論文の内容の要旨

Mesoscopic Thermodynamics based on Quantum Information Theory
（量子情報理論に基づくメゾスコピック系の熱力学）

氏名:　田島　裕康

微小熱機関の研究状況は，1700 年代後半、熱力学出現前夜の巨視的な熱機関の研究状況に酷似している．実験室系でナノマシンが次々に作成され，自然界に存在する微小熱機関である生体分子の機能の実験的な解明も日進月歩の速度で行われている。

こうした微小系の熱機関には，巨視的な現象論である熱力学はもはや適用できない。そこで，熱機関を力学的な粒子集団としてモデル化し解析する統計力学的アプローチが盛んに研究されてきた。本論文の第一章および第二章で概観する様に、この統計力学的アプローチは、以下の三つの点で華々しい成功を収めている：すなわち、1. 熱力学的極限での熱力学的不等式を再現、2. 粒子数が少ない場合の熱力学不等式の変化の解明、3. 観測やフィードバックを含む熱力学的過程において成立する熱力学的不等式の導出、の三つである。

一方で、ミクロとマクロの中間、すなわち有限であるが多数の粒子によって構成される系における熱力学的性質については、未だ定量的な理解が与えられていない。加えて、量子系からの仕事の取り出しに関する定式化には現在いくつかの異なる方式が存在し、それらの関連性は十分に議論されてこなかった。本論文は、量子情報理論を用いてこれらの 2 問題に取り組む。より具体的には、1. 量子測定理論に基づく仕事の取り出しの再考、及び　2. 有限サイズ熱機関の最適効率の定量的近似理論の構築　の二つを行う。

まず本論文の三章において、量子系からの仕事の取り出しを、量子測定の理論に基づいて改めて議論する。現在与えられている様々な仕事の取り出しは、おおまかに次の二つの定式化に分類される；

Semi-classical scenario: 内部系 I（通常、熱機関本体と熱浴を考える）からの仕事の取り出しとして、古典操作者が内部系のハミルトニアンのコントロールパラメータを変化させつつユニタリ時間発展 $U_I := T_{\rightarrow}\exp(\int -iH_I(\lambda(t))dt)$ を行う状況を考える。内部系が失ったエネルギーは、コントロールパラメータにかかる反動を介して外部操作者に伝わると考え、内部系の操作前後でのエネルギー期待値の差を取り出した仕事量として定義する。

Fully quantum scenario: このシナリオでは、内部系 I に加えて外部系 E_X も量子系としてあらわに考える。全体系 IE_X に、エネルギーを保存するような任意のユニタリ変換 U_{IE_X} を行い、外部系が得たエネルギーを内部系から取り出した仕事として定義する。

一見すると、これら二つのシナリオの違いは単に境界条件をどこに取るかの問題でしかない様に見える。このため、Fully quantum scenario は適切な近似の下で Semi-classical scenario に落ち着くと予測されていたが、具体的な証明も反証も存在しなかった。第三章の前半部において、我々はこの問題を掘り下げ、これら 2 つのシナリオの間に深刻な相克が存在することを示す。外部系（仕事の貯蔵系）を測定する事によって、取り出したエネルギーを精度よく知る事ができるという系を考えようとすると、内部系の時間発展をユニタリ変換で精

度よく近似できなくなってしまう。厳密には以下の一般的な定理の形で与えられる。なお、以下の定理で用いる $b(\rho,\sigma)$ は Bures distance と呼ばれる状態間距離の一種であり、フィデリティー $F(\rho,\sigma):=\mathrm{Tr}[\sqrt{\sigma}\rho\sqrt{\sigma}]$ を用いて $b(\rho,\sigma):=\sqrt{1-F(\rho,\sigma)}$ として定義される。

Theorem 1. 全体系 IE_X のユニタリ変換 U_{IE_X} と外部系の初期状態 ρ_{E_X} に対して、内部系 I の時間発展 Λ_I は以下の様に記述される*:*

$$\Lambda_I(\rho_I)=\mathrm{Tr}_{E_X}[U_{IE_X}\rho_I\otimes\rho_{E_X}U^{\dagger}_{IE_X}]. \tag{1}$$

この時間発展 Λ_I がある内部系 I 上の何らかのユニタリ変換 U_I と、ある任意の正実数 ϵ によって

$$b(\Lambda_I(\rho),U_I\rho U_I^{\dagger})\leq\epsilon \ \text{ for any } \ \rho \tag{2}$$

