

# 熱力学とリソース

統計物理班 渡邊開人

2023年5月10日

# 目次

第 1 章	はじめに	2
第 2 章	リソース理論の一般論	3
2.1	リソース理論とは	3
2.2	リソース理論の数学的な枠組み	4
第 3 章	古典確率分布とエントロピー	6
3.1	確率分布と遷移行列	6
3.2	Shannon エントロピーと Kullback-Leibler divergence	7
3.3	Rényi エントロピーと Rényi divergence	8
3.4	$f$ -divergence と凸性, 単調性	9
第 4 章	Majorization の数理	13
4.1	モチベーション	13
4.2	Majorization	13
4.3	d-Majorization と Thermo-majorization	15
第 5 章	古典熱力学への応用	18
5.1	熱力学第二法則	18
5.2	Single-shot の熱力学リソース理論	19
第 6 章	量子情報における情報理論と Majorization	25
6.1	CPTP 写像, ユニタリ写像	25
6.2	von Neumann エントロピーと量子 KLD	25
6.3	Quantum majorization	26
第 7 章	量子熱力学	29
7.1	Gibbs 保存写像と Thermal Operation	29
7.2	仕事のみたす不等式	31
7.3	Single-shot での仕事の制限	33
付録 A	Hardy-Littlewood-Polya の定理の証明	35
参考文献		38

# 第1章

## はじめに

近年、実験技術の向上により小さな系の制御が可能になり、それに伴って小さな系での熱力学が発展してきている。また、和書でも [1],[2] が出版されるなど国内でも盛り上がりを見せつつある。その一方で、量子情報で発展した量子リソース理論を用いて熱力学の議論をする熱力学リソース理論も近年になり研究が活発になってきている。<sup>\*1</sup>

本記事では、初めにリソース理論を軽く紹介したあと、必要となる情報理論のあらましをおさらいしたあと、強力な道具である Majorization を導入する。その後、それを利用して古典系での熱力学での遷移可能性を議論し、さらには量子系での議論へとつなげていく。

3, 4, 5, 6 章, 7 など、本記事の大部分は [3] を参考にした。しかしながら、専門家のチェックを通していない記事なので、誤りがある可能性が十二分にある事には留意されたい。前提知識について、熱力学や統計力学、量子情報理論についての知識を多少仮定している。記事中である程度補足はするものの、説明の足りない部分については適宜他の文献を参照していただきたい。一部ではあるが、有名なものとして、熱力学では [4], 統計力学では [5], 量子情報では [6] を挙げておく。

---

<sup>\*1</sup> 知らんけど。

## 第2章

# リソース理論の一般論

### 2.1 リソース理論とは

リソース理論は、例えば量子情報理論の分野で用いられる枠組みで、コストなしで用意出来る状態の集合と自由に行える操作の集合を定めたときに、2つの状態の間の遷移が可能かを議論し、ここからリソース状態を見出すことを一つの目的としている。<sup>\*1</sup>わかりやすく、歴史も長いリソース理論の例として、エンタングルメントのリソース理論が挙げられる。空間的に離れた2者(以下、AliceとBobと呼ぶ事にする。)がそれぞれ1つずつ量子を持っているとする。例えば、この2者の間で共有された状態が

$$|\psi\rangle = \frac{|0\rangle_A |0\rangle_B + |1\rangle_A |1\rangle_B}{\sqrt{2}} \quad (2.1)$$

という風に表されたとき、これは古典ではありえないような相関を持つことがわかっている。<sup>\*2</sup>このような状態をエンタングル状態という。AliceとBobに許される操作として、

- 自分のもつ量子に対する操作(ゲート操作や測定など) (局所操作 **Local Operation**)
- 行った測定結果を古典通信でもう一方に送ること (古典通信 **Classical Communication**)

を採用し、コストなしで用意出来る状態の集合としてエンタングルしていない状態の集合を採用すると、この状態の集合から任意にとった集合に、局所操作と古典通信 (**LOCC**) をかけていったとしても、エンタングル状態は生成されないことが知られている。よって、エンタングル状態はこの状態の集合と操作の集合では実現出来ないので、エンタングル状態はリソースといえる。

用語をいくつか導入しておく。以上の説明で登場した、コストなしに用意出来る状態の集合を  $\mathcal{F}$  とかき、**free states** と呼ぶ。また、許容された操作の集合を  $\mathcal{O}$  とかき、**free operation** と呼ぶ。このとき、これらは勝手に決まる組ではなく、

$$\forall \rho \in \mathcal{F}, \forall \Lambda \in \mathcal{O} \quad \Lambda(\rho) \in \mathcal{F} \quad (2.2)$$

を満たさねばならない。これは、上のエンタングルメントの話と整合する。また、リソース状態は  $\mathcal{S} \setminus \mathcal{F}$  とする。ただし、 $\mathcal{S}$  は状態全体の集合とする。今のエンタングルメントのリソース理論のセッティングでは、 $\mathcal{F}$  がセパラル状態の集合、 $\mathcal{S} \setminus \mathcal{F}$  がエンタングル状態の集合である。つまり、リソース理論を用いると、リソー

<sup>\*1</sup> すごくざっくりした説明なので、詳しくは [7] を参照してください。

<sup>\*2</sup> これは、例えば Bell の不等式の破れなどに現れる。

ス状態について操作論的な定義が出来ることがある。今回の場合は、エンタングル状態は free state から free operation で実現出来ない状態と定義出来る。

