



熱機関のパワーと効率の間の 普遍的なトレードオフ関係

白石直人(東大 総合文化)

N. Shiraishi, K. Saito, and H. Tasaki, PRL 117, 190601 (2016).

N. Shiraishi and H. Tajima, arXiv:1701.01914 (2017).





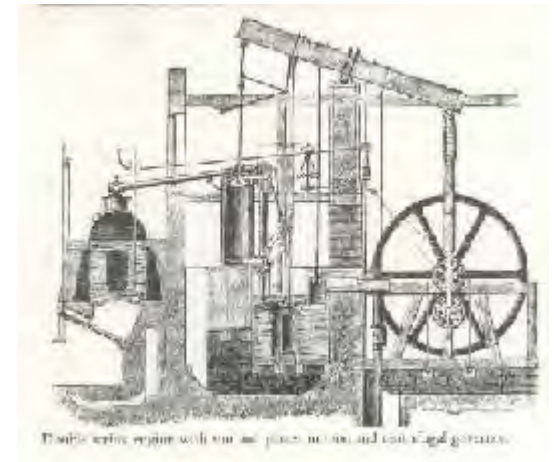
序論：先行研究



熱機関の特徴づけ：効率とパワー

効率：どれだけ熱を仕事に変えたか
上限はカルノー効率

パワー：単位時間でどれだけ仕事を取り出したか



広く信じられていること

効率とパワーは**相補的**である（効率が
高いほど原理的な最大パワーは低下する）

実は基本的な問題さえ未解決！

基本的な問題

有限パワーの熱機関はカルノー効率になるか？

この問題はカルノー以来の**未解決問題**！

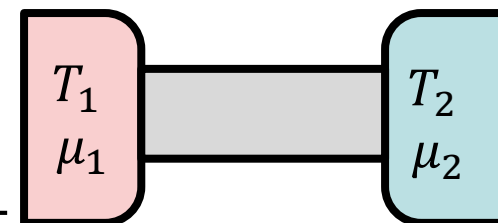
熱力学

特に禁じていない！

線形非平衡熱力学（熱電効果など）

時間反転対称性が破れている場合には、

線形領域においてさえ特に禁じていない！



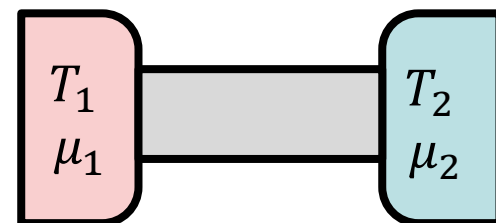
(G. Benenti, K. Saito, and G. Casati, PRL 106, 230602 (2011))

線形非平衡熱力学の確認

例：熱電気輸送

J_i : 熱流 F_i : 温度差

J_j : 粒子流 F_j : 化学ポテンシャル差



オンサーガー行列 L を用いると

$$J_i = L_{ii}F_i + L_{ij}F_j$$

$$J_j = L_{ji}F_i + L_{jj}F_j$$

$$\dot{S} = J_iF_i + J_jF_j \geq 0 \quad (\text{第二法則})$$

$$\rightarrow L_{ii} \geq 0, L_{jj} \geq 0, 4L_{ii}L_{jj} - (L_{ij} + L_{ji})^2 \geq 0$$

時間反転対称性による違い

$$\begin{aligned}\dot{S} &= \frac{1}{L_{ii}} \left(J_i + \frac{L_{ji} - L_{ij}}{2} X_j \right)^2 + \frac{4L_{ii}L_{jj} - (L_{ij} + L_{ji})^2}{4L_{ii}} X_j^2 \\ &\geq \frac{1}{L_{ii}} \left(J_i + \frac{L_{ji} - L_{ij}}{2} X_j \right)^2\end{aligned}$$

カルノー効率を達成 $\Leftrightarrow \dot{S} = 0$

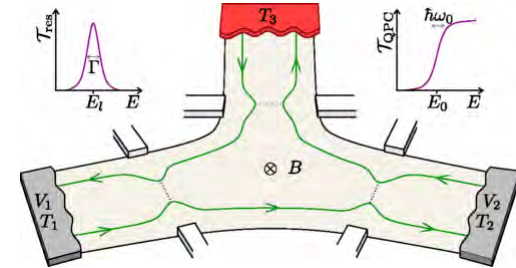
$L_{ij} = L_{ji}$ (時間反転対称) なら $\dot{S} = 0 \rightarrow J_i = 0$

$L_{ij} \neq L_{ji}$ (時間反転非対称) なら $\dot{S} = 0$ でも X_j を適切に選べば **$J_i \neq 0$ (有限パワー!)**

具体的モデル（線形領域）では...

磁場あり

- K. Brandner, K. Saito, and U. Seifert, PRL 110, 070603 (2013).
V. Balachandran, G. Beneti, and G. Casati, PRB 87, 165419 (2013).
J. Stark, *et.al.* PRL 112, 140601 (2014).
B. Sothmann, R. Sanchez, and A. Jordan, EPL 107, 47003 (2014).
R. Sanchez, B. Sothmann, and A. Jordan, PRL 114, 146801 (2015).
K. Yamamoto, *et.al.*, PRB 94, 121402(R) (2016).

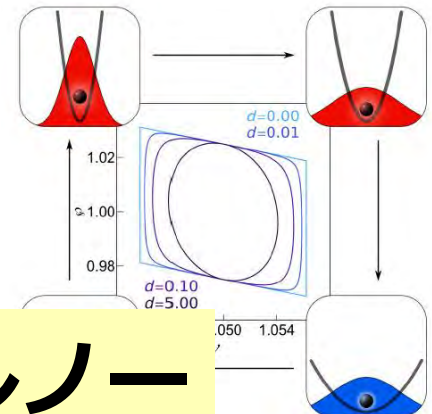


時間反転対称でない外部操作

- K. Brandner, K. Saito, and U. Seifert, PRX 5, 031019 (2015).

K. Pro

これらモデルの範囲内では、カルノー効率では常にパワーはゼロ！





パワーと効率：先行研究の現状

- 「有限パワーかつカルノー効率」は一般論においては禁止できていない
- **具体的モデルの線形領域の解析**では、「有限パワーかつカルノー効率」はすべて否定されている。
- 一般的なパワーと効率の関係はほとんど分かっていない状況である。



本論





結果

マルコフ系の場合

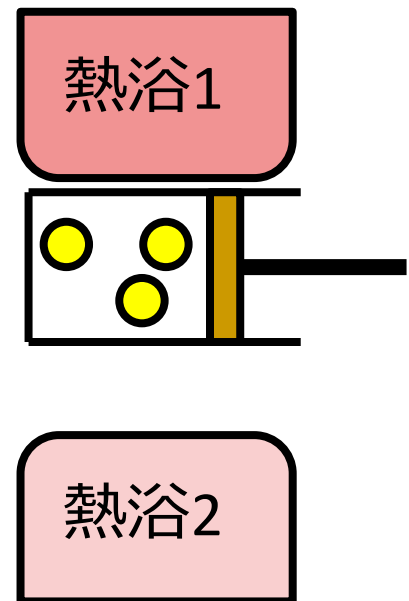


状況設定



仮定

- ・系の時間発展は古典マルコフ過程
- ・各熱浴で定常分布はカノニカル分布



重要な点

- ・非定常状態（時間依存する操作）もOK
- ・時間反転対称性がなくてもOK
- ・非線形領域・激しい非平衡状態もOK



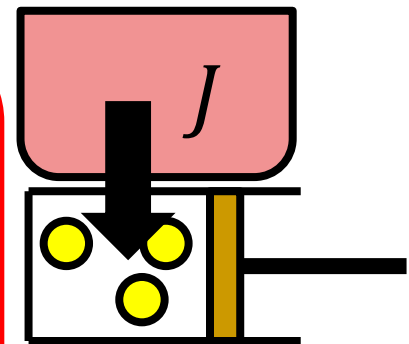
主結果

(熱流とエントロピー生成の不等式)

着目する量

J : 熱浴とエンジンの間の熱流 (一般には保存量のフラックス)

σ : エントロピー生成率 (エンジンと熱浴のエントロピー増加率の和)



このとき、以下の不等式が成立 (一熱浴の場合)

$$|J| \leq \sqrt{\Theta \sigma}$$

(Θ : 系に依存した係数。後で定義)

条件の強さに応じた Θ の違い

一熱浴の場合の熱流とエントロピー生成の不等式

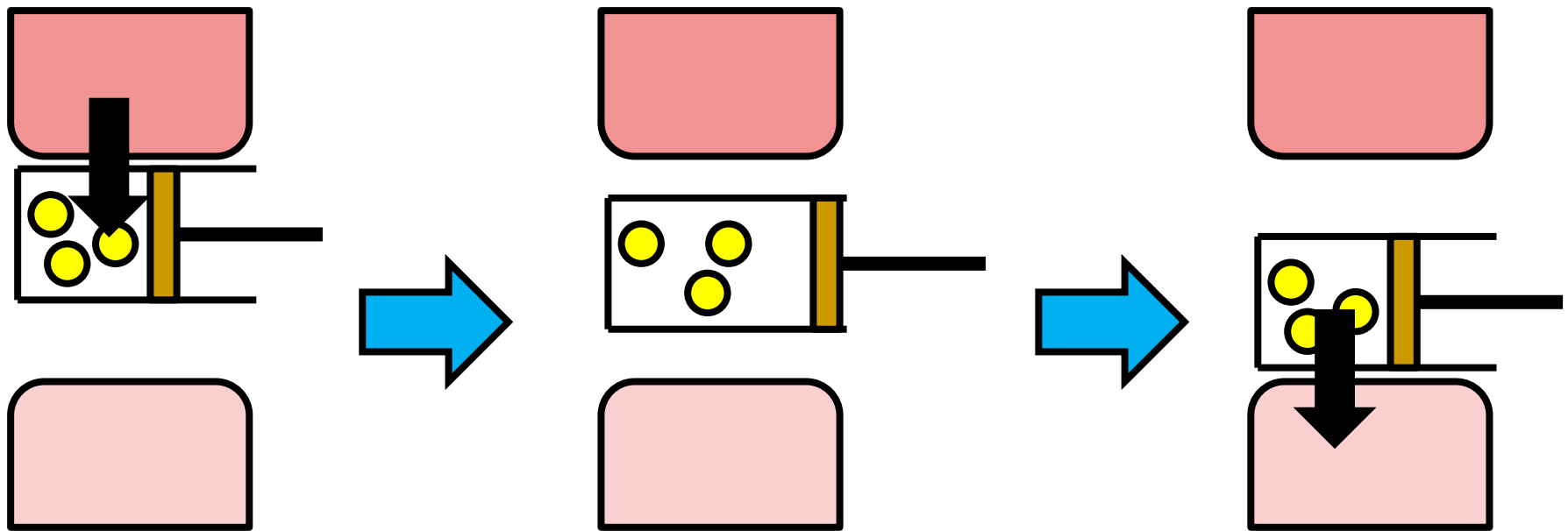
$$|J| \leq \sqrt{\Theta} \sigma$$

$\Theta = \Theta^{(1)}$: 一般の場合に成立 (少し弱い)
(磁場ありの離散系、熱壁など)

$\Theta = \Theta^{(2)}$: 平衡分布が詳細釣り合いを満たす場合に成立 (強い)
(磁場なし離散系、ガウスノイズなど)

パワーと効率（イメージ）

二熱浴のサイクル操作を考える



サイクルには必ず等温過程があり、そこで
不可避免的なロスが生じる！

主結果

(パワーと効率の不等式)

二熱浴のサイクルの場合、仕事 W と効率 η に対し

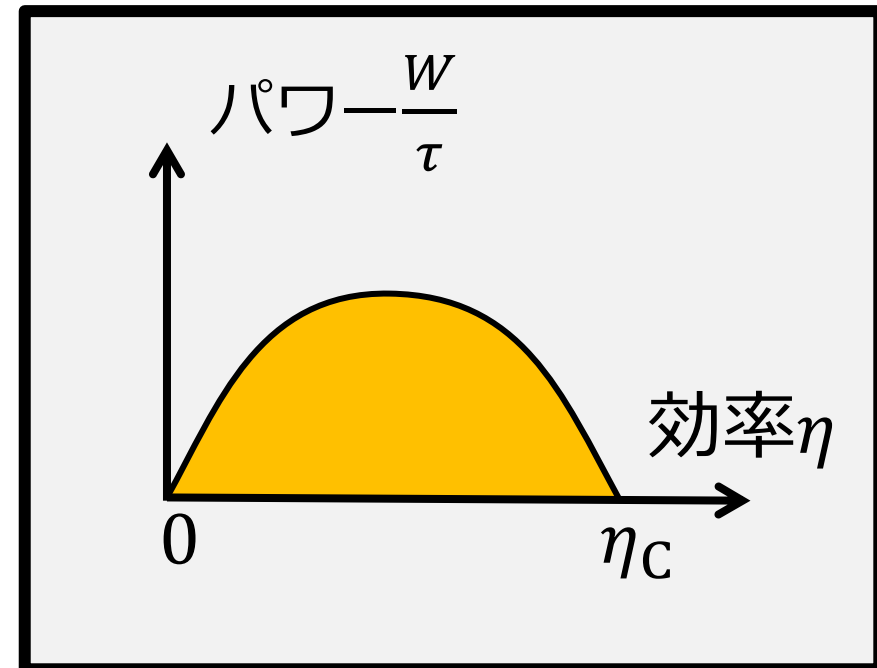
$$\frac{W}{\tau} \leq \bar{\Theta} \beta_L \eta (\eta_c - \eta)$$

τ : 1サイクルの時間

$\bar{\Theta}$: Θ の適当な平均 (後で定義)

β_L : 低温熱浴の逆温度

η_c : カルノー効率



ダイナミクスの設定

マスター方程式

$$\frac{d}{dt} P_{w,t} = \sum_{w'} R_{ww'} P_{w',t}$$

w : 状態

$R_{ww'}$: $w' \rightarrow w$ の遷移行列

規格化条件 $\sum_w R_{ww'} = 0$ を満たす。

Dualレート の遷移行列

$$\tilde{R}_{ww'} := e^{-\beta(E_w - E_{w'})} R_{w'w} \text{ を導入}$$

物理量の定義

熱流

$$\begin{aligned} J &= - \sum_{w'} E_{w'} \frac{dP_{w'}}{dt} = - \sum_{w, w'} E_{w'} R_{w'w} P_w \\ &= - \sum_{w, w'} \Delta E_{w'} (R_{w'w} P_w - \tilde{R}_{ww'} P_{w'}) \end{aligned}$$

(エネルギーゆらぎ : $\Delta E_{w'} := E_{w'} - \langle E \rangle$)

エントロピー生成率

$$\sigma = \sum_{w, w'} R_{w'w} P_w \ln \frac{R_{w'w} P_w}{\tilde{R}_{ww'} P_{w'}}$$

補題：相対エントロピーの不等式

$\sum_x p_x = \sum_x q_x$ に対し、相対エントロピーは

$$\begin{aligned} D(p_x || q_x) &:= \sum_x p_x \ln \frac{p_x}{q_x} \\ &= \sum_x p_x \ln \frac{p_x}{q_x} + q_x - p_x \\ &\geq \sum_x \frac{c_0 (p_x - q_x)^2}{p_x + q_x} \end{aligned} \quad \left(c_0 = \frac{8}{9} \right)$$

(九大の原隆氏との議論による)

不等式の導出

$$\begin{aligned} & |J|^2 \\ &= \left| \sum_{w \neq w'} \Delta E_{w'} (R_{w'w} P_w - \tilde{R}_{ww'} P_{w'}) \right|^2 \\ &= \left| \sum_{w \neq w'} \Delta E_{w'} \sqrt{R_{w'w} P_w + \tilde{R}_{ww'} P_{w'}} \frac{R_{w'w} P_w - \tilde{R}_{ww'} P_{w'}}{\sqrt{R_{w'w} P_w + \tilde{R}_{ww'} P_{w'}}} \right|^2 \\ &\leq \sum_{w \neq w'} \Delta E_{w'}^2 (R_{w'w} P_w + \tilde{R}_{ww'} P_{w'}) \cdot \sum_{w \neq w'} \frac{(R_{w'w} P_w - \tilde{R}_{ww'} P_{w'})^2}{R_{w'w} P_w + \tilde{R}_{ww'} P_{w'}} \end{aligned}$$

