

量子情報と熱力学

第二法則の情報理論的な導出

沙川 貴大

1. はじめに

熱力学は 19 世紀以来の歴史をもつ理論体系であるが、ここ 20 年ほどで現代的な理論が整備されてきた。とくに興味深いのは、従来のマクロ系の平衡熱力学を超えて、熱力学の基本原則をめぐり理論が大きく発展しつつあることだ。たとえば熱ゆらぎの影響を積極的に考慮してミクロ系にも適用できるように拡張された熱力学は、ゆらぎの熱力学 (stochastic thermodynamics) と呼ばれ、活発な研究分野を形成している^{*1)}。とくに 1990 年代のゆらぎの定理 (fluctuation theorem) の発見は、熱力学の現代的な定式化への道を拓いた。

この流れの中で、Shannon エントロピーや von Neumann エントロピーなどの (量子) 情報理論的な概念が重要な役割を果たしてきた。また、より最近になって、「Maxwell のデーモン」が測定やフィードバックなどを行う状況に拡張された熱力学、いわば情報熱力学が活発に研究されている^{*2)}。さらにここ数年、少し異なる文脈から、リソース理論 (resource theory) と呼ばれる量子情報理論の考え方を熱力学に応用する試みも行われている⁵⁾。これはしばしば熱力学リソース理論と呼ばれる。

総じて、熱力学第二法則に関わる数理構造が、(量子) 情報理論の観点から整理され、第二法則と

情報理論の深い関係が明らかになってきたと言える。この理論的な発展の背景には、実験技術の進歩もある。古典系ではコロイド粒子や生体分子モーター、量子系では NMR やイオントラップなど多彩な系で、ミクロな熱力学の実験が可能になってきた。熱力学は理論・実験ともに現代的な研究分野として新たな注目を集めているのだ。

このような背景のもと本稿では、とくに数理的な側面に焦点を当てて、熱力学第二法則と量子情報理論の関係を解説する。やや駆け足になるが、ゆらぎの定理的な視点と、リソース理論的な視点の両方を概観したい。より専門的な文献を読む前の、大まかな鳥瞰図のような役割を本稿が果たせれば幸いである。

まず 2 節で一般的な設定を述べ、3 節で量子相対エントロピーの基本的な性質をまとめる。4 節で、ゆらぎの定理的な第二法則の導出と、量子相対エントロピーとの関連について述べる。5 節と 6 節では、リソース理論的な議論を、majorization という概念を中心に紹介する。7 節で歴史についてのコメントとともに本稿をまとめる。

2. 熱力学的な操作

一般に、量子系の状態は密度演算子 $\hat{\rho}$ で記述される。 $\hat{\rho}$ はある正規直交基底 $\{|\varphi_i\rangle\}_{i=1}^d$ を用いて

*1) レビューとして、たとえば文献^{1, 2)}を参照。

*2) 情報熱力学のレビューとして、文献³⁾がある。またより入門的なレビューとしては文献⁴⁾を参照。

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^d p_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \quad (1)$$

と対角化できる．ここで $p := (p_1, p_2, \dots, p_d)^T$ は古典確率分布であり^{*3)}, $\hat{\rho}$ の対角分布と呼ぶことにする．(1) で表される $\hat{\rho}$ は, 状態ベクトル $|\varphi_i\rangle$ で表される状態が確率 p_i で古典的に混合されている状態と解釈できる．確率なので $p_i \geq 0$ かつ $\sum_{i=1}^d p_i = 1$ が成り立つが, これはそれぞれ $\hat{\rho} \geq 0$ および $\text{tr}[\hat{\rho}] = 1$ を意味する^{*4)} .

さて, 熱力学系 (以下, システムと呼ぶ) が環境 (以下, 熱浴と呼ぶ) と相互作用して時間発展する場合を考えよう．システムのヒルベルト空間の次元を $d (< +\infty)$ とする．熱浴も有限次元とする．物理的なイメージとしては, システムはミクロな系で熱浴はマクロな系と考えるのが自然である．しかし論理的には, システムや熱浴のサイズに関する仮定は (本稿の議論の範囲では) ない．

全系の時間発展はユニタリと仮定する．また, システムと熱浴の初期状態をそれぞれ $\hat{\rho}, \hat{\rho}_B$ として, 全系の初期状態を $\hat{\rho} \otimes \hat{\rho}_B$ とする^{*5)} . 全系にユニタリ変換 \hat{U} が作用すると, システムの終状態は

$$\mathcal{E}(\hat{\rho}) := \text{tr}_B[\hat{U}\hat{\rho} \otimes \hat{\rho}_B \hat{U}^\dagger] \quad (2)$$

で与えられる．ここで tr_B は熱浴に関する部分トレースを表す． $\hat{\rho}$ を $\mathcal{E}(\hat{\rho})$ に写す写像 \mathcal{E} は一般には非ユニタリであり, CPTP 写像 (completely-positive and trace-preserving map) である⁹⁾ . 逆に任意の CPTP 写像は (2) の形に書ける^{*6)} .