の様に近似できる時、内部系 I の任意の二状態 ρ と ρ' について以下の不等式が成立する*:*

$$b(\sigma^{\rho}_{E_X},\sigma^{\rho'}_{E_X})\leq 4\sqrt{\epsilon}. \tag{3}$$

ここで $\sigma^{\rho}_{E_X}$ は外部系の終状態であり、$\sigma^{\rho}_{E_X}:=\mathrm{Tr}_I[U_{IE_X}\rho\otimes\rho_{E_X}U^{\dagger}_{IE_X}]$ で定義される*.*

Bures 距離 $b(\rho,\sigma)$ は ρ と σ に同一の任意の POVM 測定 $\{\sqrt{E_m}\}$ を行ったときの確率分布 $\{p_m\}$、$\{q_m\}$ の間の古典 Helinger 距離 $b_{\mathrm{c}}(\{p_m\},\{q_m\})$ の上限になっている。つまり、Brues 距離は、二状態のあらゆる POVM 測定による識別限界を表している。すなわち定理 1 は、内部系の時間発展 Λ_I がユニタリ U_I で精度よく近似できるとき、外部系 E_X の終状態 $\sigma^{\rho}_{E_X}$ からは内部系の初期状態 ρ に関する情報を読み取れないことを意味している。従って、$\Lambda_I\approx U_I$ なるときはいつでも、内部系 I 側の初期状態の違いによって生じる外部系 E_X の取得エネルギーの差を、外部系 E_X だけを見て判別することはできない。内部系 I の初期状態に依存して、取り出されるエネルギーは（その正負も含めて）最大から最小まで変化しうるので、結局外部系 E_X の取得エネルギーは外部系 E_X に関する測定からは全く分からないということになる。定理 1 の上で述べた定性的な議論は、この対偶になっている。

仕事量を外部系の測定から精度よく知る為には、必要条件として、ϵ を大きくとる必要がある。このことは、取り出した仕事の量を知る為には、内部系のある種の初期状態のコヒーレンスを破壊しなければならないことを示している。すなわち、仕事の取り出しは観測として定式化されなくてはならない。本論文の第三章の後半部で、我々はこの事実に基づいて、観測過程としての仕事の取り出しを定式化する。まず我々は内部系の時間発展だけに注目する。このとき、観測過程は一般に、CP-instrument と呼ばれる状態間の線形写像の組 $\{\mathcal{E}_j\}_{j\in J}$ で記述できる。観測 $\{\mathcal{E}_j\}_{j\in J}$ を状態 ρ に行うと、確率 $p_j:=\mathrm{Tr}[\mathcal{E}_j(\rho)]$ で出力 j を得て、状態は $\mathcal{E}_j(\rho)/p_j$ に変化する。我々はこの j の任意の関数 w_j を測定値と考える。このようにして定義される観測過程と測定値の組 $\{\mathcal{E}_j,w_j\}$ のうち、仕事の取り出しとして重要な 3 つのクラスを与える;

CP-work extraction　仕事の取り出し全体のクラス。測定値 w_j の期待値が内部系 I のエネルギー期待値の減少量に等しい、という最低限の要請を課している。

CP-strong work extraction　内部系の初期状態がエネルギー基底で対角化できるとき（以後エネルギー対角状態と略記）、各観測結果 j に対して w_j と内部系のエネルギー期待値の減少量が等しくなるクラス。それぞれの w_j が取り出された仕事としての意味を持つ。

CP-unital work extraction　ユニタル性、すなわち $\sum_j\mathcal{E}_j(\hat{1})=\hat{1}$ が満たされる様なクラス。フィードバックコントロールを行わない仕事の取り出しに対応する。

通常の熱力学的操作は全て CP-strong かつ CP-unital なクラスに属すると考えられる。以降、我々はこのクラスを CPSU-work extraction と略記する。

次に、こうした内部系の時間発展を具体的に与えるダイナミクスとして、Fully quantum(FQ) work extraction を、全体系のユニタリ時間発展として定式化する。

FQ-work extraction　仕事の取り出し全体系のクラス。全体系のエネルギー期待値が保存する。

FQ-strong work extraction　$[V, H_I + H_{E_X}] = 0$ が成立するクラス。

FQ-memoryless work extraction　内部系の時間発展が、外部系の初期状態にではなく初期状態と終状態の相対関係にだけ依存するような全体系のユニタリ時間発展のクラス。