また、制限された操作下での遷移可能性の議論は、熱力学でも重要な役割を果たす。ある作業物質 (例えば、窒素 1 mol. 窒素 1 mol と窒素 2 mol は異なる作業物質とみなす。 ) の取りうる平衡状態全体の集合を  $\Gamma$  とする。  $X, Y \in \Gamma$  に対して、  $X$  から  $Y$  に断熱過程で到達出来るとき、  $X \prec Y$  とかく。このとき、いくつかのほとんど自明な要請と、比較仮説

$$\forall X, Y \in \Gamma \quad X \prec Y \text{ or } Y \prec X \quad (2.3)$$

と、不可逆過程の存在

$$\exists X_0, X_1 \text{ s.t. } X_0 \prec X_1, X_1 \not\prec X_0 \quad (2.4)$$

を仮定したとき、

$$X \prec Y \Leftrightarrow S(X) \leq S(Y) \quad (\Leftrightarrow -S(X) \geq -S(Y)) \quad (2.5)$$

を満たす  $S : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$  が、アフィン変換の自由度を除いて一意に定まることが知られている [8]. 以下、この関数  $S$  をエントロピーとよぶ。このとき、断熱過程で変化させると、  $-S$  が非増加となる。このケースにおいて具体的に free state を指摘することは難しいが、任意の 2 状態に対してどちらがよりリソースに富んでいるかがこの二項関係  $\prec$  で、また前述のエントロピーの存在から、単に  $-S$  の値の大小でも特徴づけられる。このように、制限された操作の元での遷移可能性を基に、各状態がどのくらいリソースに富んでいるかを表現する関数を持つてくることもできる。これもリソース理論の一つの恩恵である。

## 2.2 リソース理論の数学的な枠組み

以下では、リソース理論の枠組み (の一部) を導入する。あくまでこの記事に必要な分のみを紹介するにとどめるが、より詳細な内容については [7] を参照されたい。

**定義 2.2.1** (リソース理論).  $\mathcal{O}$  は、入力と出力に対応する物理系の組  $(A, B)$  (それぞれの系に対応するヒルベルト空間は  $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$  であるとする) を  $\mathcal{O}(A \rightarrow B) \subset \{\Lambda \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \rightarrow \mathcal{H}_B) | \Lambda \text{ は CPTP}\}$  に対応づける写像であるとする。また、特に  $\mathcal{F}(\mathcal{H}) = \mathcal{O}(C \rightarrow \mathcal{H})$  とする。以下の 2 つの条件が満足されているとき、  $\mathcal{R} = (\mathcal{F}, \mathcal{O})$  をリソース理論という。

- $\forall A$  (物理系)  $\text{id}^A \in \mathcal{O}(A)$  ( $\equiv \mathcal{O}(A \rightarrow A)$ )
- $\forall A, B, C$  (物理系)  $\Psi \in \mathcal{O}(A \rightarrow B), \Lambda \in \mathcal{O}(B \rightarrow C) \Rightarrow \Lambda \circ \Psi \in \mathcal{O}(A \rightarrow C)$

CPTP については、6 章を参照。特に、この  $\mathcal{F}$  を free state といい、  $\mathcal{O}$  を free operation という。また、  $S(A) \setminus \mathcal{F}(A)$  を resource state という。この定義から、  $\mathcal{F} \subset \mathcal{O}$  であるが、以降この記事では free operation は  $\mathcal{O} \setminus \mathcal{F}$  を指す。また、簡単にわかることとして、以下が成立する。

**定理 2.2.2** (リソース理論の黄金律).

$$\forall A, B \text{ (物理系)}, \Lambda \in \mathcal{O}(A \rightarrow B), \rho \in \mathcal{F}(A) \Rightarrow \Lambda(\rho) \in \mathcal{F}(B) \quad (2.6)$$

これは、free state を free operation で写してもリソースは生まれなかったことを示している。

リソース理論の定義は、free state や free operation の決め方について何も言及していない。つまり、free state や free operation は定義にあるような条件さえ満たしていればこちら側が自由に決めてよいということになる。特に、実際の実験に沿った free operation や free state を定めてやれば、意味のある結果を得られることが期待できる。

例えば実験的な制約によって free state または free operation のいずれかが与えられたとき、もう他方は一意に定まるのかはかなり気になる所ではあると思う。そのための準備として、リソース理論のテンソル積構造を導入する。

**定義 2.2.3** (テンソル積構造 (TPS)). リソース理論  $\mathcal{R} = (\mathcal{F}, \mathcal{O})$  がテンソル積の構造 (TPS) をもつとは、以下の3つの条件をみたすことである。

1. Free operation は”**completely free**”である。つまり、

$$\forall A, B, C \text{ (物理系)}, \forall \Phi \in \mathcal{O} \quad \text{id}^C \otimes \Phi \in \mathcal{O}(CA \rightarrow CB) \quad (2.7)$$

をみたす。

2. 補助系として free state を加えることは free operation である。
3. 系を破棄することは free operation である。 ( $\Leftrightarrow$  トレースは free operation)

リソース理論に TPS が入っていると、いくつかのご利益がある。例えば以下が言える。

**命題 2.2.4** (free operation のテンソル積は free operation)。

$$\Phi \in \mathcal{O}(A \rightarrow B), \Phi' \in \mathcal{O}(A' \rightarrow B') \Rightarrow \Phi \otimes \Phi' \in \mathcal{O}(AA' \rightarrow BB') \quad (2.8)$$

*Proof.*

$$\Phi \otimes \Phi' = (\text{id}^B \otimes \Phi') \circ (\Phi \otimes \text{id}^{A'}) \in \mathcal{O}(AA' \rightarrow BB') \quad (2.9)$$