シュワルツの不等式を用いた

不等式の導出

$$\begin{aligned} & |J|^2 \\ &= \left| \sum_{w \neq w'} \Delta E_{w'} (R_{w'w} P_w - \tilde{R}_{ww'} P_{w'}) \right|^2 \\ &= \left| \sum_{w \neq w'} \Delta E_{w'} \sqrt{R_{w'w} P_w + \tilde{R}_{ww'} P_{w'}} \frac{R_{w'w} P_w - \tilde{R}_{ww'} P_{w'}}{\sqrt{R_{w'w} P_w + \tilde{R}_{ww'} P_{w'}}} \right|^2 \\ &\leq \sum_{w \neq w'} \Delta E_{w'}^2 (R_{w'w} P_w + \tilde{R}_{ww'} P_{w'}) \cdot \sum_{w \neq w'} \frac{(R_{w'w} P_w - \tilde{R}_{ww'} P_{w'})^2}{R_{w'w} P_w + \tilde{R}_{ww'} P_{w'}} \\ &\leq \frac{1}{c_0} \sum_{w \neq w'} \Delta E_{w'}^2 (R_{w'w} P_w + \tilde{R}_{ww'} P_{w'}) \sum_{w \neq w'} R_{w'w} P(w) \ln \frac{R_{w'w} P(w)}{\tilde{R}_{ww'} P(w')} \\ &= \Theta \sigma \end{aligned}$$

熱流とエントロピー生成の不等式 (一般の場合)

$$|J| \leq \sqrt{\Theta^{(1)} \sigma}$$

$$\Theta^{(1)} := \frac{9}{8} \sum_{w \neq w'} \Delta E_{w'}^2 (R_{w'w} P_w + R_{ww'} P_{w'})$$

(ここで

$$\sum_{w(\neq w')} \tilde{R}_{ww'} = -\tilde{R}_{w'w'} = -R_{w'w'} = \sum_{w(\neq w')} R_{ww'}$$

を用いた)

詳細釣り合い

詳細釣り合い

$$\frac{R_{ww'}}{R_{w'w}} = e^{-\beta(E_w - E_{w'})}$$

注意: w の時間反転は取らない！

以下の（よく用いられる）関係**ではない**！

$$\frac{R_{ww'}}{R_{w'^*w^*}^\dagger} = e^{-\beta(E_w - E_{w'})}$$

詳細釣り合いの下での J

この場合、 $\tilde{R}_{ww'} := e^{-\beta(E_w - E_{w'})} R_{w'w} = R_{ww'}$

$$\begin{aligned} J &= - \sum_{w,w'} E_{w'} (R_{w'w} P_w - R_{ww'} P_{w'}) \\ &= - \frac{1}{2} \sum_{w,w'} (E_{w'} - E_w) (R_{w'w} P_w - R_{ww'} P_{w'}) \end{aligned}$$

$$(\text{cf : } J = - \sum_{w,w'} \underline{\Delta E_{w'}} (R_{w'w} P_w - \tilde{R}_{ww'} P_{w'}))$$

詳細釣り合いがある場合の不等式

$$|J| \leq \sqrt{\Theta^{(2)} \sigma}$$

$$\Theta^{(2)} := \frac{1}{2} \sum_{w \neq w'} (E_{w'} - E_w)^2 R_{w'w} P_w$$

$$(\text{cf: } \Theta^{(1)} := \frac{9}{8} \sum_{w \neq w'} \Delta E_{w'}^2 (R_{w'w} P_w + R_{ww'} P_{w'}))$$

一般の Θ の性質

- underdamped Langevin系では $\Theta^{(2)} = \left\langle \frac{\gamma |p|^2}{\beta m^2} \right\rangle$
- overdamped Langevin系では $\Theta^{(2)} = \left\langle \frac{\gamma F(x)^2}{\beta} \right\rangle$
- 線形領域では $\Theta^{(2)} = \kappa$ （熱伝導係数）かつ不等式は等号達成
- $\Theta^{(2)}$ は「瞬間の熱流の2次モーメント」と見れる

一般の多体、複数熱浴、ハミルトンダイナミクスありの場合

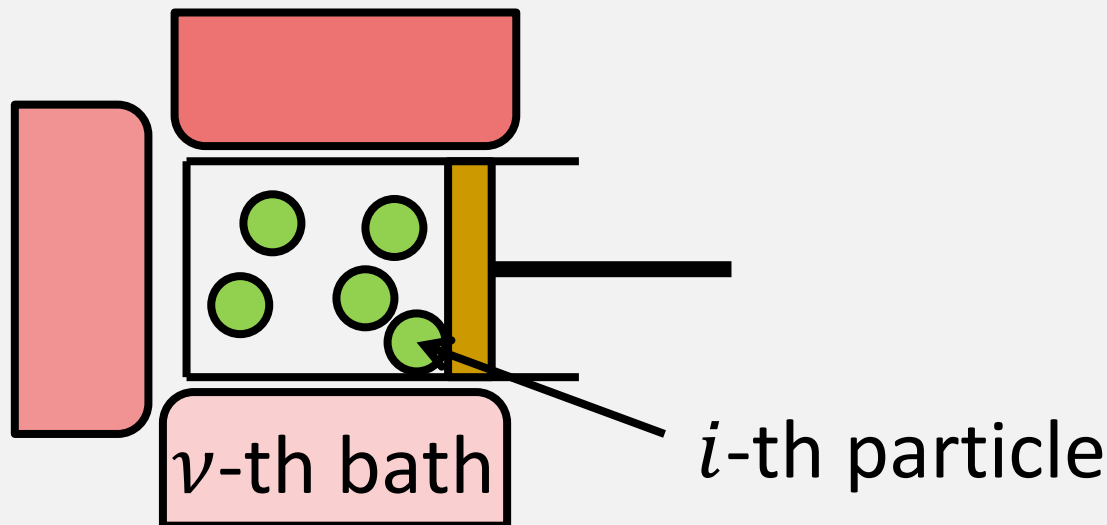
全体の遷移レートは以下のように分解できる

$$R_{ww'} = \underline{R_{ww'}^0} + \sum_v \sum_i R_{ww'}^{v,i}$$

ハミルトンダイナミクス

熱浴ラベル

粒子ラベル



underdamped Langevin系のハミルトニアンと熱浴の寄与への分割

$$\frac{d}{dt} P_{x,v} = L P_{x,v}$$

$$L := -v \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial v} \cdot \left(\gamma v + \frac{1}{m} \frac{dU}{dx} + B \times v \right) + \frac{\gamma}{\beta m} \frac{\partial^2}{\partial v^2}$$



$$L^0 := -v \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial v} \cdot \left(\frac{1}{m} \frac{dU}{dx} + B \times v \right)$$

$$L^{1,1} := \frac{\gamma}{m} \left\{ \frac{\partial}{\partial v} \cdot v + \frac{1}{\beta m} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right\}$$

$R^0(L^0)$ と $R^{\nu,i}(L^{1,1})$ の性質

$$L^0 := -v \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial v} \cdot \left(\frac{1}{m} \frac{dU}{dx} + B \times v \right)$$

- 磁場、多体・一体相互作用、慣性の効果はすべて $R^0(L^0)$ に含まれる
- $R^0(L^0)$ はエネルギーとエントロピーを保存
→ $R^0(L^0)$ は J と σ には効かない！

$$L^{1,1} := \frac{\gamma}{m} \left\{ \frac{\partial}{\partial v} \cdot v + \frac{1}{\beta m} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right\}$$

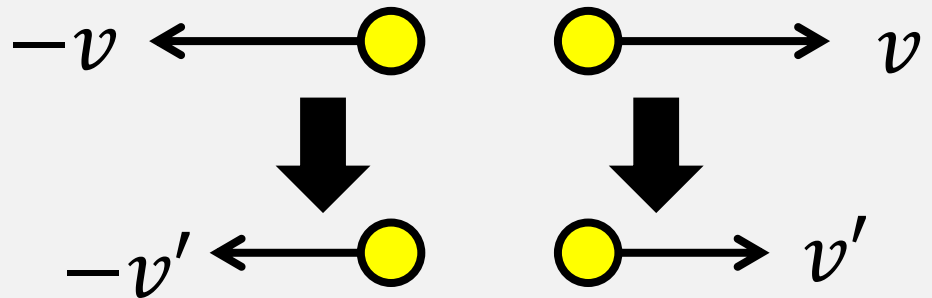
- $R^{\nu,i}(L^{1,1})$ は速度 v にのみ作用する

線形Langevinにおける $R^{v,i} (L^{1,1})$

$$L^{1,1} := \frac{\gamma}{m} \left\{ \frac{\partial}{\partial v} \cdot v + \frac{1}{\beta m} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right\}$$

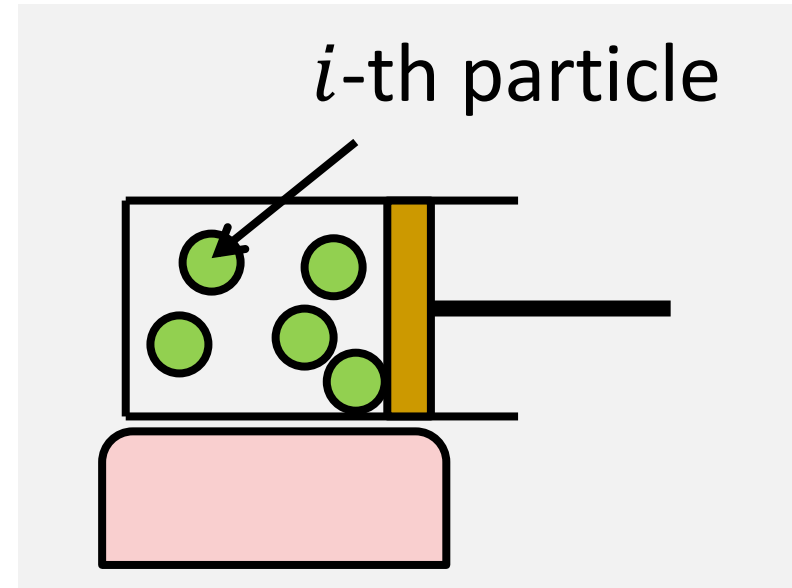
線形Langevinにおいては、対応する遷移行列
 $R_{v'v}^{1,1}$ は $R_{v'v}^{1,1} = R_{-v'-v}^{1,1}$ を満たす。ここから**詳細釣り合い**が導ける

ノイズの空間反転
対称性を反映！



多粒子系の Θ と熱力学極限

$$\begin{aligned} |J| &= \sum_i |J_i| \leq \sum_i \sqrt{\Theta_i \sigma_i} \\ &\leq \sqrt{\left(\sum_i \Theta_i\right) \left(\sum_i \sigma_i\right)} \\ &= \sqrt{\Theta \sigma} \end{aligned}$$



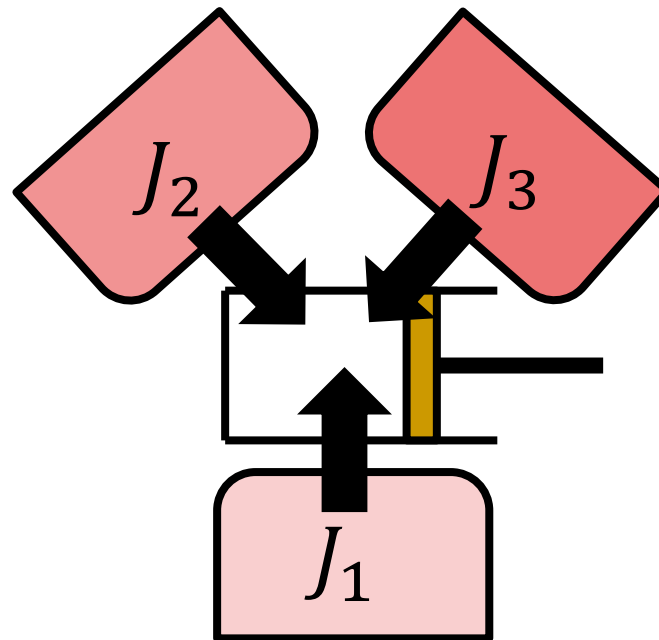
$J, \sigma, \Theta := \sum_i \Theta_i$ はすべて体積 V に比例

$\rightarrow |J| \leq \sqrt{\Theta \sigma}$ は熱力学極限 $V \rightarrow \infty$ でも有意味！

複数熱浴の場合

熱浴が複数ある場合、

$$\sum_v |J_v| \leq \sqrt{\Theta \sigma}$$

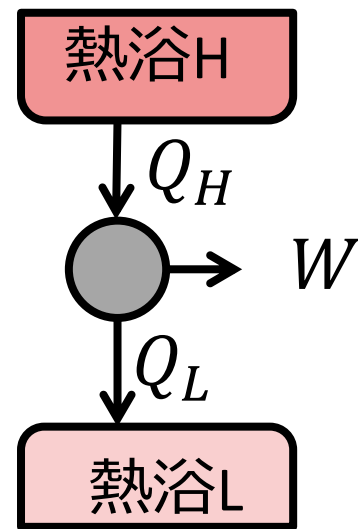


熱流／エントロピー生成不等式から パワー／効率不等式への変形

二熱浴のサイクルを考える。
まず熱力学より

$$\Delta S = -\beta_H Q_H + \beta_L Q_L$$

$$\begin{aligned}\eta(\eta_c - \eta) &= \frac{W}{Q_H} \frac{\beta_L Q_L - \beta_H Q_H}{\beta_L Q_H} \\ &= \frac{W \Delta S}{\beta_L Q_H^2}\end{aligned}$$



一般の場合の不等式の時間積分

一般の場合の不等式 $\sum_{\nu} |J_{\nu}| \leq \sqrt{\Theta \sigma}$

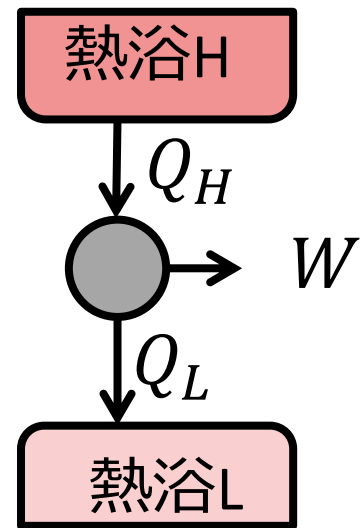
これを時間積分してシュワルツの不等式を使うと

$$\begin{aligned} \left(\int_0^{\tau} dt \sum_{\nu} |J_{\nu}| \right)^2 &\leq \left(\int_0^{\tau} dt \sqrt{\Theta \sigma} \right)^2 \\ &\leq \left(\int_0^{\tau} dt \Theta \right) \left(\int_0^{\tau} dt \sigma \right) = \tau \bar{\Theta} \Delta S \\ &\quad \left(\text{ここで } \bar{\Theta} := \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} dt \Theta \right) \end{aligned}$$

$Q_H = \int dt J_H$ 等より、 **$(Q_H + Q_L)^2 \leq \tau \bar{\Theta} \Delta S$**

熱流／エントロピー生成不等式から パワー／効率不等式への変形

$$\begin{aligned}\eta(\eta_c - \eta) &= \frac{W \Delta S}{\beta_L Q_H^2} \\ &\geq \frac{W}{\beta_L Q_H^2} \frac{(Q_H + Q_L)^2}{\tau \bar{\Theta}} \\ &\geq \frac{W}{\beta_L} \frac{1}{\tau \bar{\Theta}}\end{aligned}$$



$$\frac{W}{\tau} \leq \bar{\Theta} \beta_L \eta(\eta_c - \eta)$$

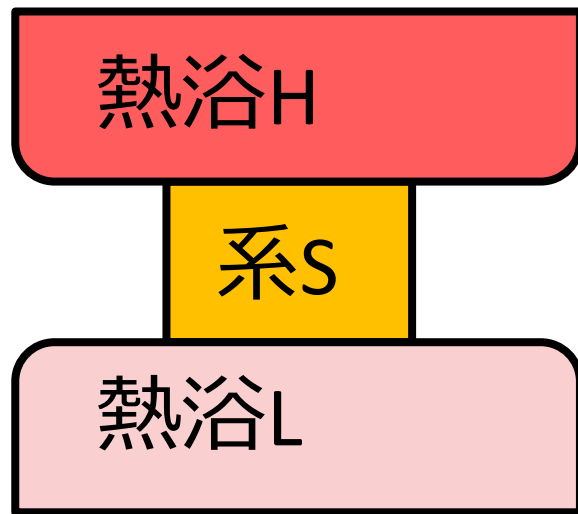


結果

非マルコフ系の場合
(簡単に)