CPTP 写像 (2) のうち, 熱力学と関係するものを考えよう．初期時刻におけるシステムと熱浴のハミルトニアンをそれぞれ \hat{H}_S, \hat{H}_B とする (一般にはこれに加えて相互作用ハミルトニアンがある) . また, $\beta \geq 0$ を固定する^{*7)} . 以下の3つの

*3) 本稿では, 古典確率分布は縦ベクトルとする．^T は転置を表す．

*4) tr はトレースを表す, すなわち $\text{tr}[\hat{\rho}] := \sum_{i=1}^d \langle\varphi_i|\hat{\rho}|\varphi_i\rangle$.

*5) この時点では $\hat{\rho}_B$ が Gibbs 分布であるとは仮定しない．

*6) 本稿では, 入力 $\hat{\rho}$ と出力 $\mathcal{E}(\hat{\rho})$ のヒルベルト空間の次元が等しい場合に議論を限定する．

*7) 物理的にはこれは逆温度と解釈される．すなわち, 温度 T と Boltzmann 定数 k_B に対して $\beta := (k_B T)^{-1}$.

概念を定義しよう．

Gibbs 保存写像 システムの Gibbs 分布を $\hat{\rho}^G := e^{\beta(F_S - \hat{H}_S)}$ とする (F_S はシステムの自由エネルギー) . これが \mathcal{E} で変化しない, すなわち $\mathcal{E}(\hat{\rho}^G) = \hat{\rho}^G$ のとき, \mathcal{E} を Gibbs 保存写像 (Gibbs preserving map) と呼ぶ．なおここで, \hat{H}_S は時間依存しないとしている．

準熱的操作 熱浴の初期状態を Gibbs 分布 $\hat{\rho}_B^G := e^{\beta(F_B - \hat{H}_B)}$ とする．このとき \mathcal{E} を準熱的操作 (quasi-thermal operation) と呼ぶ．ここで \hat{H}_S は時間依存しても良いとする．一方で \hat{H}_B は時間依存しないとする．

熱的操作 準熱的操作において, \hat{H}_S も時間依存せず, さらにユニタリ変換が $[\hat{U}, \hat{H}_S + \hat{H}_B] = 0$ を満たしている^{*8)} とする．これは, システムと熱浴のエネルギーの合計が (相互作用エネルギーぬきで) 保存することを意味している．このとき \mathcal{E} を熱的操作 (thermal operation) と呼ぶ．

準熱的操作においては \hat{H}_S は時間依存するので, 外場によってシステムを平衡から離れた状態に駆動するような状況も考えられる．量子系におけるゆらぎの定理の導出で標準的な設定は, 準熱的操作である^{*9)} . 一方, Gibbs 保存写像や熱的操作においては \hat{H}_S は時間依存しないので, 外場による駆動を考えることは (ナイーブには) できず, 基本的には平衡への緩和だけが議論できる^{*10)} .

なお, 熱的操作は Gibbs 保存写像になることが定義から分かる．しかし逆は成り立たない (すなわち Gibbs 保存写像の集合の方が, 熱的操作の集合より真に大きい) ^{*11)*12)} .

*8) この仮定は共鳴条件の Jaynes-Cummings 模型などでは成り立つが, 量子多体系では多くの場合に成立しない強い仮定である．物理的には, 回転波近似のような状況に対応していると考えられる⁶⁾ .

*9) ただし「準熱的操作」という用語は, 概念を整理するためにつけた本稿独自の呼び名である．

*10) ただし quantum clock という概念を用いて, 時間依存する外場もシステムの一部に含めてしまい, 外場駆動を実質的に再現する方法も議論されている⁷⁾ .