□

ここから、部分トレースも free operation であるし、replacement

$$\Phi_\sigma[X] = \text{Tr}[X]\sigma \quad (2.10)$$

も free operation である。

さて、free operation の集合  $\mathcal{O}$  が与えられたとき、

$$\mathcal{F}_{min}(A) = \{\rho \in \mathcal{S}(A) | \forall \sigma \in \mathcal{S}(A), \exists \Phi \in \mathcal{O}(A) \text{ s.t. } \rho = \Phi(\sigma)\} \quad (2.11)$$

としたとき、これは  $\mathcal{F}_{min} \subset \mathcal{F}$  はすぐにわかる。もし replacement が free operation なら、 $\mathcal{F}_{min} \supset \mathcal{F}$  もすぐにわかり、 $\mathcal{F}_{min} = \mathcal{F}$  となる。つまり、与えられた free operation に replacement が含まれるなら、これと整合する free state は一意に定まる。しかし、free state の集合  $\mathcal{F}$  が与えられたとき、これと整合する free operation の集合は一般には一意に定まらないことが知られている。

## 第3章

# 古典確率分布とエントロピー

### 3.1 確率分布と遷移行列

以下、 $\mathcal{P}_d$  を  $d$  次元の確率分布全体の集合とする。

**定義 3.1.1.** (supp と rank) 確率分布  $p = \{p_i\}_i \in \mathcal{P}_d$  に対して、 $p$  の台  $\text{supp}[p]$  を

$$\text{supp}[p] = \{i : p_i > 0\} \subseteq \{1, \dots, d\} \quad (3.1)$$

と定義する。また、 $\text{rank}[p] = |\text{supp}[p]|$  を  $p$  のランクという。とくに、 $\text{rank}[p] = d$  のとき、フルランクという。

次に確率遷移行列を定義する。

**定義 3.1.2.** (確率遷移行列)

古典的な確率分布の時間発展は、確率遷移行列  $T$  で表現され、

$$p'_i = \sum_j T_{ij} p_j \quad (3.2)$$

とかける。<sup>\*1</sup>

ここで、以下のことが簡単にわかる。

**命題 3.1.3.**

$$\sum_i T_{ij} = 1 \quad (3.3)$$

*Proof.*  $p' = \{p'_j\}$  の規格性より、

$$1 = \sum_i p'_i = \sum_{i,k} T_{ik} p_k \quad (3.4)$$

---

<sup>\*1</sup> もちろん、一般には  $p \in \mathcal{P}_d$ ,  $p' \in \mathcal{P}_{d'}$  ( $d \neq d'$ ) でも構わないが、ここでは  $d = d'$ 、つまり確率遷移行列が正方行列であるような系を考える。

が任意の  $p \in \mathcal{P}_d$  に対して成立する. よって,  $p_k = \delta_{jk}$  を持ってくれば,

$$1 = \sum_{i,k} T_{ik} \delta_{jk} \quad (3.5)$$

$$= \sum_i T_{ij} \quad (3.6)$$

□

**定義 3.1.4.** 確率遷移行列  $T$  が

$$\sum_j T_{ij} = 1 \quad (3.7)$$

もみたすとき, **2重確率遷移行列**という.

$u \in \mathcal{P}_d$  を一様分布  ${}^t u = (\frac{1}{d}, \dots, \frac{1}{d})$  とする. 2重確率遷移行列に対して, 以下のような特徴づけが出来る.

**命題 3.1.5.** (2重確率遷移行列の特徴づけ) 以下は同値.

- $T$  は 2重確率遷移行列
- 一様分布  $u$  は  $T$  の固定点. つまり,  $u = Tu$

*Proof.* 新しい確率分布の第  $i$  成分を計算すると,

$$p'_i = \sum_j T_{ij} u_j \quad (3.8)$$

$$= \frac{1}{d} \sum_j T_{ij} \quad (3.9)$$

より, これを眺めるとわかる. □

## 3.2 Shannon エントロピーと Kullback-Leibler divergence

**定義 3.2.1.** (Shannon エントロピー)

確率分布  $p = \{p_i\}_i \in \mathcal{P}_d$  に対して, **Shannon エントロピー**を

$$S(p) = - \sum_i p_i \ln p_i \quad (3.10)$$

と定義する.

確率 0 の事象に対して,  $0 \ln 0 = 0$  としている. すぐわかる事実として,  $S(p) \geq 0$  がわかる.

**定義 3.2.2.** (相対エントロピー, Kullback-Leibler divergence)

$p = \{p_i\}_i, q = \{q_i\}_i \in \mathcal{P}_d$  を確率分布とする.

$$S(p||q) = \sum_i p_i \ln \frac{p_i}{q_i} \quad (3.11)$$

を相対エントロピー, **Kullback-Leibler divergence** という. (以下, KLD とかく.)



このとき,  $\text{supp } [p] \not\subseteq \text{supp } [q]$  のときは  $S(p||q) = +\infty$  と定義しておく. のちに KLD の単調性を導入してからこの非負性を示すが, 結論から言えば Jensen の不等式から示すことになる. 興味があればチャレンジされたい.

**定義 3.2.3.** (相互情報量)

有限集合  $A, B$  上の確率分布  $p_{AB}$  に対して, それを周辺化した確率分布を  $p_A, p_B$  とする. このとき, 確率分布  $p_{AB}$  に対する相互情報量を

$$I^{A:B}(p_{AB}) = S(p_A) + S(p_B) - S(p_{AB}) \quad (3.12)$$

と定義する.