設定（仮定）



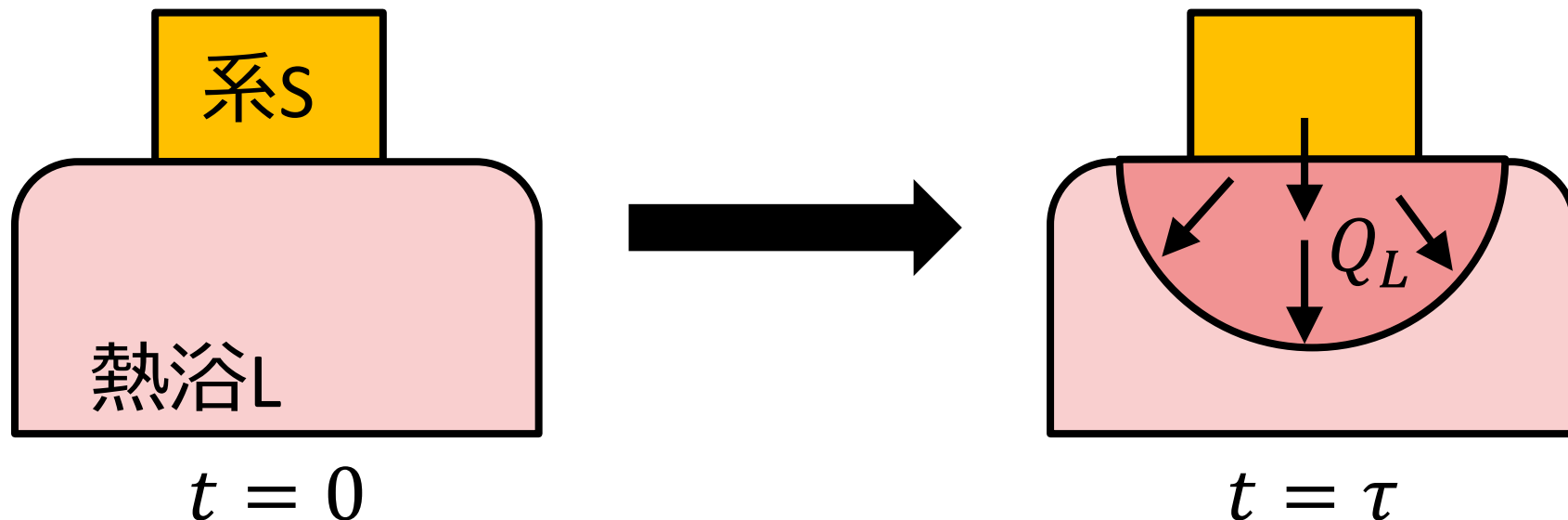
- ・対象は量子系
- ・全体系はユニタリ時間発展のサイクル過程
- ・最初と最後で系-熱浴間相互作用は切れている

始状態 ρ_i : $\rho_i^S \otimes \rho_H^{can} \otimes \rho_L^{can}$ の直積状態

終状態 ρ_f : $\text{Tr}_{HL}[\rho_f] = \rho_i^S$ を満たす状態



メインアイデア 1 : 熱の残留

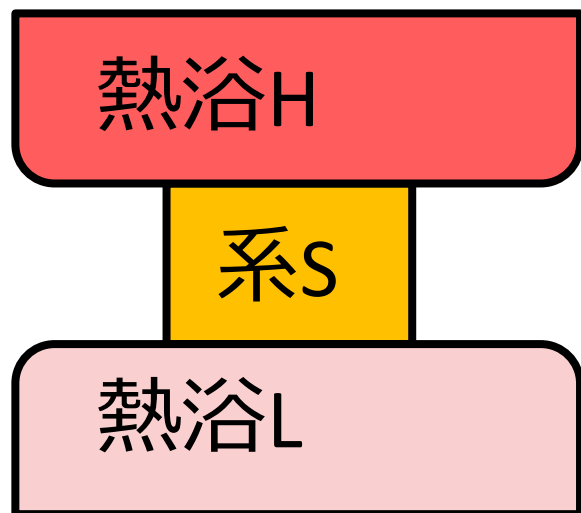


系から低温熱浴Lに放出されたエネルギー Q_L の大半は、系近傍に残っている！





メインアイデア 2 : 効率評価



量子ゆらぎ定理を用いると、
エントロピー生成は相対エントロピーで与えられるので

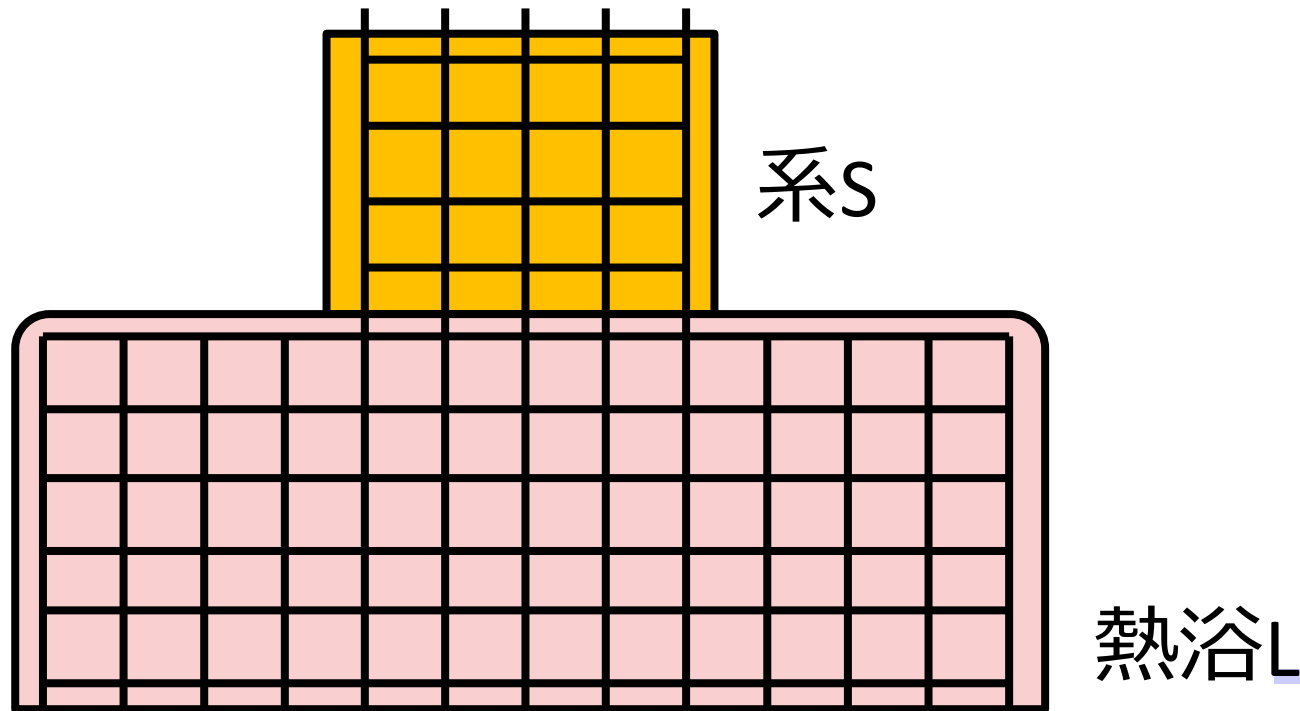
$$\eta := \frac{W}{Q_H} = \mathbf{1} - \frac{\beta_H}{\beta_L} - \frac{D(\rho_f || \rho_i)}{\beta_L Q_L}$$

熱浴Lのうち系近傍のエネルギーが大きく異なっているため、 **ρ_f と ρ_i も大きく異なる**
→右辺はカルノー効率より真に小さい！



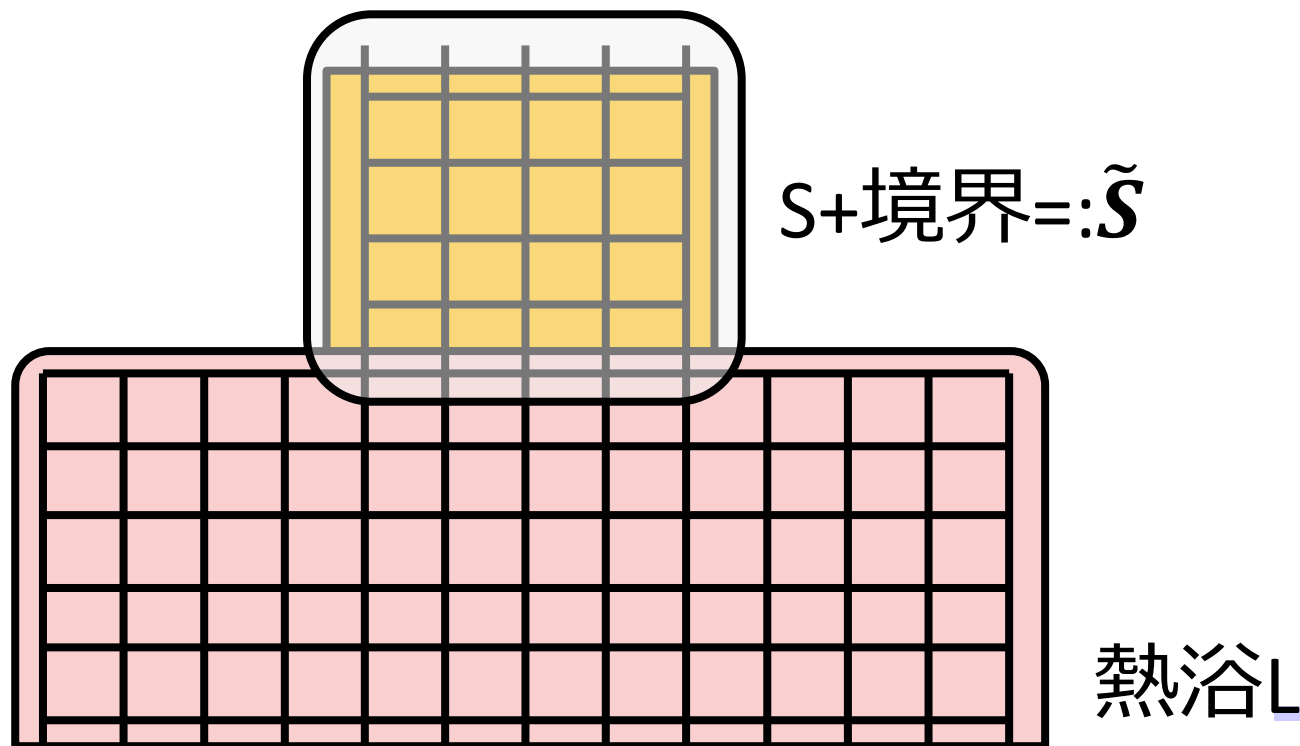
問題の設定（詳細）

- 全体系はすべて格子上に定義
- 相互作用は隣接サイトのみ
- ハミルトニアンが時間依存するのは系Sとその境界のみ



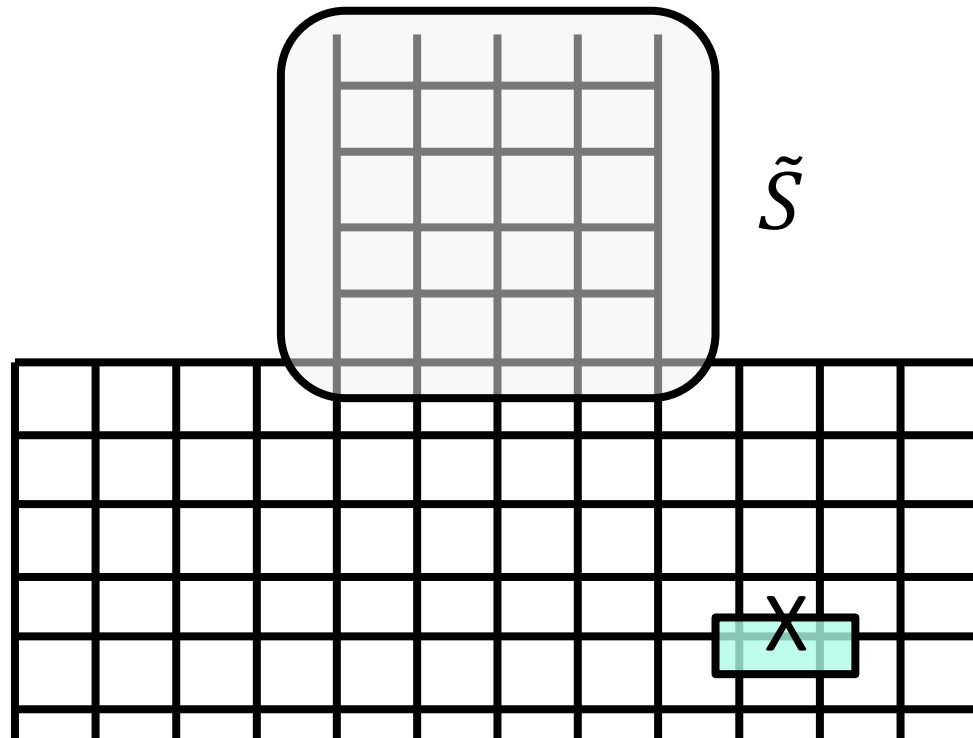
問題の設定（詳細）

- 全体系はすべて格子上に定義
- 相互作用は隣接サイトのみ
- ハミルトニアンが時間依存するのは系Sとその境界のみ



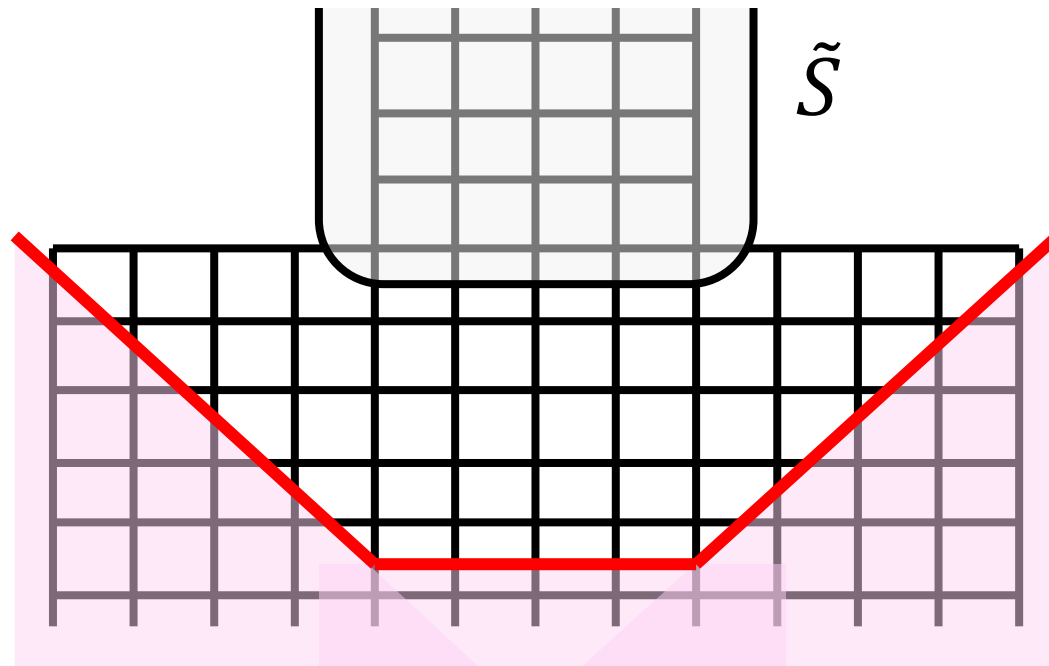
証明方針

1. X でのエネルギー変化 $\text{Tr}[H_X \rho_f] - \text{Tr}[H_X \rho_i]$ を上から押さえる



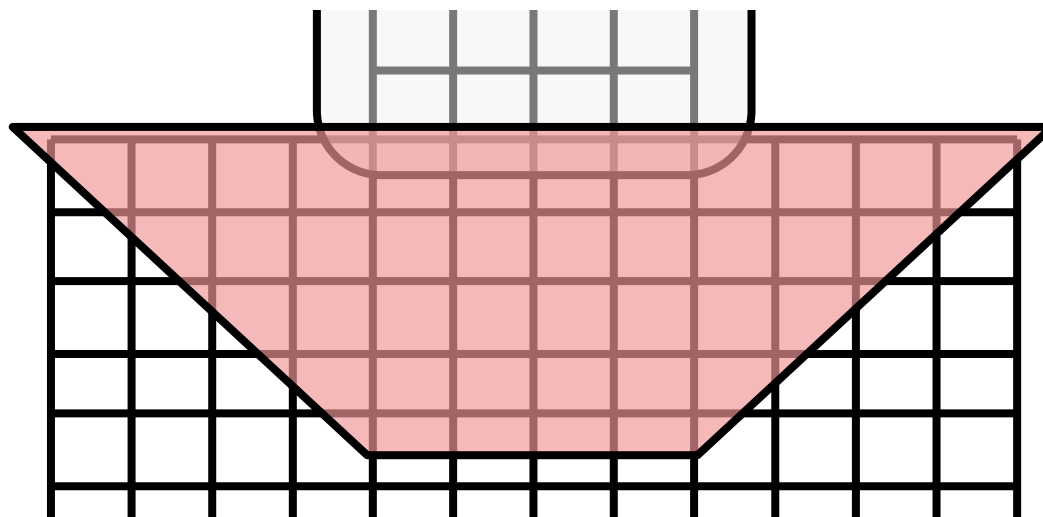
証明方針

1. X でのエネルギー変化 $\text{Tr}[H_X \rho_f] - \text{Tr}[H_X \rho_i]$ を上から押さえる
2. $\tilde{S}$ から一定距離以上でのエネルギー増加量が $Q_L/2$ 以下であることを示す



