

審査の結果の要旨

氏 名 ヴーバンタン

現実の物理的なシステムは特定の機能を果たすために何らかの形でエネルギーを消費する必要があり、そのエネルギー交換を記述するのは熱力学である。元々、巨視的熱機関における熱と仕事の振る舞いを記述するために登場した現象学的な理論であるが、近年、ゆらぎが大きな微小系への拡張が進んでいる。その結果、微小非平衡系における様々な普遍的な関係が発見され、物理のみならず生物など多くの分野に豊かな応用をもたらしている。本論文は「Thermodynamic relations on irreversibility in nonequilibrium systems (非平衡系の不可逆性に関する熱力学的関係)」と題し、英文8章から構成され、非平衡熱力学の基礎理論とその応用に貢献するものである。

第1章「Introduction (序論)」では、まず、巨視系間でのエネルギー交換を記述する熱力学の理論について紹介する。次に、従来の熱力学が適用できない微小非平衡系に熱力学を拡張する理論が発展し、それによってゆらぎ定理や熱力学的不確定性関係 (TUR) などの様々な関係が発見されたという歴史的背景についてまとめている。その上、不可逆性を定量化するエントロピー生成とカレントのゆらぎを関連させることと、第二法則より強いエントロピー生成の下限を与えること、というTURの二つの意味合いから出発し、本論文の貢献をまとめている。

第2章「Stochastic thermodynamics (確率熱力学)」では、微小非平衡系のモデルとしてよく用いられる、連続状態のランジュバン系と離散状態のマルコフジャンプ過程の確率的熱力学を紹介する。さらに、エントロピー生成の対称性を表している、かつ第二法則を含むゆらぎ定理とその導出についても説明する。

第3章「Quantum thermodynamics (量子熱力学)」では、量子熱力学とその関連概念をまとめている。一般的な閉じた量子系と開いた量子系において熱と仕事の概念がどのように確立されるか、そして熱力学の第一法則と第二法則について議論する。特に熱浴と弱く結合している系での熱、仕事、エントロピー生成の定義を説明する。

第4章「Thermodynamic uncertainty relations in Langevin systems (ランジュバン系における熱力学的不確定性関係)」では、元々のTURが適用できないランジュバン系を考慮し、推定理論でよく用いられるクラメール・ラオの不等式を適用して新しいTURを導出する。まず、慣性効果が無視できない定常状態のアンダーダンピング系に注目し、エントロピー生成とダイナミカルアクティビティの両方が時間積分のカレントのゆらぎ

を相補的に抑えることを示す。次に、任意の時間依存プロトコルで駆動されるランジュバン系において、あるスケーリング条件を満たすオブザーバブルのゆらぎはエントロピー生成だけではなく、運動項によっても抑えられることが示される。

第5章「Thermodynamic uncertainty relations in non-Markovian systems (非マルコフ系における熱力学的不確定性関係)」では、非マルコフ系に注目し、時間遅延、計測・フィードバック制御、セミマルコフ過程を含む系のTURを導出する。まず、時間遅延付きのランジュバン系を考察し、オブザーバブルのゆらぎが順方向の軌跡の分布と反転の軌跡の分布の間の相対エントロピーによって抑えられることを証明する。次に、繰り返しの測定とフィードバック制御によって操作される古典的なシステムにおけるオブザーバブルの不確かさを調べ、エントロピー生成と情報量が一般的なカレントのゆらぎを下から制限することを証明する。最後に、TURをセミマルコフ過程に一般化する。マルコフ過程の場合とは異なり、カレントのゆらぎは、エントロピー生成だけでなく、メモリ項によっても制限されることを示す。

第6章「Entropy production estimation with optimal current (最適なカレントを用いたエントロピー生成推定)」では、TURの熱力学的推論への応用について論じる。具体的に、定常状態システムの単一軌跡からエントロピー生成を推定する決定論的手法を提案する。ランジュバン系では常に正確な推定値が得られるのに対して、マルコフジャンプ過程の場合は、エントロピー生成の最も良い下限が返される。

第7章「Bounds on irreversibility in Markovian systems (マルコフ系の不可逆性のバウンド)」では、詳細釣り合い条件を満たすマルコフ系の不可逆性を幾何学的に特徴づけ、エントロピー生成の下限を強化する。具体的に、量子系と古典系のエントロピー生成は、初期状態と最終状態間のWasserstein距離によって下から制限されることを、情報幾何学を用いて証明する。

第8章「Conclusion (結論)」では、本論文における主たる成果をまとめるとともに、今後の課題と展望について述べた。

以上、これを要するに、本論文は、今後ますます重要となる微小非平衡系において、エントロピー生成とカレントのゆらぎとの関係とエントロピー生成の下限の二つの点に着目して不可逆性に関する様々な関係を発見し、さらに熱力学的推論への応用を提案するものであり、電子情報学上貢献するところが少なくない。

よって本論文は博士(情報理工学)の学位請求論文として合格と認められる。