*11) さらに強く「ある Gibbs 保存写像 \mathcal{E}_1 があって $\hat{\rho}' = \mathcal{E}_1(\hat{\rho})$ となるが, $\hat{\rho}' = \mathcal{E}_2(\hat{\rho})$ となる熱的操作 \mathcal{E}_2 は存在しない」という状態の組 $(\hat{\rho}, \hat{\rho}')$ がある⁸⁾ .

*12) もし \hat{H}_B と \hat{U} を任意に選べるなら, 準熱的操作の形で任

3. 量子相対エントロピー

量子状態 $\hat{\rho}$ の情報エントロピーとして最も基本的な概念は、von Neumann エントロピーである：

$$S(\hat{\rho}) := -\text{tr}[\hat{\rho} \ln \hat{\rho}]. \quad (3)$$

$\hat{\rho}$ の対角分布を p とすると、 p の Shannon エントロピー $S(p) := -\sum_{i=1}^d p_i \ln p_i$ は $S(\hat{\rho})$ と一致する。これは、von Neumann エントロピーが（古典的な）乱雑さの尺度であることを意味している。

von Neumann エントロピーを一般化したものが、量子相対エントロピー（quantum relative entropy）である⁹⁾。2つの量子状態 $\hat{\rho}$ と $\hat{\sigma}$ の間の量子相対エントロピーは、

$$S(\hat{\rho}||\hat{\sigma}) := \text{tr}[\hat{\rho} \ln \hat{\rho} - \hat{\rho} \ln \hat{\sigma}] \quad (4)$$

で定義される。 $\hat{\rho}$ と $\hat{\sigma}$ が同時対角化可能で $\hat{\rho} = \sum_{i=1}^d p_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ 、 $\hat{\sigma} = \sum_{i=1}^d q_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ と書けるとき、 $S(\hat{\rho}||\hat{\sigma})$ は、確率分布 p と q の間の古典相対エントロピー（あるいは Kullback-Leibler divergence） $S(p||q) := \sum_{i=1}^d p_i \ln(p_i/q_i)$ と一致する。

量子相対エントロピーの基本的な性質として、その正値性 $S(\hat{\rho}||\hat{\sigma}) \geq 0$ が挙げられる。等号は $\hat{\rho} = \hat{\sigma}$ の場合に限る。これは量子相対エントロピーが2つの量子状態の間の（非対称な）“距離”という意味をもつことを示唆している。

量子相対エントロピーのより非自明な性質として、単調性（monotonicity）が挙げられる。状態 $\hat{\rho}$ 、 $\hat{\sigma}$ と任意の CPTP 写像 \mathcal{E} に対して、

$$S(\hat{\rho}||\hat{\sigma}) \geq S(\mathcal{E}(\hat{\rho})||\mathcal{E}(\hat{\sigma})) \quad (5)$$

が成り立つ^{*13)}。これは直感的には、粗視化をすると2つの量子状態の距離は減少することを意味している。なお(5)の等号は、 \mathcal{E} がシステムだけのユニタリ変換 $\mathcal{E}(\rho) := \hat{U}_S \rho \hat{U}_S^\dagger$ ならば成り立つ。

意の CPTP 写像を表すことができる。この意味では、準熱的操作の集合の方が、Gibbs 保存写像の集合より真に大きい。しかし通常は、まず \hat{H}_B を決めてから準熱的操作を議論する。

*13) 単調性の証明は、量子系の場合はやや面倒である。Lieb と Ruskai¹⁰⁾ によって（von Neumann エントロピーの strong subadditivity の形で）最初の証明が与えられ、より見通しの良い証明が Petz¹¹⁾ によって与えられている。

4. 第二法則の導出

さて、量子相対エントロピーの性質に基づいて、熱力学第二法則を議論しよう^{*14)}。以下に示すように、ちょうど正値性と単調性に対応して、二通りの第二法則の導出がある。これらはいずれもゆらぎの定理と密接に関係している。

まず、 \mathcal{E} が準熱的操作の場合を考えよう。これは正値性に関係している。システムの von Neumann エントロピーの変化を $\Delta S := S(\mathcal{E}(\hat{\rho})) - S(\hat{\rho})$ とする。また、熱浴がシステムに放出した熱量を $Q := \text{tr}[\hat{\rho} \otimes \hat{\rho}_B^G (\hat{H}_B - \hat{U}^\dagger \hat{H}_B \hat{U})]$ と定義する。このとき

$$\Delta S - \beta Q = S(\hat{U} \hat{\rho} \otimes \hat{\rho}_B^G \hat{U}^\dagger || \mathcal{E}(\hat{\rho}) \otimes \hat{\rho}_B^G) \quad (6)$$