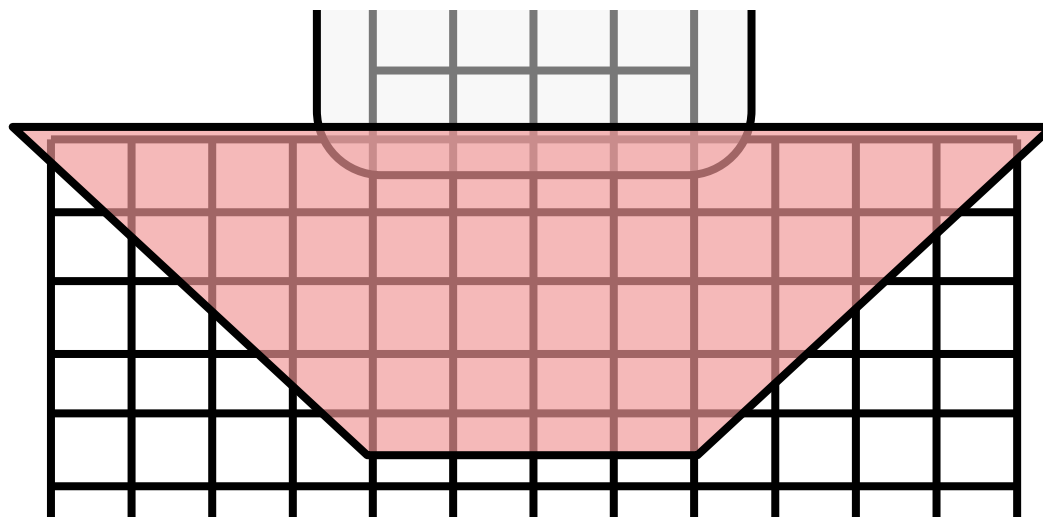
証明方針

1. X でのエネルギー変化 $\text{Tr}[H_X \rho_f] - \text{Tr}[H_X \rho_i]$ を上から押さえる
2. $\tilde{S}$ から一定距離以上でのエネルギー増加量が $Q_L/2$ 以下であることを示す
3. $D(\rho_f || \rho_i)$ を下から評価する



証明方針

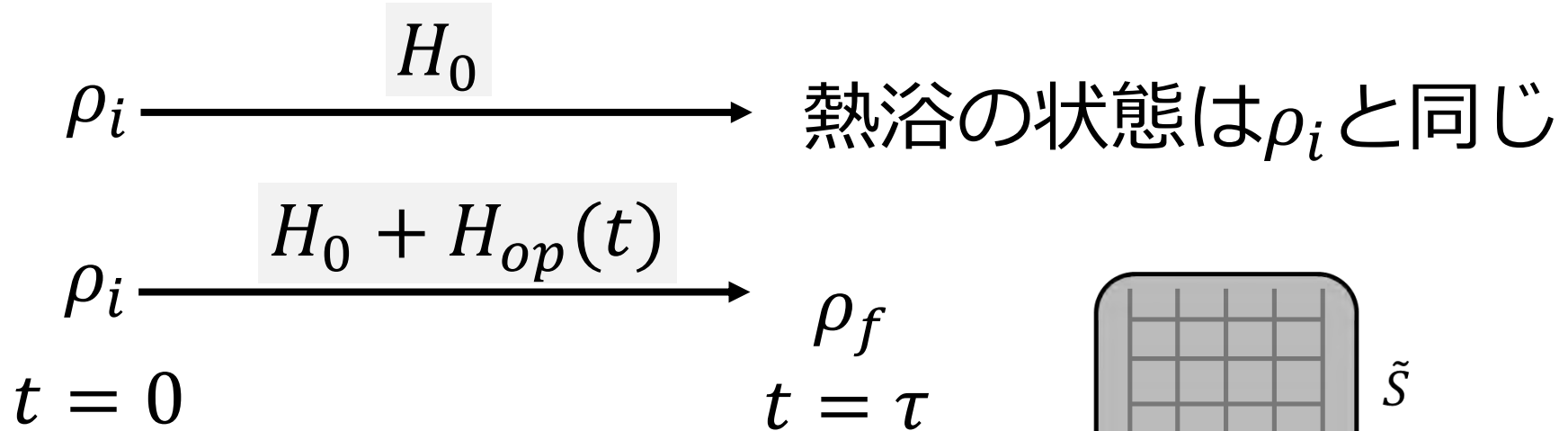
1. x でのエネルギー変化 $\text{Tr}[H_x \rho_f] - \text{Tr}[H_x \rho_i]$ を上から押さえる
2. $\tilde{S}$ から一定距離以上でのエネルギー増加量が $Q_L/2$ 以下であることを示す
3. $D(\rho_f || \rho_i)$ を下から評価する



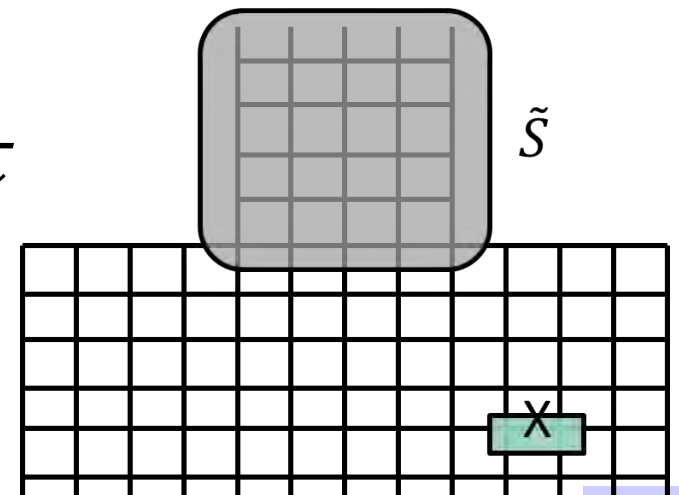
操作の有無の問題に置き換える

H_0 : 時刻0でのハミルトニアン

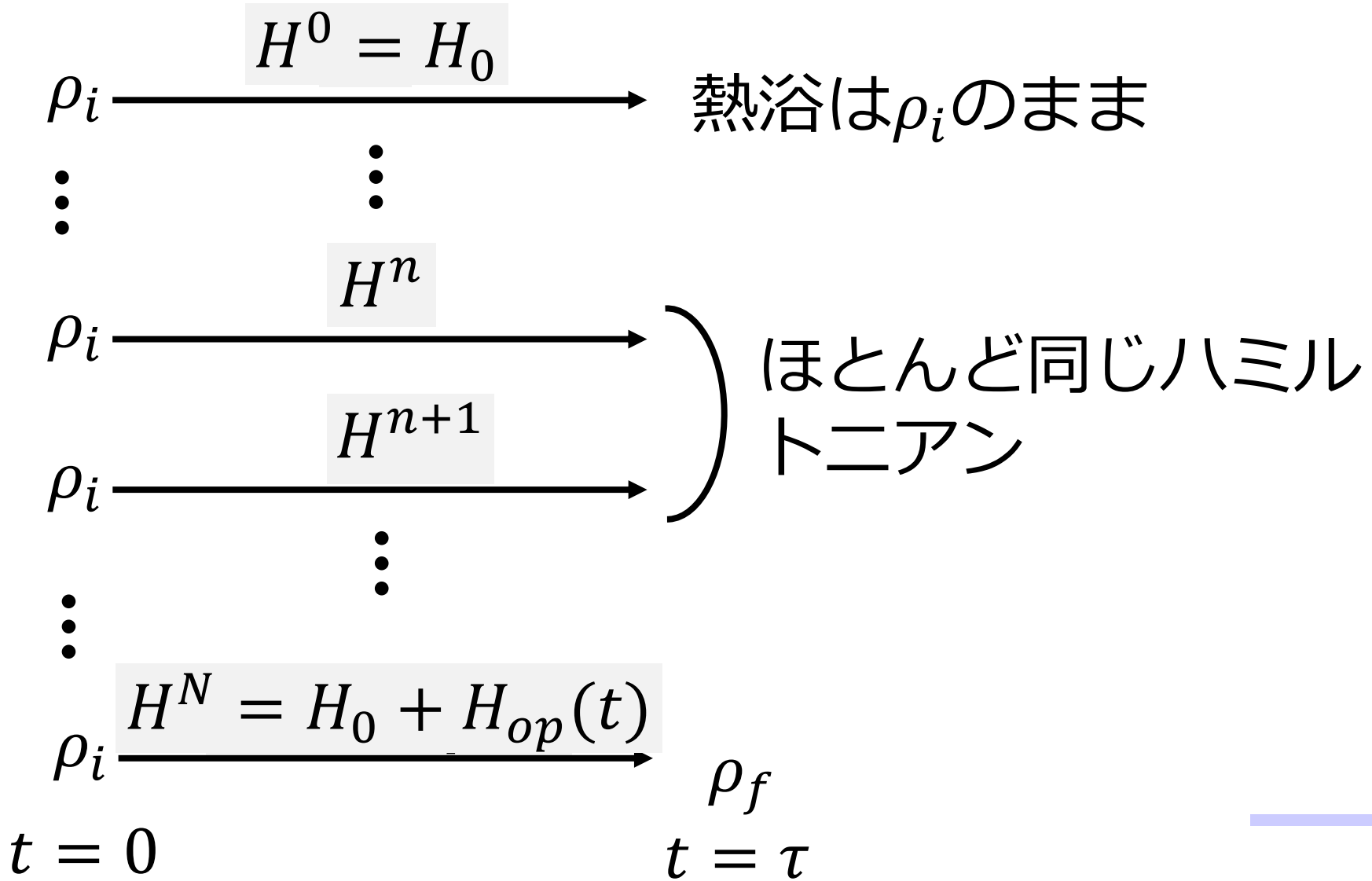
$H_{op}(t)$: 時間依存部分。 $\tilde{S}$ にのみ作用



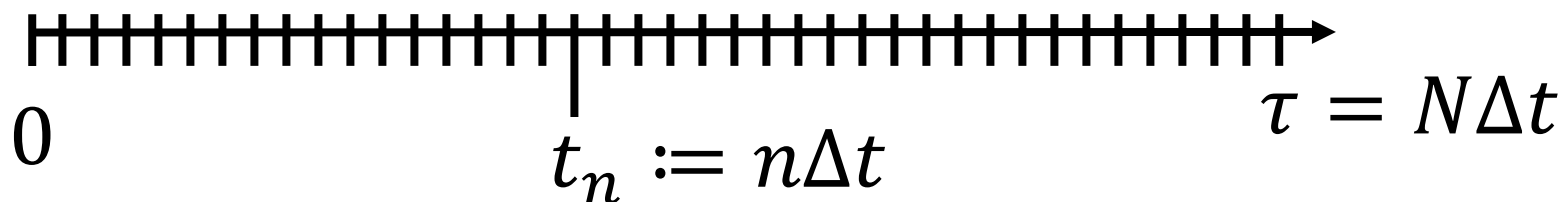
$H_{op}(t)$ の有無による H_X の
差異の問題とみなせる



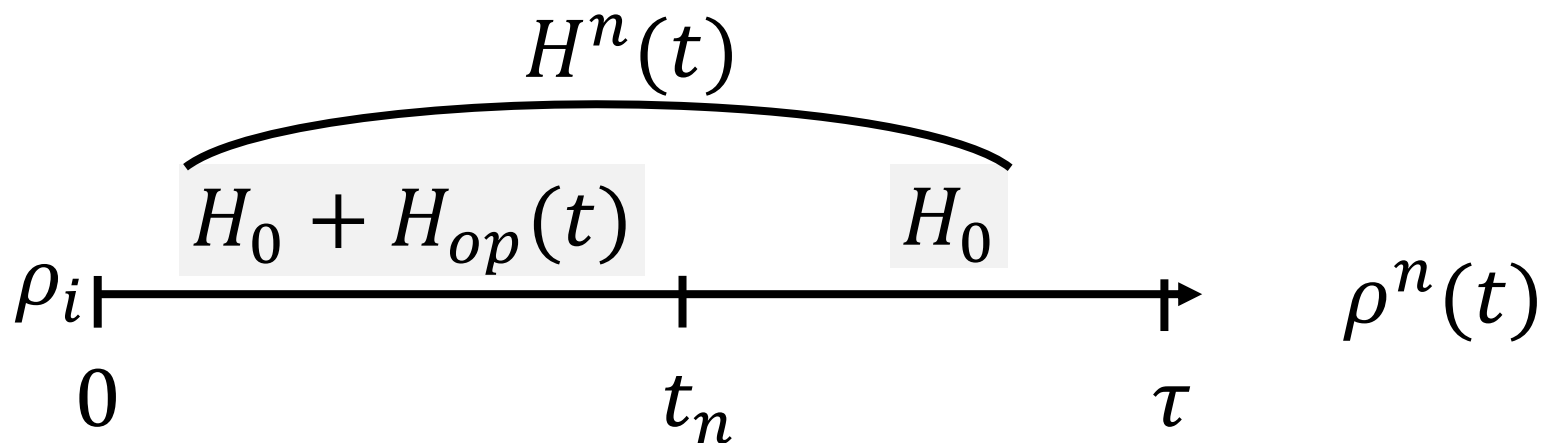
N個のハミルトニアンを用いた比較



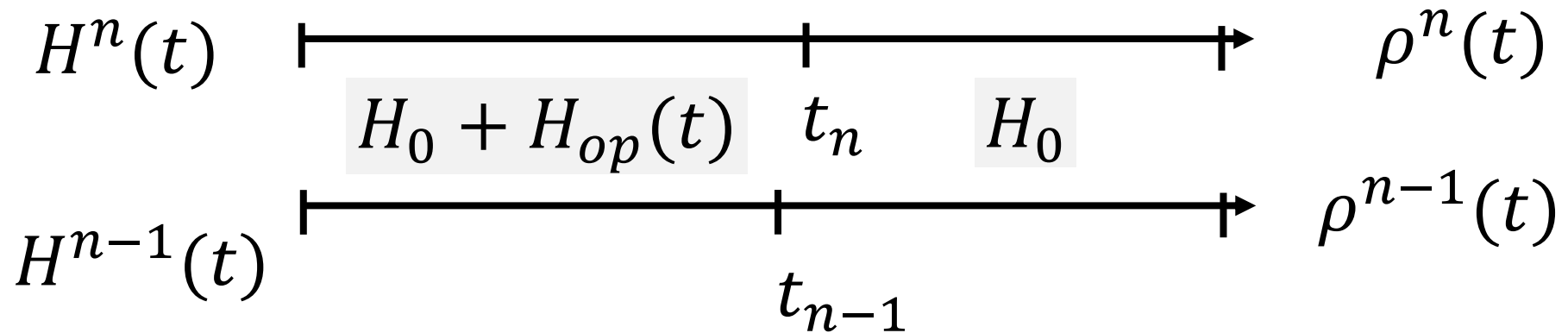
ハミルトニアン $H^n(t)$ の構成



$\Delta t := \tau/N$ と時間幅を分割
(あとで $N \rightarrow \infty$ 極限をとる)