FQ-work extraction は、外部系に対してエネルギーに関する射影測定を行う事で、CP-work extraction に変換することができる。これは丁度、測定理論における間接測定と直接測定の関係と同じである。以後、この変換を FQ-CP map と呼ぶ。この変換によって、FQ-strong work extraction は CP-strong work extraction に、FQ-memoryless work extraction は CP-unital work extraction に変換される。CPSU-work extraction の場合と同様に、FQ-strong かつ FQ-memoryless なクラスを FQSM-work extraction と略記する。

逆の変換はどうだろうか？直接測定から間接測定を与えるのと全く同様にして、以下の定理が成立する。

Theorem 2. 任意の *CP-work extraction* に関して、*FQ-CP map* でその *CP-work extraction* に移るような *FQ-work extraction* を取る事ができる。

従って、CP-work extraction で記述されるような仕事の取り出しに対しては、少なくとも一つは、外部系だけを見て取り出した仕事の量を把握できるような実現の仕方が存在している。CPSU-work extraction と FQSM-work extraction の間にも類似の関係が成立する。これは以下の古典モデルによる表現（古典表現）を考えると見通しよく理解できる。

Definition 1 (古典モデルと古典表現)**.** ある古典系の状態集合を $\mathcal{X}$、そのハミルトニアンを $\mathcal{X}$ 上の実数値関数 $h_X(x)$ として与える。この古典系の時間発展として $\mathcal{X}$ 上の二重確率行列 $T(x'|x)$、すなわち $\sum_{x'} T(x'|x) = 1$ かつ $\sum_x T(x'|x) = 1$ が成立する様な行列を与える．この時間発展 $T(x'|x)$ によって、初期分布 $P(x)$ は終分布 $P'(x') := \sum_x T(x'|x)P(x)$ に変化する．状態が x から x' に変化した際の取り出された仕事量を $W_{x,x'} = h_X(x) - h_X(x')$ として定義すると、仕事量が w になる確率は,$\sum_{(x,x')|h_X(x)-h_X(x')=w} P(x)T(x'|x)$ になる。我々は任意の *CPSU-work extraction*$\{\mathcal{E}_j, w_j\}$ に対し、$T_{\{\mathcal{E}_j,w_j\}}(x'|x) := \sum_j \mathrm{Tr}[\langle x'|\mathcal{E}_j(|x\rangle\langle x|)|x'\rangle]$ として古典表現を与える。同様に、*FQSM-work extraction* の古典表現として、*FQ-CP map* で変換した *CPSU-work extraction* の古典表現を取る。

ある内部系 I のハミルトニアンと初期状態が上記の古典系に対し、$H_I = \sum_x h_X(x)|x\rangle\langle x|$、$\rho_I^{\mathrm{ini}} = \sum_x P(x)|x\rangle\langle x|$ を満たすとき、「内部系 I は古典的である」と言う事にしよう。このとき、古典表現は CPSU-work extraction の仕事の出力分布を再現する。この古典表現に対して、以下二つの定理が成立する。

Theorem 3. 任意 *CPSU-work extraction* に対し、同一古典表現を持つ *FQSM-work extraction* が存在する。

Theorem 4. 任意の二重確率行列 $T(x'|x)$ に対して、$T(x'|x)$ を古典表現として持つ *FQSM-work extraction* 及び *CPSU-work extraction* を取ることができる。

定理 3 は、内部系 I が古典的であるとき、任意の CPSU-work extraction はそれと同値な FQSM によって実現できる事を保証している。定理 4 は、内部系 I が古典的であるときには、特定の性質の CPSU-work extraction を見つけるために代わりにその性質を持つ古典モデルを探せばよいことを示している。

最後に、第 4 章で、我々は強い大偏差理論を用いて、有限粒子熱浴に接触しながら動作する熱機関の最大効率の近似を与える。我々は有限 n 個の粒子からなる二つの熱浴 B_H と B_L、及び l 個の粒子からなる熱機関 S