が成り立つことが容易に分かる。なお右辺は、真の終状態 $\hat{U} \hat{\rho} \otimes \hat{\rho}_B^G \hat{U}^\dagger$ と、熱浴を Gibbs 分布に取り替えた状態 $\mathcal{E}(\hat{\rho}) \otimes \hat{\rho}_B^G$ との距離を表す。量子相対エントロピーの正値性から、ただちに

$$\Delta S - \beta Q \geq 0 \quad (7)$$

を得る。これは熱力学第二法則の表現の一つ（Clausius の不等式）に他ならない。ただし、伝統的な平衡熱力学とは違い、システムの初期状態や終状態が熱平衡状態である必要はなく、エントロピーとしては Boltzmann エントロピーではなく von Neumann エントロピーを使っていることに注意が必要である。

(7) は量子系におけるゆらぎの定理から得られるのと同じ不等式であり、証明の方法まで含めて対応がある¹²⁾。また(7)は、「Maxwell のデーモン」による測定やフィードバックがある場合にも拡張されており、QC 相互情報量（Groenewold 情報量）が重要な役割を果たす¹³⁾。

次に、 \mathcal{E} が Gibbs 保存写像の場合を考えよう。これは単調性に関係している。システムが熱浴から吸収した熱量を $\tilde{Q} := \text{tr}[(\mathcal{E}(\hat{\rho}) - \hat{\rho}) \hat{H}_S]$ と定義する。 $\mathcal{E}(\hat{\rho}^G) = \hat{\rho}^G$ に注意すると、量子相対エン

*14) 本節の内容は文献¹²⁾で詳細に議論されている。

トロピーの単調性より,

$$S(\hat{\rho} \parallel \hat{\rho}^G) \geq S(\mathcal{E}(\hat{\rho}) \parallel \hat{\rho}^G) \quad (8)$$

が成り立つ. これを書き換えると

$$\Delta S - \beta \tilde{Q} \geq 0 \quad (9)$$

となることが分かる. これも Clausius の不等式と同じ形の第二法則である. なお (9) は, ゆらぎの定理の一般化である Hatano-Sasa 等式と密接に関係している^[14, 15].

一般には (相互作用ハミルトニアンの影響により) $Q \neq \tilde{Q}$ なので, (7) と (9) は異なる不等式である. しかし熱的操作の場合は $Q = \tilde{Q}$ が成り立つため, (7) と (9) は一致する.

5. Majorization

次に少し視点を変えて, リソース理論の観点から第二法則を議論しよう^[15]. とくに majorization という概念をやや詳しく解説する^[16].

まず本節では簡単のために, システムのエネルギーが全て縮退している場合を考える. このとき, ハミルトニアンは $\hat{H}_S \propto \hat{I}$ なので (ここで \hat{I} は単位演算子), Gibbs 分布は $\hat{\rho}^G = \hat{I}/d$ である. したがって Gibbs 保存写像は \hat{I} を変化させない, すなわち $\mathcal{E}(\hat{I}) = \hat{I}$. このような \mathcal{E} をユニタル (unital) と呼ぶ^[17].

$\hat{\rho}$ と $\hat{\rho}'$ をそれぞれ正規直交基底で対角化して

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^d p_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|, \quad \hat{\rho}' = \sum_{i=1}^d p'_i |\varphi'_i\rangle \langle \varphi'_i| \quad (10)$$

とする (両者の基底は同じでなくても良い). このとき, \mathcal{E} がユニタル写像である必要十分条件は, ある

*15) 本節と次節の議論は, 4 節の Gibbs 保存写像の議論に深く関係しているが, 前者が後者を包含しているわけではない.

*16) Majorization の解説は, 文献^[16] の 2 章が簡潔で良い. 文献^[17] にも包括的な解説がある. 文献^[9] の 12 章には, 量子系の場合も含めた簡単な解説がある. また量子系の majorization の包括的なレビューとして文献^[5] があり, 本稿では扱えなかった漸近論も解説されている. ただし文献^[5] の議論の一部には, 厳密でない点があるように思われる.

*17) ユニタリ (unitary) とは全く異なる概念なので注意. なお, ユニタリならばユニタルである.