$\rho^n(t)$ と $\rho^{n-1}(t)$ の比較

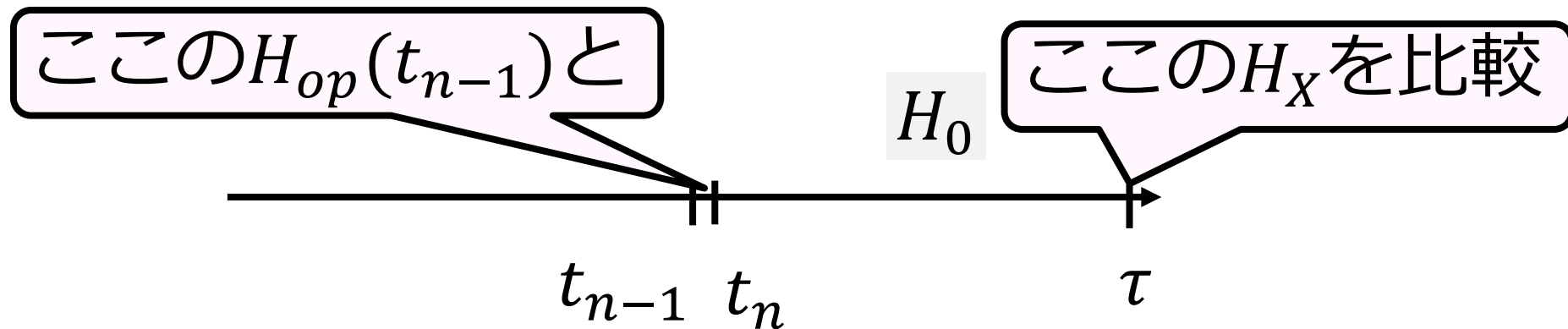


計算すると、 $O(\Delta t)$ までの範囲で

$$\begin{aligned} & |\text{Tr}[H_X \rho^{n-1}(\tau)] - \text{Tr}[H_X \rho^n(\tau)]| \\ & \leq \frac{1}{\hbar} \|[H_{op}(t_{n-1}), U_n^\dagger H_X U_n]\| \Delta t \end{aligned}$$

ただし $U_n := \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(\tau - t_n) \cdot H_0\right)$

$\rho^n(t)$ と $\rho^{n-1}(t)$ の比較



計算すると、 $O(\Delta t)$ までの範囲で

$$\begin{aligned} & |\text{Tr}[H_X \rho^{n-1}(\tau)] - \text{Tr}[H_X \rho^n(\tau)]| \\ & \leq \frac{1}{\hbar} \left\| \left[\mathbf{H}_{op}(t_{n-1}), U_n^\dagger H_X U_n \right] \right\| \Delta t \end{aligned}$$

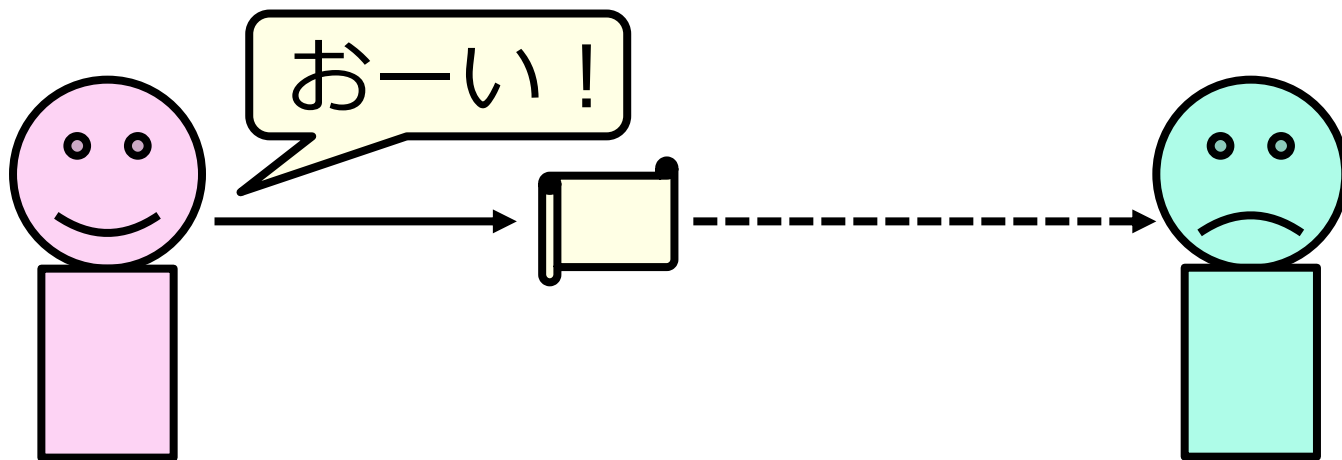
ただし $U_n := \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(\tau - t_n) \cdot H_0\right)$

Lieb-Robinson限界：イメージ

設定：非相対論的量子論

短時間では情報は遠くに届かないだろう！

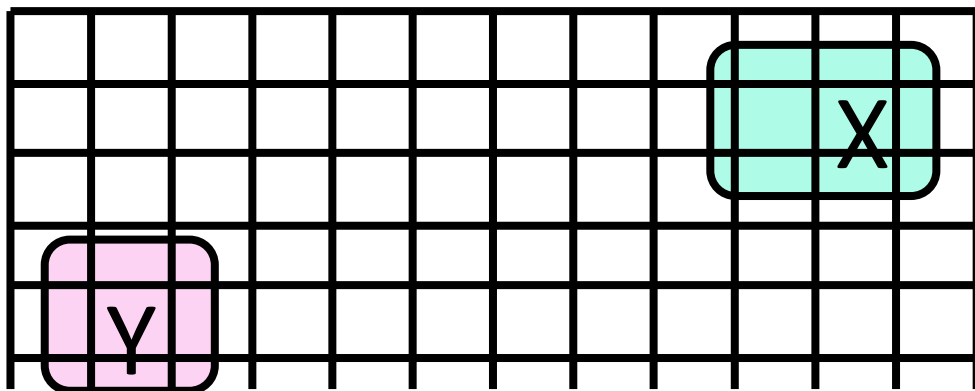
参考：相対論の場合



情報伝達には時間がかかる（超光速通信の禁止）

Lieb-Robinson限界：設定

- 格子系
- 最近接相互作用（簡単のため）
- ハミルトニアンは時間非依存



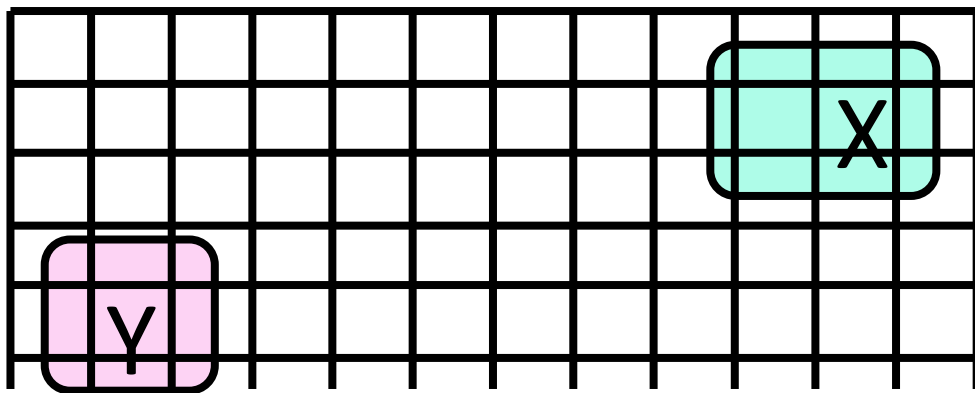
YからXに、短時間ではほとんど情報が送れないことを言いたい！

Lieb-Robinson限界：主張

X, Y に作用するオペレーター A_X, B_Y に対し

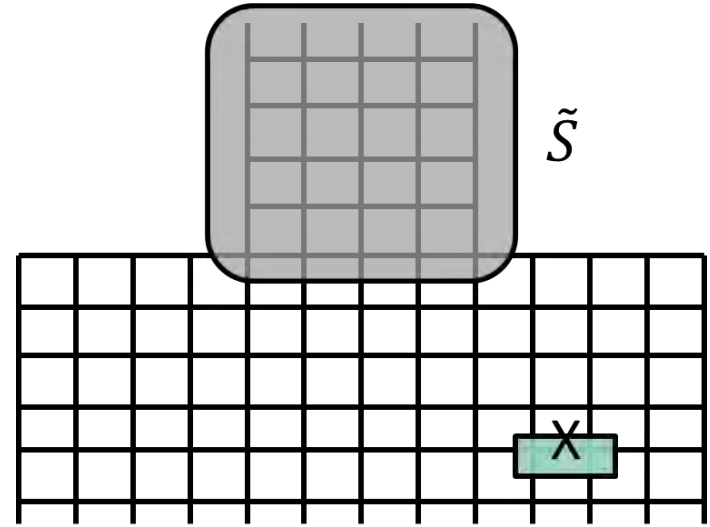
$$\begin{aligned} & \| [A_X(t), B_Y] \| \\ & \leq c \|A_X\| \|B_Y\| |X| |Y| e^{-\mu d(X,Y)} (e^{vt} - 1) \end{aligned}$$

(c, μ, v : 定数、 $d(X, Y)$: X と Y の距離)



LR限界の適用

$H_{op}(t_{n-1})$ は $\tilde{S}$ に、 H_X は X に作用するので、LR限界を適用すると、



$$\begin{aligned} & |\text{Tr}[H_X \rho^{n-1}(\tau)] - \text{Tr}[H_X \rho^n(\tau)]| \\ & \leq \frac{1}{\hbar} \|[H_{op}(t_{n-1}), U_n^\dagger H_X U_n]\| \Delta t \\ & \leq \frac{C}{\hbar} \|H_{op}(t_{n-1})\| \|H_X\| |X| |\tilde{S}| e^{-\mu d(\tilde{S}, X)} (e^{v(\tau-t_n)} - 1) \end{aligned}$$

H_X の ρ_i と ρ_f での差の評価

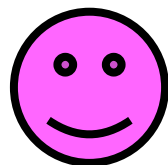
全 n について足し上げ、 $\Delta t \rightarrow 0$ をとって積分に直すと、

$$\begin{aligned} & |\mathrm{Tr}[H_X \rho_f] - \mathrm{Tr}[H_X \rho_i]| \\ & \leq \frac{c}{\hbar} H_{op}^{max} \|H_X\| |X| |\tilde{S}| e^{-\mu d(\tilde{S}, X)} \left(\frac{e^{v\tau} - 1}{v} - \tau \right) \end{aligned}$$

$$(H_{op}^{max} := \max_t \|H_{op}(t)\|)$$

- 距離 $d(\tilde{S}, X)$ に対して指数減衰
- 時間 τ に対して指数増加

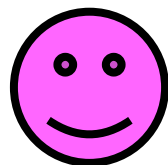
証明方針



Xでのエネルギー変化 $\text{Tr}[H_X \rho_f] - \text{Tr}[H_X \rho_i]$ を上から押さえる

2. $\tilde{S}$ から一定距離以上でのエネルギー増加量が $Q_L/2$ 以下であることを示す
3. $D(\rho_f || \rho_i)$ を下から評価する

証明方針



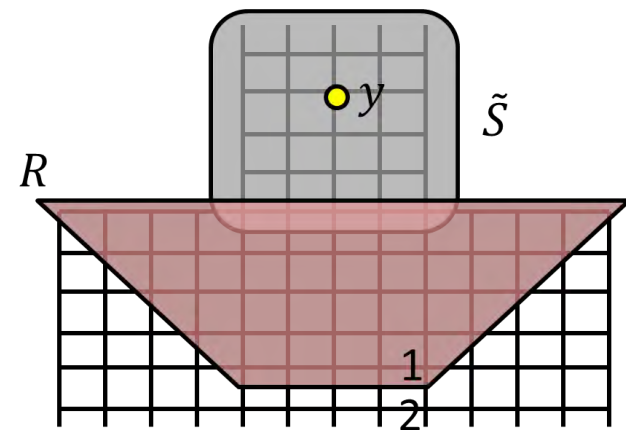
Xでのエネルギー変化 $\text{Tr}[H_X \rho_f] - \text{Tr}[H_X \rho_i]$ を上から押さえる

2. $\tilde{S}$ から一定距離以上でのエネルギー増加量が $Q_L/2$ 以下であることを示す

3. $D(\rho_f || \rho_i)$ を下から評価する

遠くのエネルギー増加量の評価

エンジン内のサイト y からの距離が $R+1$ 以上のサイトが関係する全エネルギーの変化量は以下のように評価できる。



$$|\Delta E_{1,\text{out}}| \leq \frac{k 2^{D-1} (D-1)!}{\mu^D} e^{v\tau} e^{-\frac{\mu(R-1)}{2}}$$

($k := \frac{Kc}{v\hbar} H_{op}^{\max} H_{cite}^{\max} 2|\tilde{S}|e^{\mu l}$ 、 μ, c, v はLR限界のもの)

($H_{cite}^{\max}$: 1サイトが関わるハミルトニアンオペレーターノルムの和の最大値)

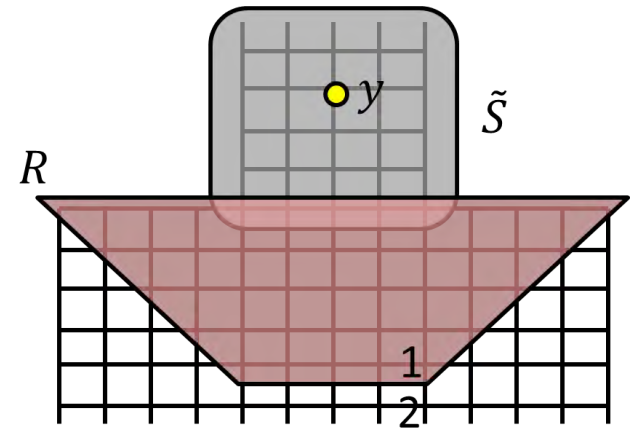
Rの設定

$$R \geq R^* := \frac{2v}{\mu} \tau + C$$

ととれば、領域1内に熱は $Q_L/2$ 以上残留する。

$$C := \frac{2}{\mu} \ln \frac{k 2^D (D-1)!}{\mu^D Q_L} + 1$$

$$k := \frac{Kc}{v\hbar} H_{op}^{max} H_{cite}^{max} 2|\tilde{S}| e^{\mu l}$$



証明方針

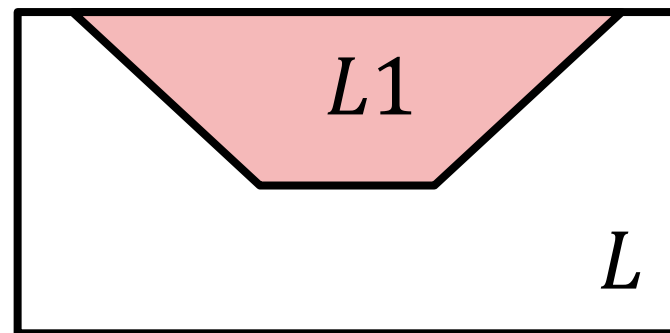
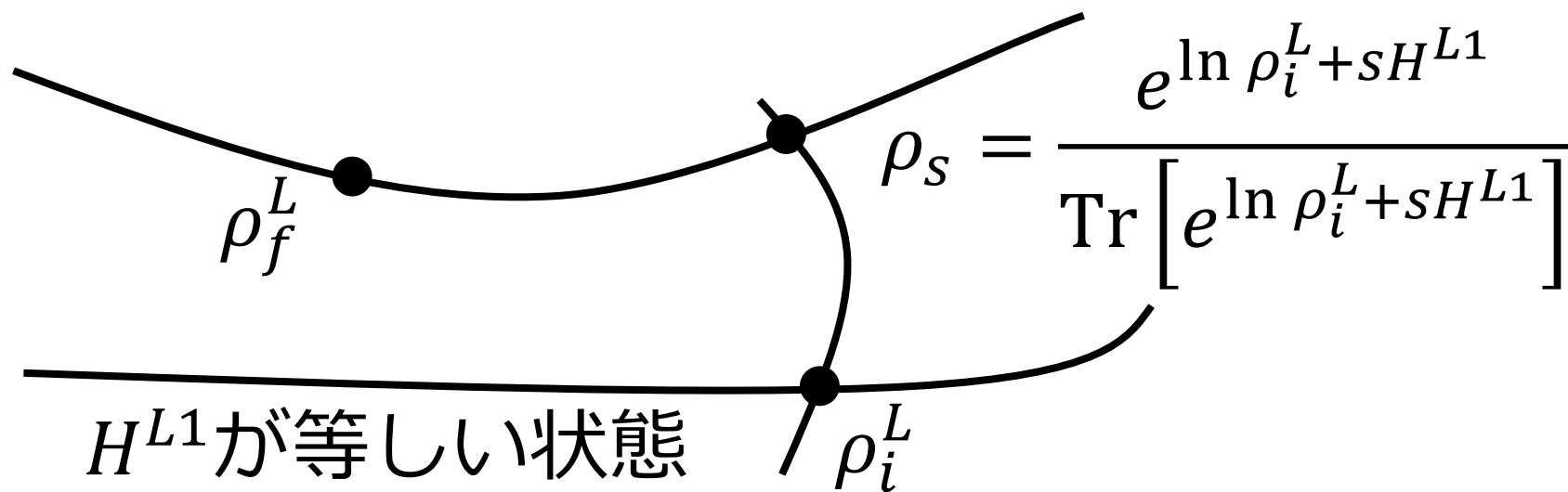
- 😊 Xでのエネルギー変化 $\text{Tr}[H_X \rho_f] - \text{Tr}[H_X \rho_i]$ を上から押さえる
 - 😊 $\tilde{S}$ から一定距離以上でのエネルギー増加量が $Q_L/2$ 以下であることを示す
3. $D(\rho_f || \rho_i)$ を下から評価する