相互情報量は, 物理的 (?) には,  $A(B)$  についての情報を得たとき,  $B(A)$  についての情報がどのくらい得られるかに対応している. また, 相互情報量の定義をさらに計算すると, ( $i$  を  $A$  の方のインデックス,  $j$  を  $B$  の方のインデックスとする.)

$$I^{A:B}(p_{AB}) = S(p_A) + S(p_B) - S(p_{AB}) \quad (3.13)$$

$$= -\sum_{i \in A} p_i \ln p_i - \sum_{j \in B} p_j \ln p_j + \sum_{(i,j) \in A \times B} p_{ij} \ln p_{ij} \quad (3.14)$$

$$= \sum_{(i,j) \in A \times B} p_{ij} \ln \frac{p_{ij}}{p_i p_j} \quad (3.15)$$

$$= S(p_{ij} || p_i \otimes p_j) \quad (3.16)$$

と書ける. このあと, KLD の非負性を示す. ここから相互情報量の非負性も示される. また, 今のところ導入するつもりがあまりないが, 条件付きエントロピーを用いると

$$I(X : Y) = S(X) - S(X|Y) \quad (3.17)$$

と変形できる.

### 3.3 Rényi エントロピーと Rényi divergence

Shannon エントロピーを包含する概念として Rényi エントロピーがある.

**定義 3.3.1.** (Rényi エントロピーと divergence)

確率分布  $p \in \mathcal{P}_d$  と  $0 \leq \alpha \leq \infty$  に対して, **Rényi  $\alpha$ -エントロピー**を

$$S_\alpha(p) := \frac{1}{1-\alpha} \ln \left( \sum_{i=1}^d p_i^\alpha \right) \quad (3.18)$$

と定義する. また,  $p, q \in \mathcal{P}_d$  に対して, **Rényi  $\alpha$ -divergence** を

$$S_\alpha(p||q) := \frac{1}{\alpha-1} \ln \left( \sum_i \frac{p_i^\alpha}{q_i^{\alpha-1}} \right) \quad (3.19)$$

と定義する.

これらはいずれも非負である. エントロピーの方は直ぐ確認できる. divergence の方はあとで一気に示す. 以下は簡単に確認できる.

**命題 3.3.2.** (Rényi $\leftrightarrow$  Shannon,KLD) Rényi 1-エントロピーは Shannon エントロピーと一致し, Rényi 1-divergence は KLD と一致する. つまり,

$$S_1(p) = S(p) \quad (3.20)$$

$$S_1(p||q) = S(p||q) \quad (3.21)$$

*Proof.* エントロピーの方に関しては,

$$S_1(p) = -\lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{1}{\alpha - 1} \ln \left( \sum_i p_i^\alpha \right) \quad (3.22)$$

$$= -\frac{d}{d\alpha} \ln \left( \sum_i p_i^\alpha \right) \Big|_{\alpha=1} \quad (3.23)$$

$$= -\frac{\sum_i p_i^\alpha \ln p_i}{\sum_i p_i^\alpha} \Big|_{\alpha=1} \quad (3.24)$$

$$= -\sum_i p_i \ln p_i = S(p) \quad (3.25)$$

となる. divergence に対しては,

$$S_1(p||q) = \lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{1}{\alpha - 1} \ln \left( \sum_i \frac{p_i^\alpha}{q_i^{\alpha-1}} \right) \quad (3.26)$$

$$= \frac{d}{d\alpha} \ln \left( \sum_i \frac{p_i^\alpha}{q_i^{\alpha-1}} \right) \Big|_{\alpha=1} \quad (3.27)$$

$$= \frac{\sum_i q_i (p_i/q_i)^\alpha \ln(p_i/q_i)}{\sum_i \frac{p_i^\alpha}{q_i^{\alpha-1}}} \Big|_{\alpha=1} \quad (3.28)$$

$$= \sum_i p_i \ln \frac{p_i}{q_i} = S(p||q) \quad (3.29)$$

とかける. よって OK. □

また,  $\alpha = 0, \infty$  の場合は重要だし, この後割と使う.

**命題 3.3.3.** ( $\alpha = 0, \infty$  のときの Rényi エントロピーとダイバージェンス)

$$S_0(p) = \ln(\text{rank}[p]) \quad (3.30)$$

$$S_\infty(p) = -\ln \left( \max_i p_i \right) \quad (3.31)$$

$$S_0(p||q) = -\ln \left( \sum_{i:p_i>0} q_i \right) \quad (3.32)$$

$$S_\infty(p||q) = \ln \left( \max_i \frac{p_i}{q_i} \right) \quad (3.33)$$

証明は略.

## 3.4 $f$ -divergence と凸性, 単調性

**定義 3.4.1.** (Convexity と Concavity)  $I \in \mathbb{R}$  を区間とする.  $f : I \rightarrow \mathbb{R}$  が

$$\forall x, y \in I, \forall \lambda \in [0, 1] \quad f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) \quad (3.34)$$

をみたととき, 下に凸 (**convex**) という. 逆の不等式が成立するなら, 上に凸 (**concave**) という.

$f$ -divergence を以下で定義する.

**定義 3.4.2.** ( $f$ -divergence)  $p, q \in \mathcal{P}_d$  とする. また,  $f : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$  を下に凸の関数とする.

$$D_f(p||q) = \sum_i q_i f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \quad (3.35)$$

を  $f$ -divergence という.

この  $f(x)$  を  $f(x) = x \ln x$  と選べば, これは下に凸で, このときの  $f$ -divergence は KLD と一致する. また,  $f(x) = x^\alpha$  として  $\log$  を取って  $\frac{1}{\alpha-1}$  倍すれば Rényi divergence となる.

**定理 3.4.3.**  $f$  を下に凸な関数とし,  $p, q, p', q' \in \mathbb{R}^d$  とする. また,  $q, q'$  の全ての成分は正であるとする.  $T$  を確率遷移行列として,  $p' = Tp, q' = Tq$  ならば

$$\sum_i q'_i f\left(\frac{p'_i}{q'_i}\right) \leq \sum_i q_i f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \quad (3.36)$$

上に凸の関数ならば, 逆向きの不等式が成立する.