二重確率遷移行列 (doubly stochastic matrix) があって $p' = Tp$ (成分で書くと $p'_i = \sum_{j=1}^d T_{ij} p_j$) となることである. ここで二重確率遷移行列とは, $\sum_{i=1}^d T_{ij} = 1$ に加えて $\sum_{j=1}^d T_{ij} = 1$ も満たす確率遷移行列のことである. 二重確率遷移行列は, 一様分布 $u := (1/d, 1/d, \dots, 1/d)^T$ を変化させない, すなわち $u = Tu$. これはユニタル写像が単位演算子を変化させないことに対応している.

ユニタル写像 \mathcal{E} によるエントロピー変化を考えよう. $\hat{\rho}' := \mathcal{E}(\hat{\rho})$ とおく. $S(\hat{\rho} \parallel \hat{I}/d) = -S(\hat{\rho}) + \ln d$ に注意すると, 量子相対エントロピーの単調性より,

$$S(\hat{\rho}) \leq S(\hat{\rho}') \quad (11)$$

が成り立つ. すなわちユニタル写像で von Neumann エントロピーは増加する (か変化しない). 言い換えると, ユニタル写像は状態をより乱雑にする. (11) は (9) の $\beta = 0$ の場合と見ることもできる. なお, (11) の古典の場合として, 二重確率遷移行列 T と古典確率分布 $p' = Tp$ に対して, $S(p) \leq S(p')$ が成り立つ.

さて, $\hat{\rho}$ がユニタル写像で $\hat{\rho}'$ に移るならば, (11) が成り立つのであった. 逆に $\hat{\rho}$ と $\hat{\rho}'$ が (11) を満たすとき, 両者は必ずユニタル写像で結びつくであろうか? 答えは NO である. von Neumann エントロピーだけでは乱雑さの尺度として完全ではないのだ. より完全な尺度であり, ユニタル写像で結びつく必要十分条件を与えるのが, 以下に述べる majorization である.

まず準備として古典の場合を考えよう. 古典確率分布 p と p' を考える. $p = (p_1, p_2, \dots, p_d)^T$ の成分を大きいものから順に並べ替えて, $p_1^\downarrow \geq p_2^\downarrow \geq \dots \geq p_d^\downarrow$ とする. 同様に p'_i^\downarrow を定義する. このとき, 「 p が p' を majorize している」ことを

$$\sum_{i=1}^k p_i^\downarrow \leq \sum_{i=1}^k p'_i^\downarrow, \quad 1 \leq \forall k \leq d \quad (12)$$

によって定義し, $p' \prec p$ と書く. これは p' が p より乱雑であることを表している.

Majorization の条件 (12) は Lorenz 曲線によって視覚化することができる (図 1). 横軸に

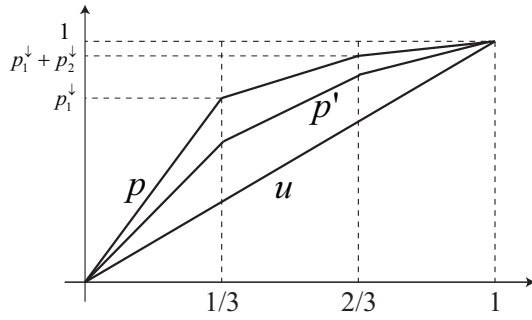


図 1 Lorenz 曲線の例 ($d = 3$ の場合) . $p' \prec p$ なる状況を表している . 一様分布 u は対角線であり , 他のすべての分布から majorize されている .

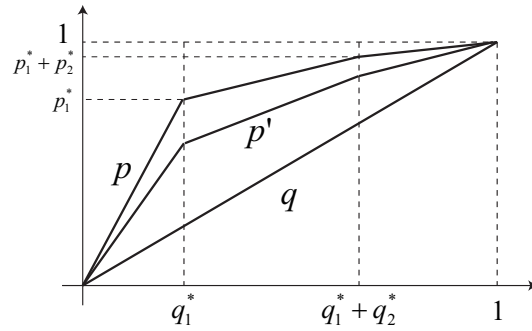


図 2 Thermo-majorization の Lorenz 曲線の例 ($d = 3$ の場合) . $p' \prec_q p$ なる状況を表している . Gibbs 分布 q は対角線であり , 他のすべての分布から thermo-majorize されている . この図では簡単のため (p, q) と (p', q) の並べ替えの順番が同じ場合を図示しているが , 一般には異なる .