を考え、これらの合成系 SB_HB_L に対して CPSU-work extraction$\{\mathcal{E}_j, w_j\}$ を行う。初期状態において熱浴は逆温度 Gibbs 分布 $\rho_{\mathrm{G},\beta_H}(H_{B_H})$,$\rho_{\mathrm{G},\beta_L}(H_{B_L})$ にあり、またサイクリックな熱力学的操作に対応して、S の終状態が j によらずに初期状態と一致する様なものを考える。このとき、w_j の期待値を取り出した仕事 $W_{\mathrm{ext}}^{(n)}$,B_H のエネルギー期待値の減少量を吸熱量として定義し、その比 $\eta^{(n)} := W_{\mathrm{ext}}^{(n)}/Q_{H,n}$ を熱機関効率とする。このとき、熱機関効率の上界が、相対エントロピー $D(\rho||\sigma) := \mathrm{tr}[\rho(\log\rho - \log\sigma)]$、平衡状態時の熱浴の内部エネルギー $U(\beta, H) := \mathrm{tr}[\rho_{\mathrm{G},\beta}(H)H]$ とエントロピー $S(\beta, H) = S(\rho_{\mathrm{G},\beta}(H)) := -\mathrm{tr}[\rho_{\mathrm{G},\beta}(H)\log\rho_{\mathrm{G},\beta}(H)]$ で、以下の様に表される;

$$\eta^{(n)}(\{\mathcal{E}_j, w_j\}) \leq \left(1 - \frac{\beta_H}{\beta_L}\right) - \frac{D(\rho_{\mathrm{G},\beta'_H}(H_{B_H})||\rho_{\mathrm{G},\beta_H}(H_{B_H})) + D(\rho_{\mathrm{G},\beta'_L}(H_{B_L})||\rho_{\mathrm{G},\beta_L}(H_{B_L}))}{\beta_L Q_{H,n}}, \tag{4}$$

ここで β'_H と β'_L は以下の 2 式によって決定される実数である;

$$U(\beta_H, H_{B_H}) - U(\beta'_H, B_H) = Q_{H,n}, \;\; S(\beta'_H, H_{B_H}) + S(\beta'_L, H_{B_L}) = S(\beta_H, H_{B_H}) + S(\beta_L, H_{B_L}). \tag{5}$$

式 (4) は効率上限ではなく上界であり、また熱力学的な手法でも同値な不等式を得ることができる。しかし、熱浴の粒子が互いに相互作用しない場合には、我々はこの上界を $q_n := Q_{H,n}/n$ についてテイラー展開する事で、この上界と真の最大効率との間の誤差を評価することができる;

$$\eta^{(n)}(\{\mathcal{E}_j, w_j\}) \leq \left(1 - \frac{\beta_H}{\beta_L}\right) - \sum_{k=1}^{\infty} c_{\beta_H}^{(k)} q_n^k, \tag{6}$$

係数 $c_{\beta_H}^{(k)}$ は操作の仕方、及び粒子数 n によらず、熱浴粒子のエネルギー分散 $\sigma^2(\beta) := \mathrm{tr}[\rho_\beta H_B^2] - \mathrm{tr}[\rho_\beta H_B]^2$ や尖度 $\gamma_1(\beta) = \mathrm{tr}[\rho_{\mathrm{G},\beta}(H_B - U(\beta))^3]/\sigma^3(\beta)$ などだけで決まる量である。我々は $c_{\beta_H}^{(k)}$ を好きな次数まで計算することができる。テイラー展開 (6) は効率上限を q_n の精度で常に、q_n^2 の精度でほとんどの場合について近似する; 以下の効率を達成する操作が常に存在する為である。

$$\eta^{(n)}(\{\overline{\mathcal{E}}_j, w_j\}) = \left(1 - \frac{\beta_H}{\beta_L}\right) - c_{\beta_H,\beta_L}^{(1)} q_n - c_{\beta_H,\beta_L}^{(2)} q_n^2 - d_{\beta_H,\beta_L}^{(1)} \frac{q_n}{n} + O\left(\frac{q_n^2}{\sqrt{n}}\right) + O\left(q_n^3\right), \tag{7}$$

式 (4) は熱力学的な方法でも与えることができるので、これは真の最大効率に対して、熱力学が与える上界になっている。一方で、(7) は、真の最大効率の下界になっている。式 (6) と (7) の比較は、少なくとも熱浴粒子が互いに相互作用しない場合には、これらの差が高々 $O(q_n^2)$ のオーダーであることを示している。このことは以下のグラフでも見ることができる。カルノー限界と、有限熱機関の効率上界 (4)、そして具体的なプロセスを用意できる効率 (7) の比較は下図左で与えられる。下図右では、式 (7) と $\eta^{(n)}(\{\overline{\mathcal{E}}_j, w_j\})$ の数値計算を比較している。