*Proof.*

$$\frac{p'_j}{q'_j} = \sum_i \frac{T_{ji} p_i}{q'_j} = \sum_i \frac{T_{ji} q_i}{q'_j} \frac{p_i}{q_i} \quad (3.37)$$

$$\sum_i \frac{T_{ji} q_i}{q'_j} = 1 \quad (3.38)$$

に注意すれば, Jensen の不等式から,

$$\sum_j q'_j f\left(\frac{p'_j}{q'_j}\right) = \sum_j q'_j f\left(\sum_i \frac{T_{ji} q_i}{q'_j} \frac{p_i}{q_i}\right) \quad (3.39)$$

$$\geq \sum_j \sum_i q'_j \frac{T_{ji} q_i}{q'_j} f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \quad (3.40)$$

$$= \sum_i q_i f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \quad (3.41)$$

上に凸ならば Jensen の不等式が逆向きになる. □

ここから, 以下の系が従う.

**系 3.4.4.**  $T$  を 2 重確率遷移行列として,  $p, p' \in \mathbb{R}^d$  とする. このとき, 下に凸な関数  $f(x)$  に対して

$$\sum_i f(p'_i) \leq \sum_i f(p_i) \quad (3.42)$$

*Proof.*  $q = (1, \dots, 1) = du$  とすれば,  $q' = du$ . これを代入すれば OK. □

これを用いれば、いろいろ保留してきたことが示せる。その前に、以下のような行列を定義しておく。

$$U = \begin{pmatrix} \frac{1}{d} & \cdots & \frac{1}{d} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{d} & \cdots & \frac{1}{d} \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

これは確かに確率遷移行列であることが確かめられる。この行列は任意の確率分布を一様分布  $u$  にうつす。

系 3.4.5. (KLD  $\geq 0$ )

$p, q \in \mathcal{P}_d$  とする。このとき、

$$S(p||q) \geq 0 \quad (3.44)$$

*Proof.*  $u = Up = Uq$  に留意すれば、 $f(x) = x \ln x$

$$S(p||q) = D_f(p||q) \quad (3.45)$$

$$\geq D_f(Up||Uq) \quad (3.46)$$

$$= D_f(u||u) = 0 \quad (3.47)$$

よって OK. □

系 3.4.6. (Rényi  $\alpha$ -divergence  $\geq 0$ )

$p, q \in \mathcal{P}_d$  とする。このとき、

$$\forall \alpha \in [0, \infty] \quad S_\alpha(p||q) \geq 0 \quad (3.48)$$

*Proof.*  $f(x) = x^\alpha$  とする。  $\alpha = 1$  なら KLD であるのはすでに示したので、  $\alpha > 1$  と、  $1 > \alpha > 0$  に分けて考える必要があるが、  $\alpha > 1$  のみ考える。もう一方は同じように証明出来る。  $f(x) = x^\alpha$  とすれば、これは下に凸。このとき、

$$D_f(p||q) \geq D_f(Up||Uq) \quad (3.49)$$

$$= \sum_i (Uq)_i f(1) \quad (3.50)$$

$$= \sum_i \frac{1}{d} \times 1 = 1 \quad (3.51)$$

これに  $\log$  をとって、  $\alpha - 1 (> 0)$  でわると Rényi  $\alpha$ -divergence になるから、

$$S_\alpha(p||q) \geq \frac{1}{\alpha - 1} \log 1 = 0 \quad (3.52)$$

となり、OK. □

さらに、Rényi  $\alpha$ -divergence について、以下の関係が成立する。

系 3.4.7.  $p, q \in \mathcal{P}_d$  とする。このとき、

$$\alpha \leq \alpha' \Rightarrow S_\alpha(p||q) \leq S_{\alpha'}(p||q) \quad (3.53)$$

*Proof.*  $\alpha' > \alpha$  のとき、  $f(x) = x^{(\alpha-1)/\alpha'-1}$  ととる。このとき、

$$f''(x) = \frac{(\alpha-1)(\alpha-\alpha')}{(\alpha'-1)^2} x^{(\alpha-1)/(\alpha'-1)-2} \quad (3.54)$$

となるので,  $\alpha < 1$  なら下に凸,  $\alpha > 1$  なら上に凸. 一旦,  $\alpha < 1$  について考える. Jensen の不等式から,

$$S_\alpha(p||q) = \frac{1}{\alpha - 1} \ln \left( \sum_i p_i \left( \frac{p_i}{q_i} \right)^{\alpha-1} \right) \quad (3.55)$$

$$= \frac{1}{\alpha - 1} \ln \left( \sum_i p_i \left( \frac{p_i}{q_i} \right)^{(\alpha'-1) \frac{\alpha-1}{\alpha'-1}} \right) \quad (3.56)$$

$$\leq \frac{1}{\alpha - 1} \ln \left( \sum_i p_i \left( \frac{p_i}{q_i} \right)^{\alpha'-1} \right)^{\frac{\alpha-1}{\alpha'-1}} \quad (3.57)$$

$$= \frac{1}{\alpha' - 1} \ln \left( \sum_i p_i \left( \frac{p_i}{q_i} \right)^{\alpha'-1} \right) = S_{\alpha'}(p||q) \quad (3.58)$$