(等間隔で) $1/d, 2/d, \dots, 1$ を , 縦軸に $p_1^\downarrow, p_1^\downarrow + p_2^\downarrow, \dots, p_1^\downarrow + \dots + p_d^\downarrow (= 1)$ をプロットする . これらを結んで得られる上に凸な折れ線が p の Lorenz 曲線である . $p' \prec p$ は , p の Lorenz 曲線が p' の Lorenz 曲線より上方にあることと等価である .

Majorization の意味を明確に特徴付けるのは , 以下の定理である .

定理 1. 以下の 2 つは同値である .

- $p' \prec p$.
- ある二重確率遷移行列 T があって , $p' = Tp$.

二重確率遷移行列の定常分布は一様分布 u だったので , p や p' の u への “近さ” を特徴付けるのが majorization だと言える . 実際 , すべての p に対して $u \prec p$ が成り立つ . ただし \prec は全順序ではない . すなわち , $p' \prec p$ でも $p \prec p'$ でもない場合がある (p と p' の Lorenz 曲線が途中で交差する場合がこれにあたる) .

なお , $S(p) \leq S(p')$ が $p' = Tp$ となる十分条件ではないことを示す例として , $p = (2/3, 1/6, 1/6)^T$, $p' = (1/2, 1/2, 0)^T$ が挙げられる⁵⁾ . このとき , 容易に確かめられるように $S(p) < S(p')$ であるが $p' \prec p$ は成り立たない .

量子系の場合に戻ろう . 2 つの状態 $\hat{\rho}$ と $\hat{\rho}'$ が (10) のように対角化されているとする (両者の基底は同じでなくても良い) . このとき , 量子状態

の間の majorization $\hat{\rho}' \prec \hat{\rho}$ を , その対角分布の間の majorization $p' \prec p$ で定義する . この定義に基づいて , 量子系の場合も以下が成り立つ .

定理 2. 以下の 2 つは同値である .

- $\hat{\rho}' \prec \hat{\rho}$.
- あるユニタル写像 \mathcal{E} があって , $\hat{\rho}' = \mathcal{E}(\hat{\rho})$.

この定理を熱力学の観点から解釈すると , $\hat{H}_S \propto \hat{I}$ の場合の Gibbs 分布 (すなわち一様分布 $\hat{\rho}^G = \hat{I}/d$) に量子状態がどれだけ近いかを特徴付けるのが , majorization であると言える .

6. Thermo-majorization

前節の議論は $\hat{H}_S \propto \hat{I}$ の場合 , すなわち熱力学としては “自明” な場合だった . これを一般のハミルトニアンに拡張することは可能だろうか . 少なくとも古典系の場合については , thermo-majorization という概念によって拡張できることが知られている^{*18)} .

ここでは , 以下のような一般化された Lorenz 曲線によって thermo-majorization を定義しよ

*18) さらに一般に d-majorization という概念がある¹⁸⁾ . 文献¹⁹⁾ の付録が分かりやすいレビューになっている .

う。古典確率分布 $p = (p_1, \dots, p_d)^T$ と $q = (q_1, \dots, q_d)^T$ を考える。これらの成分を、 $p_1^*/q_1^* \geq p_2^*/q_2^* \geq \dots \geq p_d^*/q_d^*$ となるように並べ替える（並べ替え方は p と q で共通とする）。そのうえで、横軸に $q_1^*, q_1^* + q_2^*, \dots, q_1^* + \dots + q_d^* (= 1)$ をプロットし、縦軸に $p_1^*, p_1^* + p_2^*, \dots, p_1^* + \dots + p_d^* (= 1)$ をプロットする。これらの点を結んで描けるのが (p, q) の Lorenz 曲線である（図 2）。この場合も Lorenz 曲線は上に凸である。「 p が p' を (q について) thermo-majorize している」とは、 (p, q) の Lorenz 曲線が (p', q) の Lorenz 曲線よりも上方にあることと定義する。これを $p' \prec_q p$ と書くことにする。この定義の妥当性は、以下の定理によって確かめられる。

定理 3. 以下の 2 つは同値である。

- $p' \prec_q p$.
- ある確率遷移行列 T があって、 $q = Tq$ かつ $p' = Tp$ が成り立つ。

q があるハミルトニアンについての（古典的な）Gibbs 分布の場合を考えよう。このとき、 $q = Tq$ は T が（古典的な）Gibbs 保存写像であることを意味している。したがって定理 3 の主張は「ある分布 p を p' に遷移させる（ q を定常分布に持つような）Gibbs 保存写像が存在することの必要十分条件は、 p が p' を (q について) thermo-majorize していることである」と言える。すなわち、Gibbs 分布 q への“近さ”を特徴付けるのが thermo-majorization である。実際、すべての p について $q \prec_q p$ が成り立つ。

