xi = \lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\,\mathrm{d}t\,\frac{1}{2}\sum_{j,k(j\neq k)}^{\Omega} R_{kj}(t)p_j(t)(E_j(t) - E_k(t))^2 \tag{3.16}$$

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、

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

である。よって、

$$(q_H + q_L)^2 \le \Xi \beta_L q_H (\eta_\mathrm{C} - \eta) \tag{3.18}$$

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、

$$\Xi\beta_L(\eta_\mathrm{C} - \eta) \ge \frac{(q_H + q_L)^2}{q_H} \ge q_H + q_L \tag{3.19}$$

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:

$$W \le \Xi\beta_L \frac{q_H}{(q_H + q_L)^2}(\eta_\mathrm{C} - \eta) W \tag{3.20}$$

$$= \Xi\beta_L \frac{q_H}{(q_H + q_L)^2}\eta(\eta_\mathrm{C} - \eta) \quad (\because W = q_H \eta) \tag{3.21}$$

$$\le \Xi\beta_L \eta(\eta_\mathrm{C} - \eta) \tag{3.22}$$

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。