□

最後に, divergence とエントロピーを結びつける. まず,  $u$  を一様分布として,  $S(u) = -\sum_i \frac{1}{d} \ln \frac{1}{d} = \ln d$ . 任意の確率分布  $p \in \mathcal{P}_d$  に対して

$$S(p||u) = \sum_i p_i \ln \frac{p_i}{1/d} \quad (3.59)$$

$$= \ln d - S(p) \geq 0 \quad (3.60)$$

となる. 等号成立は  $p = u$  の時のみである. よって, 任意の確率分布  $p$  に対して, そのエントロピーの取りうる値の範囲は,

$$0 \leq S(p) \leq \ln d \quad (3.61)$$

となる. また, KLD の単調性から,  $T$  を 2 重確率遷移行列とすれば,

$$S(p||u) \geq S(Tp||Tu) = S(Tp||u) \quad (3.62)$$

$$\ln d - S(p) \geq \ln d - S(Tp) \quad (3.63)$$

$$S(Tp) \geq S(p) \quad (3.64)$$

$p^{can} = e^{-\beta E_i} / Z$  (カノニカル分布) に対して,  $\beta \rightarrow 0$ , つまり高温極限をとると一様分布  $u$  となる. ここで, 2 重確率遷移行列  $T$  が  $u$  の固定点であるというのは,  $T$  が高温極限を取った系における時間発展を記述する行列であり, 平衡分布が平衡分布にうつるということに対応する. これとまったく同様に,  $S_\alpha(p||u) = \ln d - S_\alpha(p)$  であるから, 同じようにして

$$S_\alpha(Tp) \geq S_\alpha(p) \quad (3.65)$$

とわかる. 有限温度で同様の議論をするためには, 次章で説明する Majorization が強力な武器となる.

## 第4章

# Majorization の数理

### 4.1 モチベーション

すでに説明してあるように,  $p, p' \in \mathcal{P}_d$  と  $T$  (2重確率遷移行列) に対して,  $p' = Tp$  ならば,  $S(p') \geq S(p)$  が成立する. しかし, 逆は一般には成立しない. つまり,  $S(p') \geq S(p)$  が成立するとき,  $p' = Tp$  をみたす2重確率遷移行列  $T$  の存在は一般には保証されない. この必要十分条件を与えるのが Majorization である.

### 4.2 Majorization

$p \in \mathcal{P}_d$  に対して,  $p^\downarrow$  を,  $p$  の成分を降順 (つまり, 大きい順) に並びかえたものと定義する. つまり,  $p^\downarrow$  は

$$p^\downarrow = (p_1^\downarrow, p_2^\downarrow, \dots, p_d^\downarrow) \quad (4.1)$$

$$p_1^\downarrow \geq p_2^\downarrow \geq \dots \geq p_d^\downarrow \quad (4.2)$$

をみताす. このとき, Majorization は以下のように定義できる.

**定義 4.2.1.** ((古典)Majorization)

$p, p' \in \mathcal{P}_d$  とする. 以下の条件をみたすとき,  $p$  が  $p'$  を **Majorize** するといひ,  $p \succ p'$  とかく.

$$\forall k \in \{1, \dots, d\} \quad \sum_{i=1}^k p_i^\downarrow \leq \sum_{i=1}^k p_i^{\prime\downarrow} \quad (4.3)$$

これは, 以下のように図を書くとわかりやすい.

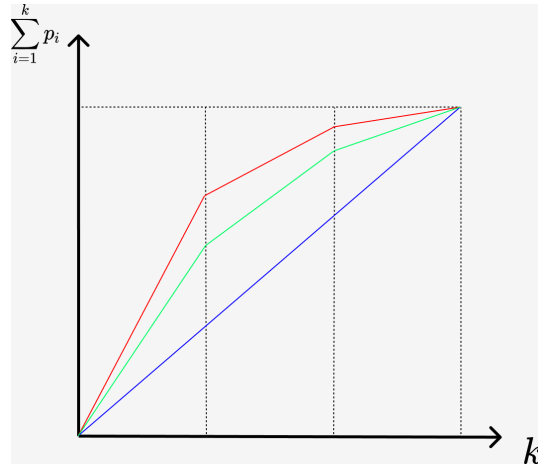


図 4.1 Majorization をあらわすローレンツカーブの例. 赤の曲線で表される確率分布は緑の曲線で表される確率分布を Majorize する. 青は一様分布.

横軸に  $k$ , 縦軸に  $\sum_i p_i^\downarrow$  をとれば, これは上に凸な折れ線を描くことがわかる. これをローレンツカーブという. また, 簡単にわかるように, 一様分布のローレンツカーブは単に直線となる. 簡単にわかるように,  $p \succ p'$  であるための必要十分条件は,  $p$  のローレンツカーブは  $p'$  のローレンツカーブより常に上側にあることである. また,  $\forall p \in \mathcal{P}_d \ p \succ u$  が成立する.

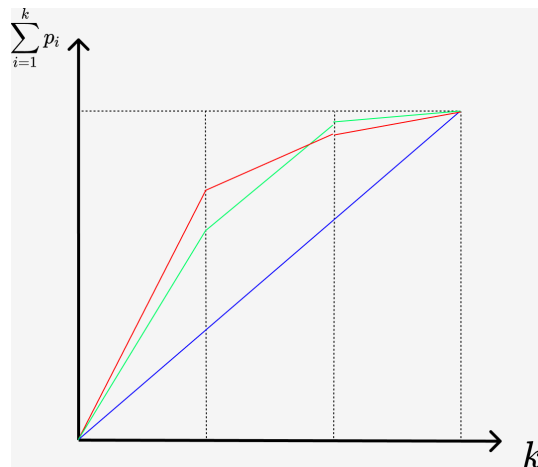


図 4.2  $p \succ p'$  も  $p' \succ p$  も成立しない例

以下は, 重要である.

定理 4.2.2 (Hardy-Littlewood-Polya).  $p, p' \in \mathcal{P}_d$  とする. 以下は全て同値.