定理 1 は定理 3 の特別な場合である^{*19)}。実際、一様分布 u についての thermo-majorization は普通の majorization に他ならず、また $u = Tu$ は

*19) 定理 1 は初等的な線形代数で証明できる¹⁶⁾。しかし定理 3 の数学的に厳密な証明は難しい。比較的直観的な証明は、定理 1 を連続変数の場合に拡張して、そこから変数変換を行うという方法である¹⁸⁾。ただし定理 1 を連続変数 (L^1 空間) に拡張するには、Hahn-Banach の分離定理など関数解析が必要である²⁰⁾。なお、熱的操作について物理的な洞察を与える議論が文献²¹⁾ でなされている。

T が二重確率遷移行列であることを意味する。

一方で、定理 3 の量子版（つまり定理 2 の thermo-majorization 版）を定式化するのは簡単ではない。つまり、量子状態 $\hat{\rho}, \hat{\rho}'$ と Gibbs 分布 $\hat{\rho}^G$ に対して、ある \mathcal{E} があって $\hat{\rho}^G = \mathcal{E}(\hat{\rho}^G)$ かつ $\hat{\rho}' = \mathcal{E}(\hat{\rho})$ となる十分条件は、thermo-majorization に類似の形では知られていない。定理 3 を量子系に拡張するのが難しい理由のひとつは、普通の majorization の場合と違って、 $\hat{\rho}^G$ が $\hat{\rho}$ や $\hat{\rho}'$ と必ずしも可換ではない（同時ブロック対角化可能ではない）ことだ。いくつかの提案はあるが^{*20)}、まだ十分な理解には至っていないと言えるだろう。

なお、Gibbs 保存写像の設定では \hat{H}_S は時間依存しないので、外部からシステムに行く仕事を扱うことは出来ない。しかし、力学的な「おもり」をシステムの一部に含めることで、仕事を扱えるようになる。そうすることで、Gibbs 分布から他の分布 p を作るのに必要な最小仕事や、分布 p から取り出せる最大仕事を、thermo-majorization によって求めることが出来る²¹⁾。

7. おわりに

本稿では熱力学第二法則に関する数理的な構造を、ごく基本的な部分に限って解説した。最後に歴史や最近の発展に関するコメントをしておきたい。

まず、4 節で議論した相対エントロピーの正値性に基づく第二法則 (7) は、1990 年代後半から、ゆらぎの定理の文脈で議論されてきた^{*21)}。相対エントロピーの単調性に基づく第二法則 (9) はより古く、誰が最初に明示的に示したのかは定かでないが、本質的には 1970 年代頃から知られていたようである。ただし私見では、ゆらぎの定理の周辺が最も豊かで非自明なのは、古典確率過程の場合である^{*22)}。本稿の 4 節で議論したのは、そのうち「量子系でも」成り立つごく一般的な部分、

*20) たとえば文献²²⁾。

*21) 正値性（と等価な議論）に基づいて (7) を最初に明示的に（古典系の場合について）示したのは、Jarzynski²³⁾ であると思われる。量子系の場合はレビュー¹²⁾ を参照。

*22) 古典確率過程の場合は、生体系への応用も興味深い。

やや極論すれば“絵のない額縁”のような部分である。しかし額縁自体がそれなりに美しいことは注目に値するだろう。

また、5節と6節の議論のうち、非自明なのは古典確率分布についての定理1と3である。これらは1970年代には確立していたが^{*18)}、熱力学の観点から再解釈されて注目を集めるようになったのはここ数年のことである^{*23)}。また「触媒 (catalyst)」のある場合への thermo-majorization の拡張などもなされ¹⁹⁾、熱力学リソース理論という活発な研究分野を形成している。

なお、準熱的操作や熱的操作においては、熱浴の初期状態が Gibbs 分布であることが本質的であった。一方で Gibbs 分布のような統計力学の概念を経由せずに、量子力学だけから熱力学がどのように創発するかは、主に固有状態熱化仮説 (Eigenstate Thermalization Hypothesis, ETH) の文脈で盛んに研究されている²⁴⁾。たとえば熱浴が十分大きければ、その初期状態が単一のエネルギー固有状態の場合でも、短い時間スケールの間ならゆらぎの定理や第二法則が成立することが示されている²⁵⁾。

