一般化時間反転観測量に対する熱力学的不確定性関係

犬童 哲汰[1]，長谷川 禎彦[1]

[1] 東京大学大学院情報理工学系研究科　〒113–8656 東京都文京区本郷 7–3–1

あらまし　熱力学的不確定性関係は，非平衡系の観測量の揺らぎをエントロピー生成で制限するが，従来は時間反転に対する厳密な反対称性を仮定してきた．本研究では，反転前後の観測値が同符号にならないという緩い条件を導入し，揺らぎの定理と確率不等式から達成可能な新しい下界を導く．量子吸収冷凍機および拡散チャネルの整流観測量に適用し，従来の関係が適用できない場合にも精度限界を与えることを示す．
キーワード 熱力学的不確定性関係，一般化時間反転，エントロピー生成，整流観測量

Thermodynamic Uncertainty Relation for Generalized Time-Reversal Observables

Tetta INDO[1], Yoshihiko HASEGAWA[1]

[1] Department of Information and Communication Engineering,
Graduate School of Information Science and Technology,
The University of Tokyo, Tokyo 113–8656, Japan

Abstract Thermodynamic uncertainty relations constrain observable fluctuations by entropy production, typically assuming exact antisymmetry under time reversal. We relax this requirement to a sign condition between forward and reversed trajectories and derive a saturable bound using fluctuation symmetry and a concentration inequality. Applications to a quantum absorption refrigerator and a diffusion channel demonstrate thermodynamic precision limits for rectified observables beyond conventional current-based relations.
Key words Thermodynamic uncertainty relation, time reversal, entropy production, rectification

1. はじめに

非平衡系において，熱力学的不確定性関係（TUR）は観測量の精度と散逸の間のトレードオフを与える．特に，定常マルコフ過程のカレント型観測量 J には，エントロピー生成 σ を用いて

$$\frac{\mathrm{Var}[J]}{\langle J\rangle^2} \geq \frac{2}{\langle\sigma\rangle} \tag{1}$$

という下界が知られている [1, 2]．一方，従来の導出では，軌道 Γ とその時間反転 $\Gamma^\dagger$ に対し，$J(\Gamma^\dagger) = -J(\Gamma)$ という反対称性が重要な役割を果たす．実際に, 既存の TUR は全てこの強い対称性に依存した形で導出される．したがって，正方向の流れのみを記録する検出器など，情報を整流した観測量には一般に適用できない．本研究ではこの制約を緩和し，より広い観測量に成り立つ TUR を導く．具体的には, 従来の軌道レベルでの統計から, 観測量が取る分布レベルでの統計へと視点を移すことで, 集中不等式による分布評価を可能にする. これにより, 軌道の詳細に依存しない知識から精度の下限が与えられる．

2. 一般化時間反転と主結果

順逆の確率法則が一致する定常系では，軌道確率とエントロピー生成が次の関係を満たす．

$$P[\Gamma] = e^{\sigma(\Gamma)} P[\Gamma^\dagger] \tag{2}$$

観測量 $\phi(\Gamma)$ に対して，厳密な反対称性に代わり

$$\phi(\Gamma)\,\phi(\Gamma^\dagger) \le 0 \tag{3}$$

のみを課す．これを**一般化時間反転条件**と呼ぶ．例えば時間反転で符号が変わる仕事 W を一方向に整流した $\phi = \max\{W, 0\}$ は式 (3) を満たす．

本研究の主結果は，$x(z) = z\tanh(z/2)$ の逆関数 $f = x^{-1}$ を用いて

$$\frac{\mathrm{Var}[\phi]}{\langle\phi\rangle^2} \ge \exp[-f(\langle\sigma\rangle)] \tag{4}$$

と表される．ここで $\langle\phi\rangle \neq 0$ を仮定する．式 (4) は式 (2), (3) の下で動力学の具体形によらず成立し，適切な二点分布で等号を達成できる．特に $\langle\sigma\rangle \to 0$ において右辺は 1 に収束し，従来の式 (1) と異なり有限である．

導出の鍵は，$\langle\phi\rangle > 0$ として Cantelli の不等式 [3] を適用することにある．時間反転で対になる軌道の確率比と Jensen の不等式から

$$\frac{1}{1+e^{f(\langle\sigma\rangle)}} \le \Pr(\phi \le 0) \le \frac{\mathrm{Var}[\phi]}{\mathrm{Var}[\phi] + \langle\phi\rangle^2} \tag{5}$$

を得る．これを整理すれば式 (4) が従う．

3. 物理系への適用

3.1 三準位量子吸収冷凍機

温度の異なる三つの熱浴に結合した自律冷凍機を考える．冷浴からの正味吸熱量を $Q_1(\Gamma)$ とし，冷却という目的に直接対応する観測量を

$$\phi(\Gamma) = \max\{Q_1(\Gamma), 0\} \tag{6}$$

と定義する．Q_1 は時間反転で符号を変えるため，ϕ は反対称を持たない一方で式 (3) を満たす．Gillespie 法による軌道シミュレーションの結果を図 1 に示す．一般化観測量の相対分散は式 (4) の下界を満たし，従来のカレント型 TUR による制限が破れる場合にも有効である．

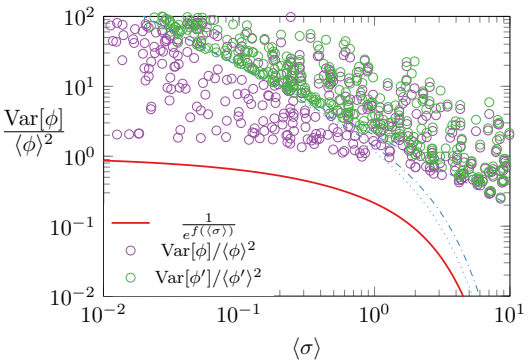

図 1: 三準位量子吸収冷凍機の数値結果（元論文より）．赤線は式 (4)，紫丸は整流観測量 ϕ，緑丸は反対称な $\phi' = Q_1$．

3.2 一次元拡散チャネル

二つの粒子浴の濃度差で駆動される拡散系では，反対称な積分カレント J_T に異なる利得 $\alpha_\pm > 0$ をかけた観測量

$$\phi = \begin{cases} \alpha_- J_T & (J_T \le 0), \\ \alpha_+ J_T & (J_T > 0) \end{cases} \tag{7}$$

は式 (3) を満たす．カレントがガウス分布に従うことを利用すると，Vysochanskij–Petunin の不等式に基づく，より強い下界も得られる．その有効性を数値計算で確認した．

4. まとめ

時間反転での符号に着目し，整流などで情報を失う観測量にも適用可能な TUR を導いた．これにより，散逸と精度の関係をカレント型観測量の枠外へ拡張した．

参考文献

[1] A. C. Barato and U. Seifert, Phys. Rev. Lett. **114**, 158101 (2015).

[2] T. R. Gingrich, J. M. Horowitz, N. Perunov and J. L. England, Phys. Rev. Lett. **116**, 120601 (2016).

[3] S. Boucheron, G. Lugosi and P. Massart, *Concentration Inequalities* (Oxford University Press, 2013).