1.  $p' \prec p$
2.  $\forall t \in \mathbb{R} \quad \sum_i^d |p'_i - t| \leq \sum_i^d |p_i - t|$
3. 任意の下に凸な関数  $f$  に対して  $\sum_i^d f(p'_i) \leq \sum_i^d f(p_i)$
4. ある 2 重確率遷移行列  $T$  が存在して,  $p' = Tp$

証明は、あとで元気があれば Appendix で書くことにする。(まあまあ大変) この 3 番目の条件に関して、 $f(x) = x \ln x$  とすれば、 $S(p') \geq S(p)$  がしたがう。

### 4.3 d-Majorization と Thermo-majorization

以下、Majorization を拡張した **d-majorization** と **thermo-majorization** を導入する。その前に、以下では、 $p, q \in \mathcal{P}_d$  とし、 $q$  はフルランクとする。 $p = (p_1, \dots, p_d)$ ,  $q = (q_1, \dots, q_d)$  とする。このとき、

$$\frac{p}{q} \equiv \left( \frac{p_1}{q_1}, \frac{p_2}{q_2}, \dots, \frac{p_d}{q_d} \right) \quad (4.4)$$

の成分を降順に並び変えたものを

$$\frac{p^*}{q^*} \equiv \left( \frac{p_1^*}{q_1^*}, \frac{p_2^*}{q_2^*}, \dots, \frac{p_d^*}{q_d^*} \right) \quad (4.5)$$

と定義する。この順で並び変えた  $p^*, q^*$  は、必ずしも  $p^\downarrow, q^\downarrow$  とは一致しないことに留意されたい。このとき、 $i = 1, \dots, d$  に対して、 $(\sum_{k=1}^{i-1} q_k^*, \sum_{k=1}^{i-1} p_k^*)$  と  $(\sum_{k=1}^i q_k^*, \sum_{k=1}^i p_k^*)$  を線分で結んで出来るカーブを相対 (一般化) ローレンツカーブという。(  $i = 1$  のときは、 $(0, 0)$  と  $(q_1^*, p_1^*)$  を結ぶと約束する。 )

**定義 4.3.1** (d-Majorization).  $p, q, p', q' \in \mathcal{P}_d$  とし、 $q, q'$  はフルランクであるとする。 $(p, q)$  が  $(p', q')$  を **d-Majorize** するとは、 $(p, q)$  の相対ローレンツカーブが  $(p', q')$  の相対ローレンツカーブより上側にあることをいう。

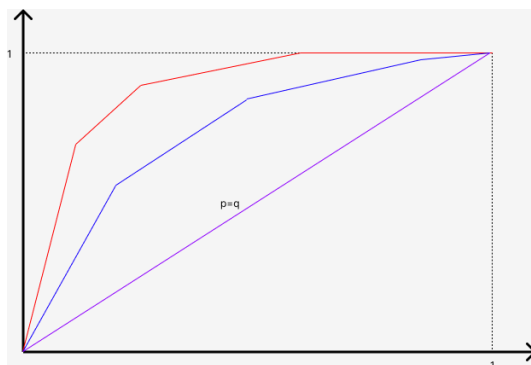


図 4.3 d-Majorization の例

定義から直ぐわかるように、相対ローレンツカーブは必ず上に凸なグラフであり、 $p = q$  のとき  $(p, q)$  に対応するローレンツカーブは  $(0, 0), (1, 1)$  を結ぶ直線となる。このとき、d-Majorization についても以下の強力な定理が成立する。

**定理 4.3.2** (Blackwell).  $p, q, p', q' \in \mathcal{P}_d$  とし、 $q, q'$  はフルランクであるとする。以下は全て同値。

- $(p', q') \prec (p, q)$
- $\forall t \in \mathbb{R} \quad \sum_{i=1}^d |p'_i - tq'_i| \leq \sum_{i=1}^d |p_i - tq_i|$
- $\forall f(x) : \text{convex} \quad \sum_{i=1}^d q'_i f\left(\frac{q'_i}{p'_i}\right) \leq \sum_{i=1}^d q_i f\left(\frac{q_i}{p_i}\right)$
- ある確率遷移行列  $T$  が存在して、 $p' = Tp$  かつ  $q' = Tq$



証明は、Hardy-Littlewood-Polya の定理と同様、元気があれば記す。また、一瞬だけ相対ローレンツカーブについて掘り下げる。

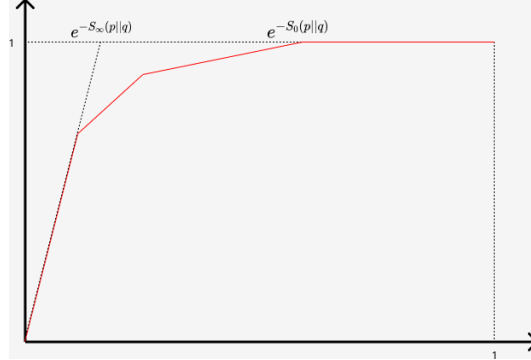


図 4.4 Majorization と Rényi divergence

$$S_0(p||q) = -\ln \left( \sum_{i:p_i>0} q_i \right) \quad (4.6)$$

$$S_\infty(p||q) = \ln \left( \max_i \frac{p_i}{q_i} \right) \quad (4.7)$$

であることを思い出すと、実は、 $(p, q)$  に対応する相対ローレンツカーブには、 $S_0(p||q)$  と  $S_\infty(p||q)$  に対応する量が現れていることがわかる。