このように、量子系の熱力学は複数の観点から議論され、ここ10年ほどで理解が大きく深まってきた。また量子重力など高エネルギー物理とのクロスオーバーもあり²⁶⁾、今後のさらなる展開が期待される。

本稿の執筆にあたって、松本啓史氏、金子和哉氏、田崎晴明氏、田島裕康氏から貴重なコメントをいただいた。ここに御礼申し上げる(本稿は「数理科学」2018年6月号(Vol.56-6, No.660) pp.15-22 (サイエンス社)に掲載されたものです。)

参考文献

- 1) M. Esposito, U. Harbola, and S. Mukamel, Rev. Mod. Phys. **81**, 1665 (2009).
- 2) U. Seifert, Rep. Prog. Phys. **75**, 126001 (2012).
- 3) J. M. R. Parrondo, J. M. Horowitz, and T.

*23) なお majorization は、1990年代の後半からエンタングルメントの理論などに応用されてきた⁹⁾。

- Sagawa, Nat. Phys. **11**, 131 (2015).
- 4) T. Sagawa, arXiv:1712.06858 (2017). これは G. Snider *et al.* (eds.), "Energy Limits in Computation: A Review of Landauer's Principle, Theory and Experiments" (Springer) の章として出版予定である。
- 5) G. Gour, M. P. Muller, V. Narasimhachar, R. W. Spekkens, N. Yunger Halpern, Phys. Rep. **583**, 1-58 (2015).
- 6) 沙川貴大, 上田正仁, 『量子測定と量子制御』(サイエンス社, 臨時別冊・数理科学, 2016)。
- 7) A. S. L. Malabarba, A. J. Short, P. Kammerlander, New J. Phys. **17**, 045027 (2015).
- 8) P. Faist, J. Oppenheim, R. Renner, New J. Phys. **17**, 043003 (2015).
- 9) M. A. Nielsen and I. L. Chuang, "Quantum Computation and Quantum Information" (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000).
- 10) E. H. Lieb and M. B. Ruskai, Phys. Rev. Lett. **30**, 434 (1973).
- 11) D. Petz, Rev. Math. Phys. **15**, 79 (2003).
- 12) T. Sagawa, arXiv:1202.0983v3. このレビューは "Lectures on Quantum Computing, Thermodynamics and Statistical Physics" (Kinki University Series on Quantum Computing, World Scientific, 2012) の章として出版されているが, arXiv にある ver.3 が最新版で, 間違い等が修正されている。
- 13) T. Sagawa, Prog. Theor. Phys. **127**, 1 (2012).
- 14) T. Hatano and S.-I. Sasa, Phys. Rev. Lett. **86**, 3463 (2001).
- 15) J. M. Horowitz and T. Sagawa, J. Stat. Phys. **156**, 55-65 (2014).
- 16) R. Bhatia, "Matrix Analysis" (Springer, 1991).
- 17) A. W. Marshall, I. Olkin, and B. C. Arnold, "Inequalities: Theory of Majorization and Its Applications" (Springer, 2011).
- 18) E. Ruch, R. Schraner, and T. H. Seligman, J. Chem. Phys. **69** 386-392 (1978).
- 19) F. G. S. L. Brandão, M. Horodecki, N. H. Y. Ng, J. Oppenheim, and S. Wehner, Proc. Natl. Acad. Sci. **112**, 3275 (2015).
- 20) J. V. Ryff, Transactions of the American Mathematical Society, **117**, 92-100 (1965).
- 21) M. Horodecki and J. Oppenheim, Nat. Commun. **4**, 2059 (2013).
- 22) G. Gour, D. Jennings, F. Buscemi, R. Duan, and I. Marvian, arXiv:1708.04302 (2017).
- 23) C. Jarzynski, J. Stat. Phys. **98**, 77 (2000).
- 24) L. D'Alessio, Y. Kafri, A. Polkovnikov, and M. Rigol, Adv. Phys. **65**, 239 (2016).
- 25) E. Iyoda, K. Kaneko, and T. Sagawa, Phys. Rev. Lett. **119**, 100601 (2017).
- 26) J. Maldacena, S. H. Shenker, and D. Stanford, JHEP **08**, 106 (2016).

(さがわ・たかひろ, 東京大学大学院工学系研究科)