証明方針

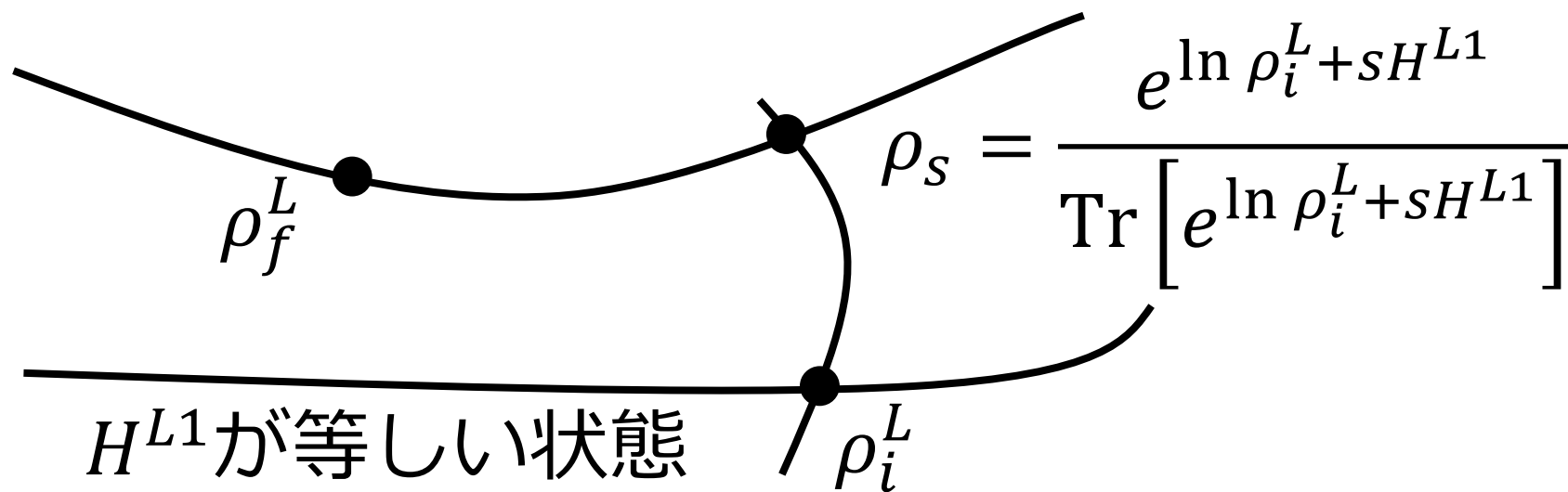
- 😊 X でのエネルギー変化 $\text{Tr}[H_X \rho_f] - \text{Tr}[H_X \rho_i]$ を上から押さえる
- 😊 $\tilde{S}$ から一定距離以上でのエネルギー増加量が $Q_L/2$ 以下であることを示す

3. $D(\rho_f || \rho_i)$ を下から評価する

$D(\rho_f || \rho_i)$ の情報幾何的表現



$D(\rho_f || \rho_i)$ の情報幾何的表現



拡張ピタゴラスの定理

$$\begin{aligned} D(\rho_f^L || \rho_i^L) &= D(\rho_f^L || \rho_s) + D(\rho_s || \rho_i^L) \\ &\geq D(\rho_s || \rho_i^L) \end{aligned}$$

ρ_s の意味

ρ_i^L はカノニカル分布

もし $L1 = L$ なら

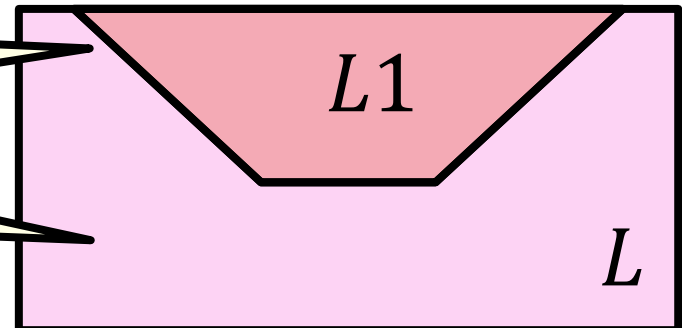
s : **逆温度**の差

ρ_s : 別の温度のカノニカル分布

$$\rho_s = \frac{e^{\ln \rho_i^L + sH^{L1}}}{\text{Tr} \left[e^{\ln \rho_i^L + sH^{L1}} \right]}$$

他領域の温度はそのまま

ここの温度だけ上げる

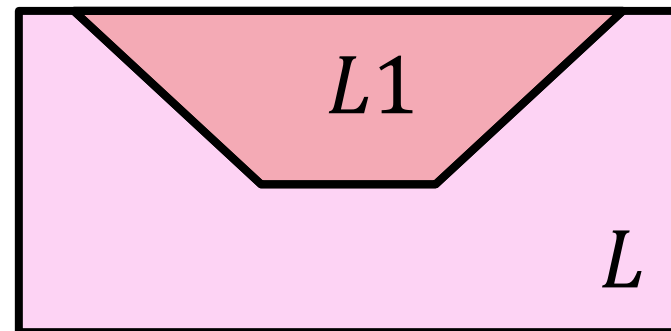


Fisher情報量の導入

$$\text{Fisher情報量} : J(\rho_{s'}) := \frac{d\text{Tr}[H^{L1}\rho_{s'}]}{ds'}$$

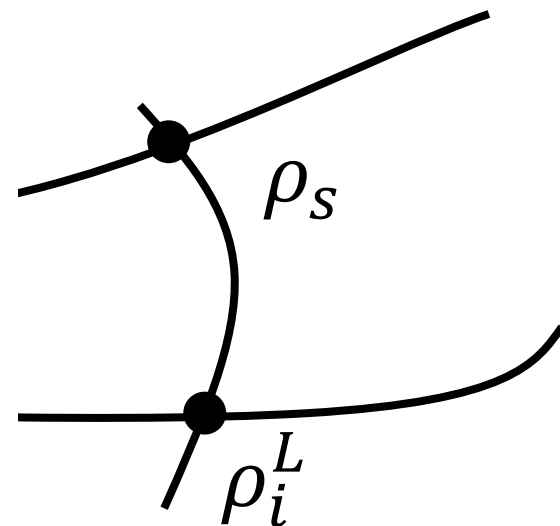
もし $L1 = L$ なら、 $J(\rho_{s'})$ は **比熱** そのもの
一般の場合は **部分比熱** のようなものに対応

Fisher情報量は **L1の体積で
スケール** される！



相対エントロピーは体積の逆数 でスケール

$$D(\rho_s || \rho_i^L) = \frac{(Q_L)^2}{4} \int_0^1 dt \frac{1-t}{J(\rho_{s(t)})}$$
$$\geq \frac{(Q_L)^2}{8j_{max} R^D}$$



$$(s(0) = 0, s(1) = s)$$

(単位体積当たりFisher情報量を $j_{max} := \max_{R,S} \frac{J(\rho_s)}{R^D}$ で定義)

主結果：得られたバウンド

$$\eta \leq \eta_c - \frac{(Q_L)^2}{8\beta_L Q_H j_{max} \left(\frac{2v\tau}{\mu} + C \right)^D}$$

τ : 一サイクルにかかる時間

v, μ, C : Lieb-Robinson 限界から決まる定数

j_{max} : 単位体積当たり Fisher 情報量の最大値

D : 空間次元

- 操作が遅い (τ が大きい) ほど効率はよくなる
- Q_L が大きいほど効率は悪くなる

まとめ

- マルコフ系に対し、以下の不等式を得た

$$J \leq \sqrt{\bar{\Theta} \sigma}$$

- これを用いてパワーと効率の不等式を得た

$$\frac{W}{\tau} \leq \bar{\Theta} \beta_L \eta (\eta_c - \eta)$$

- 非マルコフ系に対し、以下の不等式を得た

$$\eta \leq \eta_c - \frac{(Q_L)^2}{8\beta_L Q_H j_{max} \left(\frac{2v\tau}{\mu} + c \right)^D}$$

END



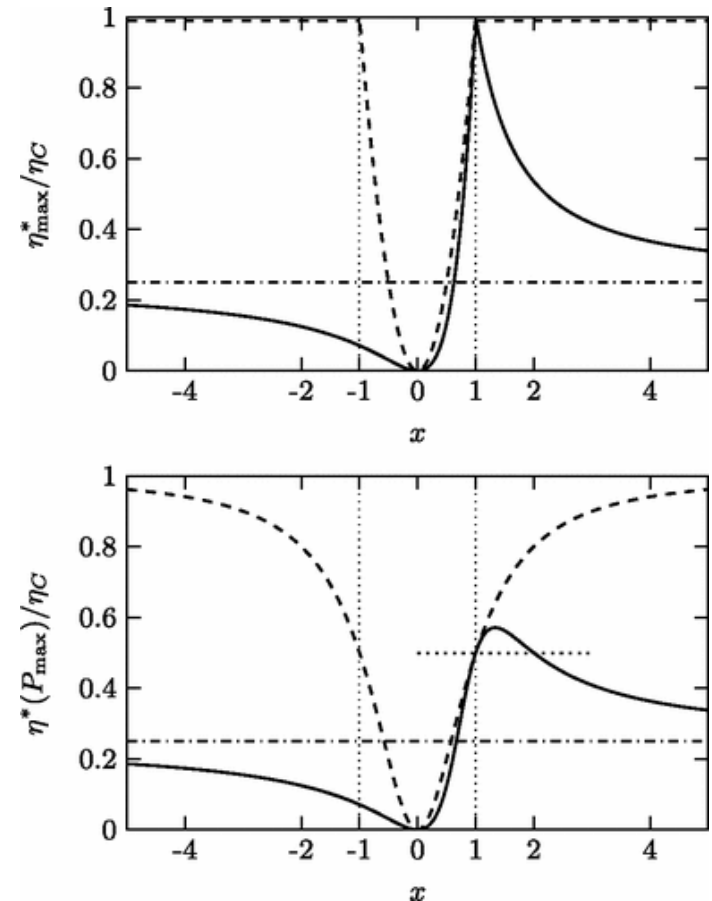
メゾ伝導の制約条件

散乱行列のユニタリー性より

$$L_{ii}L_{jj} + L_{ij}L_{ji} - L_{ij}^2 - L_{ji}^2 \geq 0$$

カルノー効率達成するのは
 $x = 1$ (磁場なし) のみ

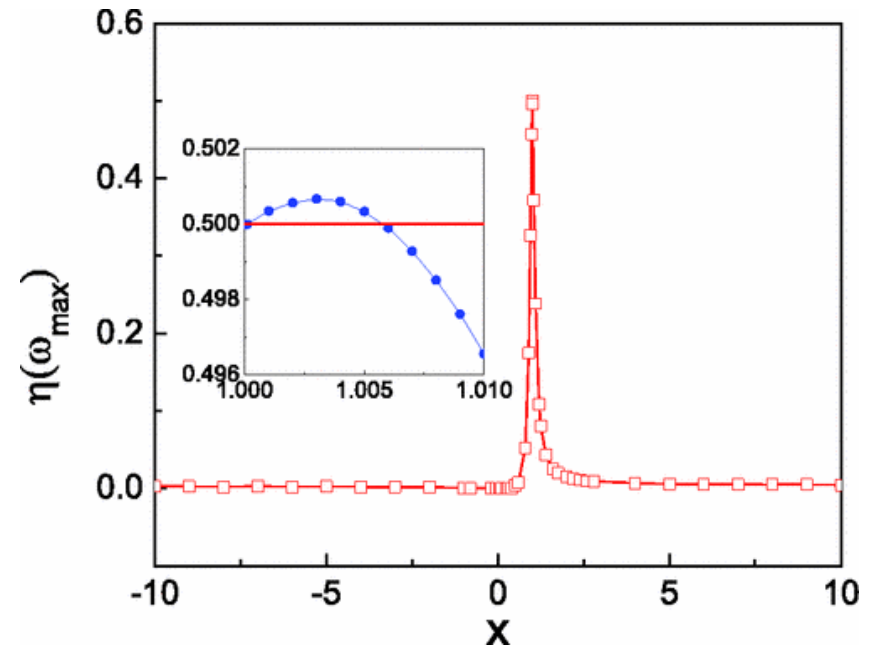
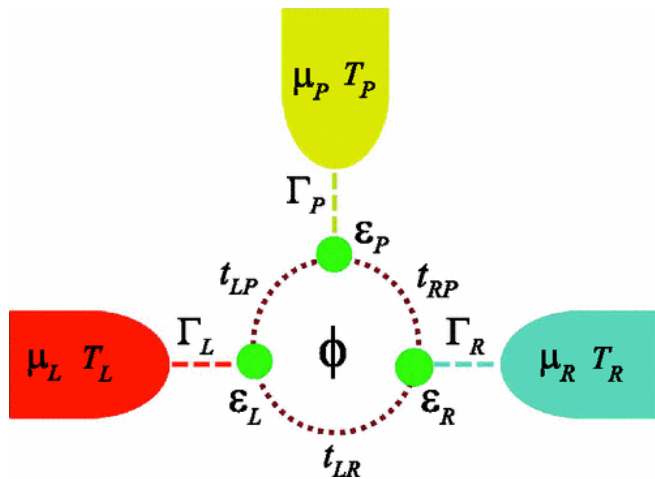
最大パワー時の効率は $1/2$ を
超える領域がある



K. Brandner, K. Saito, and U. Seifert, PRL 110, 070603 (2013).

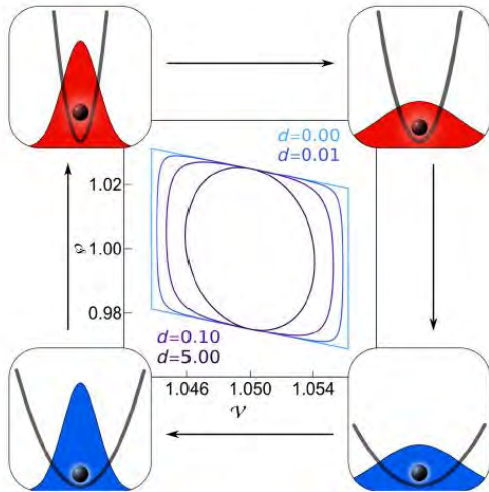
V. Balachandran, G. Beneti, and G. Casati, PRB 87, 165419 (2013).

EMPは1/2を（わずかに）超える



AB効果を真面目に計算して最適解探索をした結果。

サイクルの場合のOnsager行列



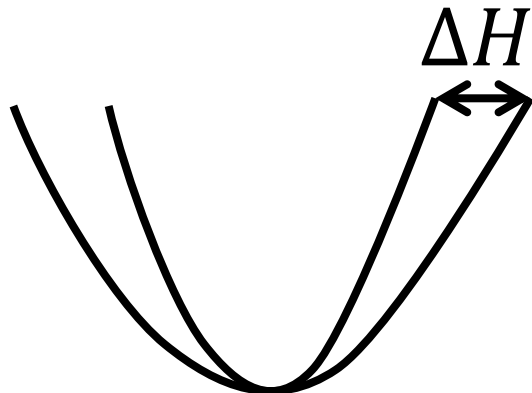
J_q : 高温熱浴から入った熱／時間

J_w : 取り出した仕事／時間

$$F_q := \beta_c - \beta_H$$

$$F_w := \Delta H / T_C$$

$$\dot{S} = J_Q F_Q + J_w F_w$$



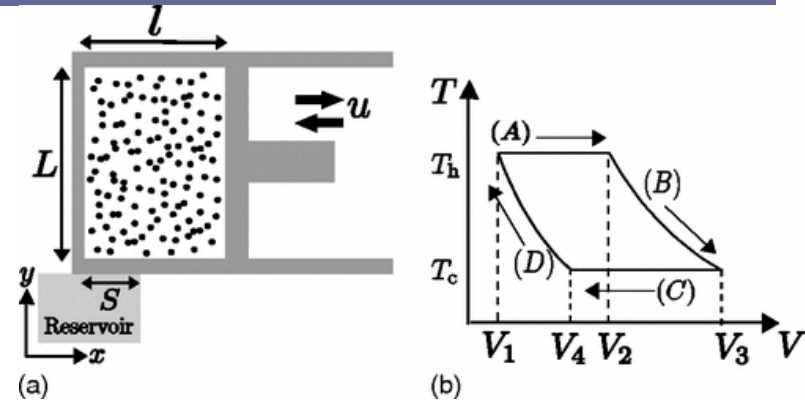
これを用いてOnsager行列も定義できる。

Izumida-Okudaとの違い

Izumida-Okuda

- ・ 移動幅固定。速度を変化

$$\bullet F_i = - \frac{W}{2(l_3 - l_1)T}$$

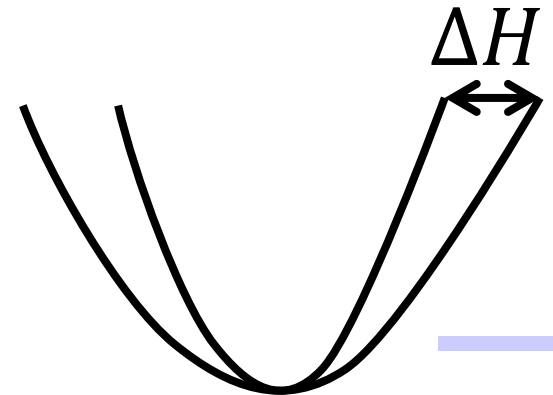


(Y. izumida and K. Okuda, PRE 80, 021121)

Brandner-Saito-Seifert

- ・ 速度固定。移動幅を変化

$$\bullet F_i = \frac{\Delta H}{T}$$



相対エントロピーの不等式

$$\begin{aligned} D(p_x || q_x) &= \sum_x p_x \ln \frac{p_x}{q_x} + q_x - p_x \\ &\geq \sum_x \frac{c_0 (p_x - q_x)^2}{p_x + q_x} \quad \left(c_0 = \frac{8}{9} \right) \end{aligned}$$

$a \ln \frac{a}{b} + b - a \geq \frac{c_0 (a-b)^2}{a+b}$ を用いた

この式は両辺を b で割って微分して比較すれば導ける

詳細釣り合いの下での J と σ

$$\begin{aligned}\sigma &= \sum_{w \neq w'} R_{w'w} P_w \ln \frac{R_{w'w} P_w}{R_{ww'} P_{w'}} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{w \neq w'} (R_{w'w} P_w - R_{ww'} P_{w'}) \ln \frac{R_{w'w} P_w}{R_{ww'} P_{w'}} \\ &\geq \frac{1}{2} \sum_{w \neq w'} \frac{2(R_{w'w} P_w - R_{ww'} P_{w'})^2}{R_{w'w} P_w + R_{ww'} P_{w'}}\end{aligned}$$

$$(\text{cf: } \sigma \geq \sum_{w \neq w'} \frac{c_0 (R_{w'w} P_w - \tilde{R}_{ww'} P_{w'})^2}{R_{w'w} P_w + \tilde{R}_{ww'} P_{w'}})$$

非線形Langevinの場合

$$L^{1,1} := \frac{\gamma(v)}{m} \left\{ \frac{\partial}{\partial v} \cdot v + \frac{1}{\beta m} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right\}$$

ほしい関係式は $R_{v'v}^{1,1} = R_{-v'-v}^{1,1}$ (詳細釣り合い) だけ

- $\gamma(v) = \gamma(-v)$ ならOK
- 一次元ならば詳細釣り合いは成立
- 二次元以上の場合、回転方向はエネルギー変化に効かないことを認めれば、動径方向に一次元の議論が適用可能



underdamped と overdamped の違い

速い自由度の消去による粗視化

- ・ エントロピー生成：平衡なら同じ
- ・ 熱：平衡でも値は変わってしまう

(K. Sekimoto, PRE 76, 060103 (2007))

overdamped 極限で J が変化するので、それに合わせて Θ の表式も変えないといけない。



Θ の上限

$|R_{ww}| \leq R_{max}$ と置くと

$$\Theta^{(1)} \leq \frac{1}{c_0} \left(\frac{d}{dt} \langle \Delta E^2 \rangle + 2R_{max} \langle \Delta E^2 \rangle \right)$$

遷移レートの離散化

$$P_{p \rightarrow p \pm \epsilon} := \frac{\gamma}{\beta \epsilon^2} e^{-\frac{\beta}{4m}((p \pm \epsilon)^2 - p^2)}$$

と置くと、マスター方程式は $\epsilon \rightarrow 0$ で

$$\frac{d}{dt} P(p) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\gamma p}{m} P(p) \right) + \frac{\gamma}{\beta} \frac{\partial^2}{\partial p^2} P(p)$$

というKramers方程式のそれと一致

遷移レートの離散化

$$P_{(x,p) \rightarrow (x,p+\epsilon)} := \frac{1}{\epsilon} F(x, p)$$

$$P_{(x,p) \rightarrow (x+\epsilon', p)} := \frac{1}{\epsilon'} \frac{p}{m}$$

と置くと、マスター方程式は $\epsilon, \epsilon' \rightarrow 0$ で

$$\frac{d}{dt} P(x, p) = -\frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x} P(x, p) - \frac{\partial}{\partial p} F(x, p) P(x, p)$$

というLiouville方程式のそれと一致

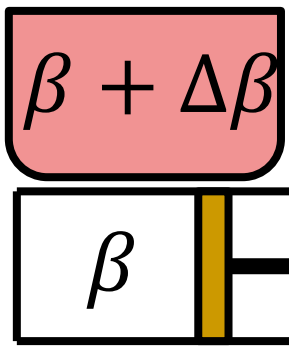


線形領域では改良版不等式はタイト

平衡近傍 $\Delta\beta \ll 1$ ではフーリエ則より

$$J = \kappa \Delta\beta \quad \Rightarrow \quad \sigma = \Delta\beta J = J^2 / \kappa$$

(κ : 熱伝導係数)



揺動散逸的な関係 $\langle J^2 \rangle_{eq} = 2\kappa$ より、

$$\Theta_2 = \kappa$$

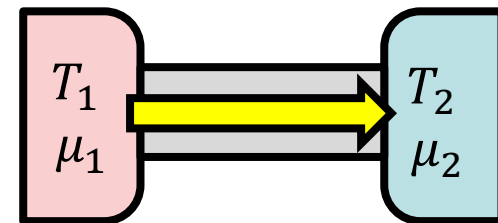
先の不等式 $J^2 \leq \Theta_2 \sigma$ は**線形領域では常に等号成立**するタイトな不等式



熱電効果の場合

$T_1 > T_2, \mu_2 > \mu_1$ とする。

熱流 J_q 、粒子流 J_n はともに $1 \rightarrow 2$ に流れる。



効率 $\eta_C = 1 - \frac{T_2}{T_1} \geq \eta := \frac{\Delta\mu J_n}{J_q - \mu_1 J_n}$ と定義される。

($\Delta\mu := \mu_2 - \mu_1$ ここで $J_q - \mu_1 J_n > 0$ は仮定する)



熱流と粒子流に対する不等式

同様の不等式変形により

$$2J_q \leq \sqrt{\Theta_q \sigma}$$

$$2J_n \leq \sqrt{\Theta_n \sigma}$$

ただし Θ_q は Θ^1 または Θ^2 、 Θ_n は

$$\Theta_n := \frac{9}{8} \sum_{w \neq w'} \Delta N_{w'}^2 (R_{w'w} P_w + R_{ww'} P_{w'})$$

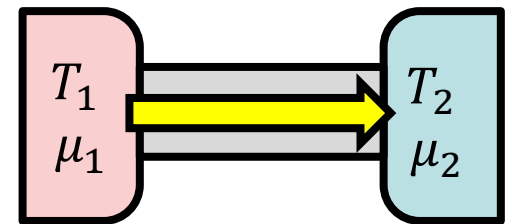


熱電効果のパワーと効率の不等式

これらを用いると、パワーと効率の間に

$$\Delta\mu J_n \leq \frac{\Theta_q + (\mu_1)^2 \Theta_n}{2} \beta_2 \eta (\eta_c - \eta)$$

という不等式が成り立つ。





量子マルコフ過程の場合

以下の二つの場合について、古典系の結果がどのように拡張されるかを見る。

- Lindblad方程式で書ける定常状態の場合
- 一般の場合

問題となる点

どのようにエントロピー生成率、熱流を定義すればよいか？



Lindblad方程式で書ける場合

エネルギー基底で記述した密度行列 ρ_{ij} の時間発展について以下の事実が知られている。

- 対角項 ρ_{ii} だけで閉じたダイナミクスになる (Pauli方程式)
- 対角項の遷移だけでエネルギー・粒子の平均変化は記述できる。
- 対角項の遷移レートは (グランド) カノニカル分布を定常分布にもつ

Lindblad方程式で書ける場合

以上の性質より、エネルギー流、粒子流は古典確率過程と全く同じ記述が成り立つ。

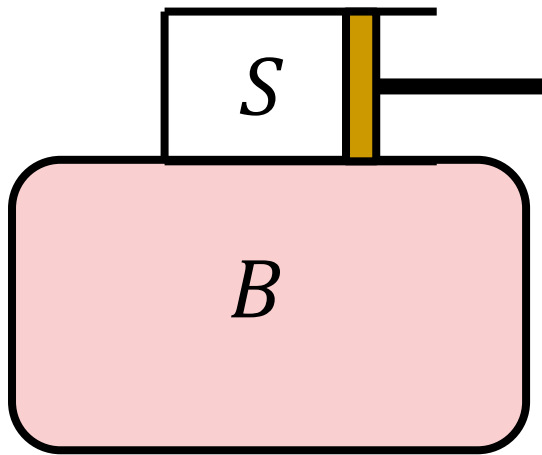
系の定常性を用いると、エントロピー生成のうち**von Neumannエントロピーの変化は常にゼロ**なので無視できる。

よって遷移レートを対角項の遷移レートにとると、古典確率過程の結果がそのまま成立！

一般の場合

系のダイナミクスがマルコフ的である。

→熱浴の状態が常にカノニカル分布とみなせる



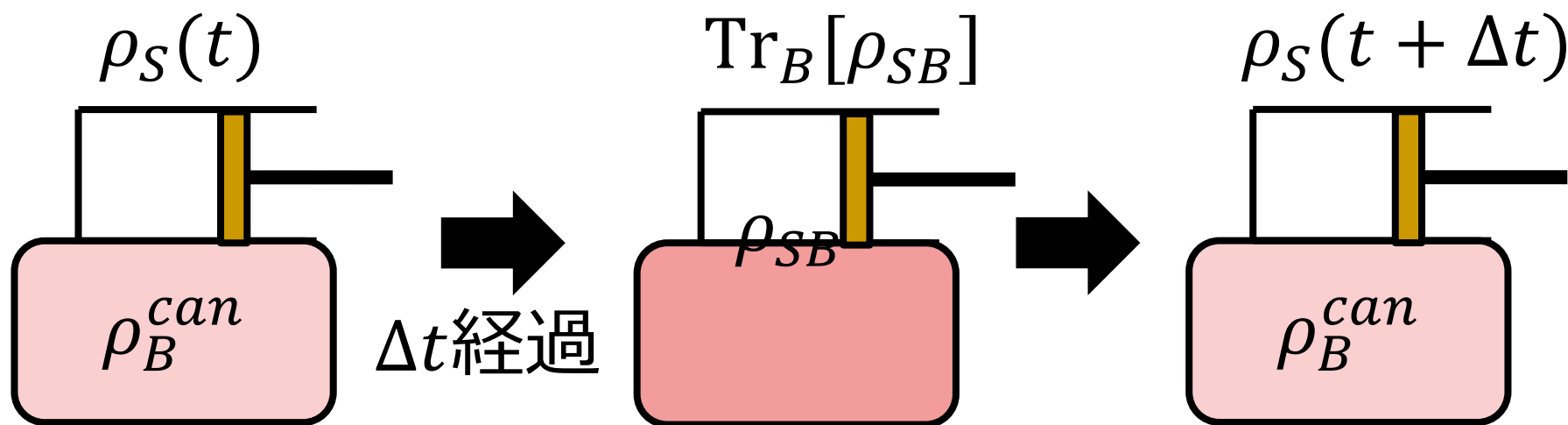
$$\rho_{SB}(t) \cong \rho_S(t) \otimes \rho_B^{can}$$

とみなして系のダイナミクス
を記述してよい！



マルコフダイナミクスの記述

1. $\rho_S(t) \otimes \rho_B^{can}$ を微小時間 Δt だけ時間発展させる
2. 次の複合系の状態を $\rho_S(t + \Delta t) \otimes \rho_B^{can}$ にとる



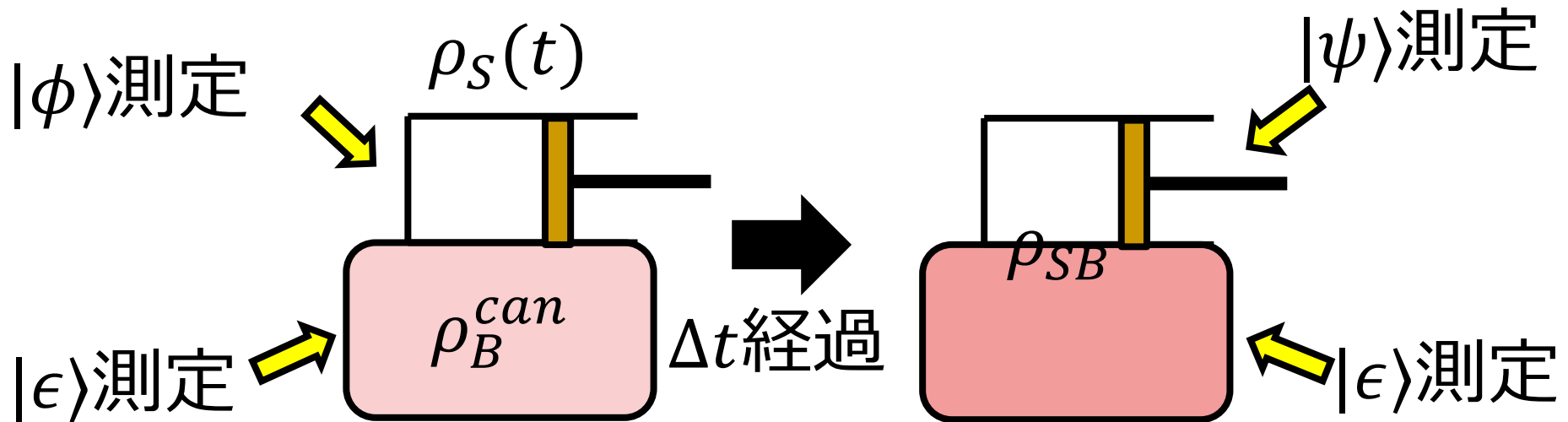
測定の導入

$\rho_S(t + \Delta t) := \text{Tr}_B[\rho_{SB}(t + \Delta t)]$ とする。

$|\phi_a\rangle$: $\rho_S(t)$ を対角化する基底

$|\psi_a\rangle$: $\rho_S(t + \Delta t)$ を対角化する基底

$|\epsilon_j\rangle$: 熱浴のj番目のエネルギー固有状態



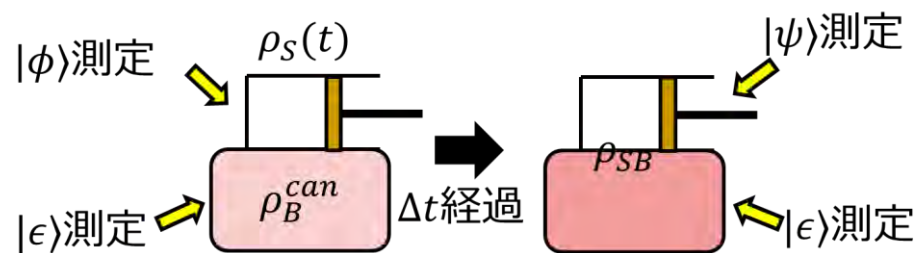
エントロピー生成の定義

U を $t \sim t + \Delta t$ の時間発展演算子として

$$P_{aj \rightarrow a'j'}^{\Delta t} := \langle \psi_{a'}, \epsilon_{j'} | U | \phi_a, \epsilon_j \rangle = \langle \phi_{\tilde{a}}, \epsilon_{\tilde{j}} | U^\dagger | \psi_{\tilde{a}'}, \epsilon_{\tilde{j}'} \rangle$$

p_a^t : $|\phi_a\rangle$ の観測確率

$p_a^{t+\Delta t}$: $|\psi_a\rangle$ の観測確率



以下で定義されるエントロピー生成は非負

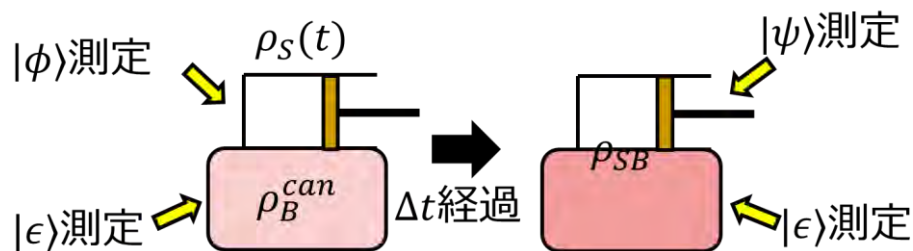
$$\sigma := \sum_{a,a',j,j'} p_a^t p_j^{can} P_{aj \rightarrow a'j'}^{\Delta t} \ln \frac{p_a^t p_j^{can}}{p_{a'}^{t+\Delta t} p_{j'}^{can}} \geq 0$$

受け渡した熱の定義

ここで、 $t \sim t + \Delta t$ で受け渡した熱は

$$J_Q^{\Delta t} := \sum_{a,a',j,j'} p_a^t p_j^{can} P_{aj \rightarrow a'j'}^{\Delta t} (E_{a'} - E_a)$$

($E_a := \langle \phi_a | H | \phi_a \rangle$: 状態aのエネルギー期待値)



エネルギー保存則より

$$E_{a'} - E_a = \epsilon_j - \epsilon_{j'}$$



熱流とエントロピー生成率の不等式

$$(P_{a,j \rightarrow a',j'} := \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{P_{a,j \rightarrow a',j'}^{\Delta t}}{\Delta t}, \dot{\sigma} := \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\sigma}{\Delta t}, J_Q := \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{J_Q^{\Delta t}}{\Delta t})$$

このとき同様にして以下の不等式が示せる

$$|J_Q| \leq \sqrt{\Theta \dot{\sigma}}$$

$$\Theta := \frac{9}{8} \sum_{a,a',j,j'} (\Delta E_{a'})^2 A_{a,j:a',j'}$$

$$\Delta E_a := E_a - \text{Tr}[H\rho(t)]$$

$$A_{a,j:a',j'} := p_a p_j^{can} P_{aj \rightarrow a'j'} + p_{a'} p_{j'}^{can} P_{\tilde{a}'\tilde{j}' \rightarrow \tilde{a}\tilde{j}}$$





効率の相対エントロピー表示

$$\begin{aligned} & \text{Tr}[(\rho_i - \rho_f) \ln \rho_i] \\ &= -\beta_H \text{Tr}[(\rho_i^H - \rho_f^H) H^H] - \beta_L \text{Tr}[(\rho_i^L - \rho_f^L) H^L] \\ &= -\beta_H Q_H + \beta_L Q_L \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Tr}[(\rho_i - \rho_f) \ln \rho_i] &= \text{Tr}[\rho_f (\ln \rho_f - \ln \rho_i)] \\ &= D(\rho_f || \rho_i) \end{aligned}$$

$$\eta := \frac{W}{Q_H} = \mathbf{1} - \frac{\beta_H}{\beta_L} - \frac{D(\rho_f || \rho_i)}{\beta_L Q_L}$$



ρ_i^S と ρ_f^S が違う場合

系だけ見た場合に、始状態と終状態がずれていたとしても、議論はすべて同様に成り立つ。

違いとしては、

$$D(\rho_f || \rho_i) \geq D(\rho_f^S || \rho_i^S) + D(\rho_f^H || \rho_i^H) + D(\rho_f^L || \rho_i^L)$$
だが、このうち $D(\rho_f^S || \rho_i^S)$ が非ゼロになるので **さらに散逸が大きくなる** だけである。

LR限界（一般形）

ローカルハミルトニアンについて

$$\sum_{Z \ni x, y} \|h_Z\| \leq \lambda e^{-\mu d(x, y)}$$

二点間のパスが多すぎない。具体的には、以下のような p_0 が存在する。

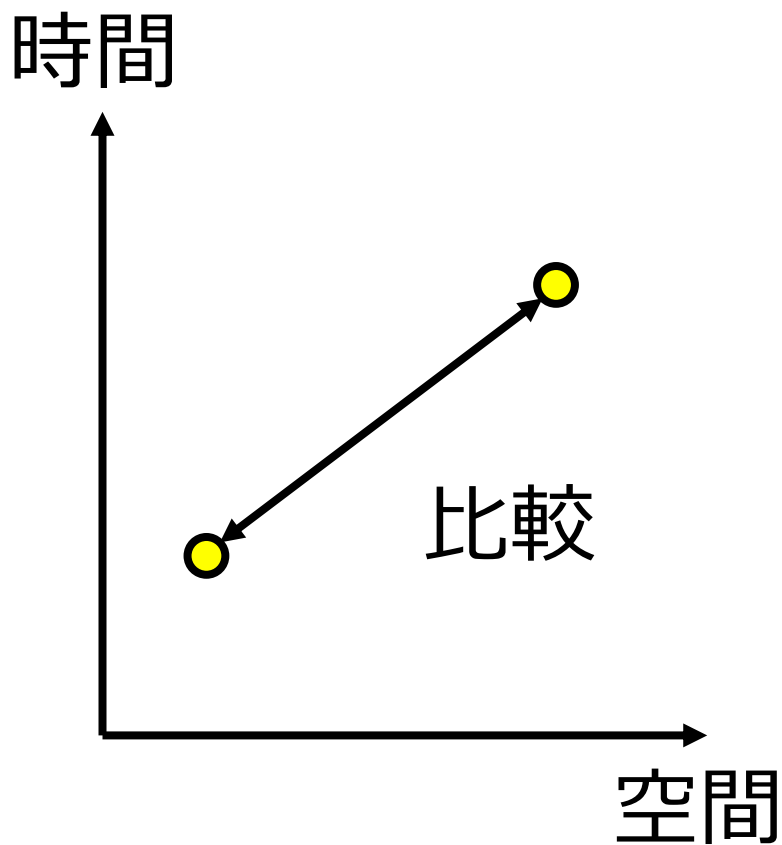
$$\sum_Z e^{-\mu(d(x, z) + d(z, y))} \leq p_0 e^{-\mu d(x, y)}$$

x,Yに作用するオペレーター A_X, B_Y に対し

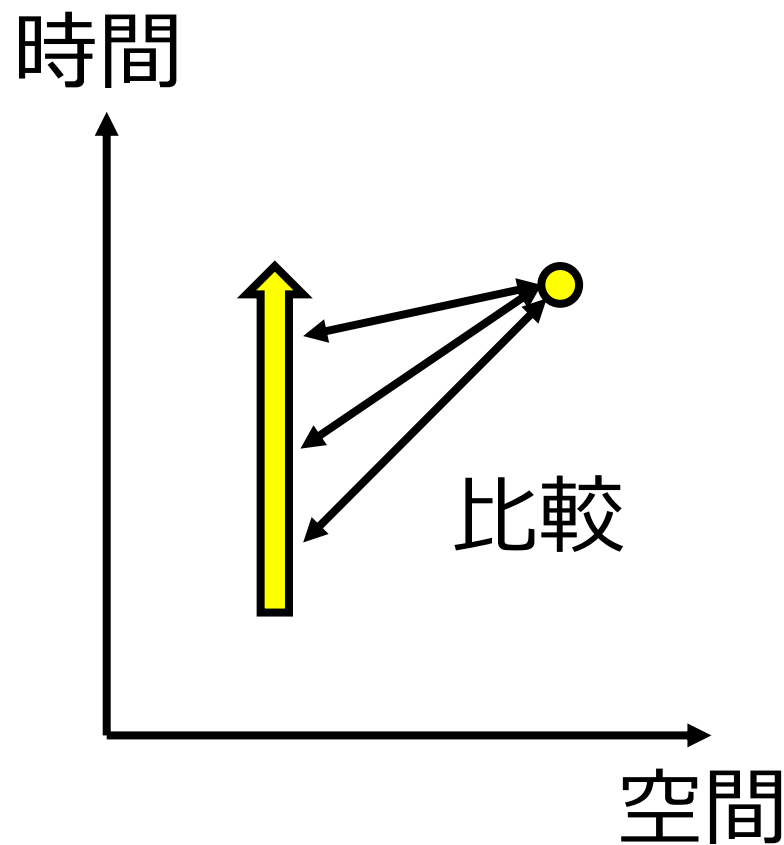
$$\begin{aligned} & \| [A_X(t), B_Y] \| \\ & \leq c \| A_X \| \| B_Y \| |X| |Y| e^{-\mu d(X,Y)} (e^{vt} - 1) \end{aligned}$$

$$c := \frac{2}{p_0} \quad v := 2\lambda p_0$$

LR限界と今回の不等式の違い



LR限界



今回の不等式

途中式

$$\rho^n(\tau) = U_n e^{-\frac{i}{\hbar}(H_0 + H_{op}(t_{n-1}))\Delta t} \rho^N(t_{n-1}) e^{\frac{i}{\hbar}(H_0 + H_{op}(t_{n-1}))\Delta t} U_n^\dagger$$
$$\rho^{n-1}(\tau) - \rho^n(\tau) = U_n \frac{i}{\hbar} [\rho^N(t_{n-1}), H_{op}(t_{n-1})] U_n^\dagger \Delta t$$

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left[H_X U_n \frac{i}{\hbar} [\rho^N(t_{n-1}), H_{op}(t_{n-1})] U_n^\dagger \right] \\ &= \text{Tr} \left[[H_{op}(t_{n-1}), U_n^\dagger H_X U_n] \rho^N(t_{n-1}) \right] \\ &\leq \| [H_{op}(t_{n-1}), U_n^\dagger H_X U_n] \| \| \rho^N(t_{n-1}) \| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & | \text{Tr}[H_X \rho^{n-1}(\tau)] - \text{Tr}[H_X \rho^n(\tau)] | \\ &\leq \frac{1}{\hbar} \| [H_{op}(t_{n-1}), U_n^\dagger H_X U_n] \| \Delta t \end{aligned}$$

途中式

$R \geq \frac{D-1}{\mu} + 1$ とすると

$$\begin{aligned} |\Delta E_2 + \Delta E_{12}| &\leq \sum_{r=R}^{\infty} k v r^{D-1} e^{-\mu r} \left(\frac{e^{v\tau} - 1}{v} - \tau \right) \\ &\leq k e^{v\tau} \int_{R-1}^{\infty} d r r^{D-1} e^{-\mu r} \\ &\leq \frac{k 2^{D-1} (D-1)!}{\mu^D} e^{v\tau} e^{-\frac{\mu(R-1)}{2}} \end{aligned}$$

($k := \frac{Kc}{v\hbar} H_{op}^{max} H_{cite}^{max} 2|\tilde{S}|e^{\mu l}$ 、 μ, c, v はLR限界のもの)

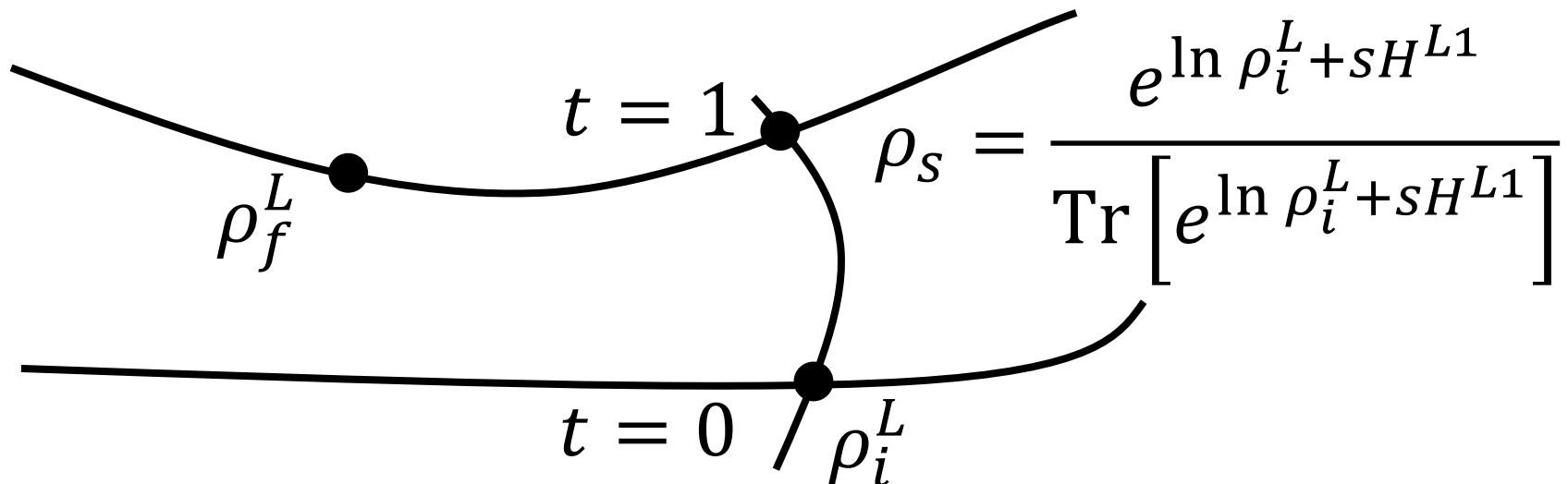
(H_{cite}^{max} : 1サイトが関わるハミルトニアンのおペ

レーターノルムの和の最大値)

$s(t)$ の定義

$0 \leq t \leq 1$ は以下を満たすようにラベル

$$\mathrm{Tr}[H^{L1}\rho_{s(t)}] = (1-t)\mathrm{Tr}[H^{L1}\rho_i^L] + t\mathrm{Tr}[H^{L1}\rho_f^L]$$



相対エントロピーの Fisher情報量表現の導出

tの定義式より

$$\frac{ds}{dt} \frac{d\text{Tr}[H^{L1}\rho_s]}{ds} = \text{Tr}[H^{L1}\rho_{s(1)}] - \text{Tr}[H^{L1}\rho_i]$$
$$1 - t(s) = - \frac{\text{Tr}[H^{L1}\rho_s] - \text{Tr}[H^{L1}\rho_{s(1)}]}{\text{Tr}[H^{L1}\rho_{s(1)}] - \text{Tr}[H^{L1}\rho_i]}$$

よって

$$D(\rho_{s(1)} || \rho_i^L) = \int_0^{s(1)} ds (\text{Tr}[H^{L1}\rho_{s(1)}] - \text{Tr}[H^{L1}\rho_s])$$
$$= \text{Tr}[H^{L1}(\rho_f^L - \rho_i^L)]^2 \int_0^1 dt \frac{1-t}{J(\rho_{s(t)})}$$

Jaynes流の相対エントロピー評価

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \text{とすると}$$

$$D(\rho' || \rho) = \text{Tr}[\rho' \ln \rho'] - \text{Tr}[\rho' \beta H] + \ln Z$$

$\text{Tr}[\rho' H] = E'$ で固定されているとすると、これはvon Neumannエントロピー $\text{Tr}[\rho' \ln \rho']$ の最適化問題と一致するので、この最小値はカノニカル分布で与えられる。

熱力学極限の場合

同様に領域 1 と 2 に分割する。熱力学より

$$\Delta S^L \geq \beta^L Q^L + \left(\min \frac{\partial^2 S^{L1}}{\partial (E^{L1})^2} \right) \Delta E^{L1}$$

一次相転移がない限り有限の値をとる！

$Q^L/2$ 以上

熱力学極限の R

$$R \geq R^* := \frac{2v}{\mu} \tau + C$$

$$C := \frac{2}{\mu} \ln \frac{k 2^D (D-1)!}{\mu^D Q_L} + 1$$

$$k := \frac{Kc}{v\hbar} H_{op}^{max} H_{cite}^{max} 2|\tilde{S}| e^{\mu l}$$

- ・ τ は大体体積（のべき）に比例して増大
- ・ C は大体 $\ln V$ オーダーなのでこの寄与は無視できる