さらに、Thermo-majorization も定義する。

**定義 4.3.3.**  $p, p', q \in \mathcal{P}_d$  とし、 $q$  はフルランクであるとする。 $(p', q) \prec (p, q)$  が成立するとき、 $p$  は  $q$  を基準として  $p'$  を **Thermo-majorize** するといひ、

$$p' \prec_q p \quad (4.8)$$

とかく。

じつは、ここがかなりの感動ポイントである。というのも、 $p' \prec_q p$  のとき、Blackwell の定理から、 $p' = Tp, q = Tq$  を満たす確率遷移行列  $T$  が存在する。この  $q$  を、温度  $\beta$  のときの Gibbs 分布  $p_i^G = \frac{\exp(-\beta E_i)}{Z}$  とすれば、 $T$  はこの Gibbs 分布を保存する写像であるといえる。よって、この Gibbs 分布を保存する写像で  $p$  が  $p'$  に遷移可能である必要十分条件は  $p' \prec_{p^G} p$  とかける。また、 $q = u$  とすれば、普通の majorization と一致する。

**定理 4.3.4** (状態遷移).  $p, q, p', q' \in \mathcal{P}_d$  とし、 $q, q'$  はフルランクであるとする。

- $(p', q') \prec (p, q)$  ならば、

$$S_0(p||q) \geq S_0(p'||q'), \quad S_\infty(p||q) \geq S_\infty(p'||q'). \quad (4.9)$$

- $S_\infty(p'||q') \leq S_0(p||q)$  ならば  $(p', q') \prec (p, q)$

*Proof.* 絵を書くと明らか.

□

上の定理から明らかなように, Rényi divergence の観点からは, 状態遷移と d-majorization に関する必要条件と十分条件は一致しない.

## 第5章

# 古典熱力学への応用

この章では, majorization の熱力学への応用を考える. また, これから扱う確率分布は全て古典確率分布なので, 古典熱力学と呼ぶ. 特に, いまから扱う系は,  $(E_1, \dots, E_d) \in \mathbb{R}$  の離散的なエネルギー準位をもつとする. また, この系が逆温度  $\beta$  の熱浴に接触しているとき, Gibbs 分布は

$$p_i^G = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}, \quad Z = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (5.1)$$

となる.

### 5.1 熱力学第二法則

いま, 系は Gibbs 保存写像 (以下, GPM. )  $T$  にしたがって時間発展すると考える. つまり,  $Tp^G = p^G$  が成立する. このとき, KLD の単調性から,

$$S_1(p||p^G) \geq S_1(Tp||Tp^G) = S_1(Tp||p^G) \quad (5.2)$$

$$-S_1(p) + \beta \sum_i E_i p_i - \log Z \geq -S_1(Tp) + \beta \sum_i E_i (Tp)_i - \log Z \quad (5.3)$$

$$\Delta S_1 \geq \beta \sum_i E_i \{(Tp)_i - p_i\} \quad (5.4)$$

ここで, ゆらぎの熱力学の文脈で仕事と熱に相当するものが何かを考える. 一般に, エネルギー準位が  $E_i = E_i(\lambda(t))$  という風に, 操作パラメタ  $\lambda(t)$  に依存する場合を考える. このとき, 系のエネルギー期待値は  $\langle E \rangle = \sum_i E_i(\lambda(t)) p_i(t)$  とかける. これの時間微分を考えると,

$$\frac{d}{dt} \langle E \rangle = \sum_i \left[ \frac{dE_i}{d\lambda} \frac{d\lambda}{dt} p_i + E_i(\lambda(t)) \frac{dp_i}{dt} \right] \quad (5.5)$$

と書ける. このとき, 第1項は, 外部から操作パラメタを操作した結果のエネルギーの変化であり, 第2項は時間発展により確率分布が変化したことによるエネルギーの変化であるので, 第1項は外部からされた仕事, 第2項は吸熱であると考えることが出来る. さて, もとの文脈に戻る.  $\sum_i E_i \{(Tp)_i - p_i\}$  は系の吸熱と解釈することが出来るから,

$$\Delta S \geq \beta Q \quad (5.6)$$

と書ける. そうすると, これはクラウジウスの不等式となる. よって, KLD の単調性から第二法則が導かれることがわかった. また, 非平衡のヘルムホルツの自由エネルギーを

$$F_1(p, \beta, H) = E - \frac{1}{\beta} S_1(p) = \frac{1}{\beta} S_1(p||p^G) + F \quad (5.7)$$

と定義する. ここで,  $F = -\frac{1}{\beta} \ln Z$  は, 温度  $\beta$ , ハミルトニアン  $H$  の元での平衡自由エネルギーである. これと熱力学第一法則  $\Delta E = Q + W$  を用いると, クラウジウスの不等式は,

$$\frac{1}{\beta} \Delta S \geq \Delta E - W \quad (5.8)$$

$$W \geq \Delta F \quad (5.9)$$

と書きなおせる.

## 5.2 Single-shot の熱力学リソース理論

系は確率分布で特徴づけられ, 系のする仕事はゆらがない場合を考える. これを single-shot の熱力学という. 以下では, この single-shot の熱力学における遷移可能性を議論する.

今から考える熱力学リソース理論

- Free State: Gibbs 状態  $p^G$
- Free Operator: Gibbs 保存写像  $Tp^G = p^G$

### 5.2.1 非平衡状態への遷移に要する仕事

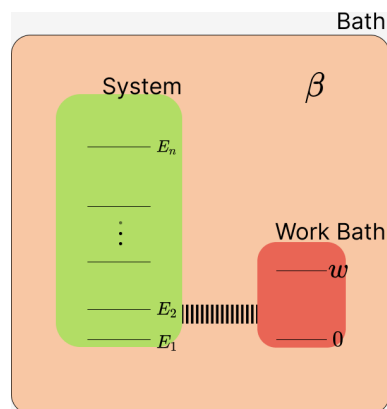


図 5.1 以下で考える系のセッティング. 逆温度  $\beta$  の熱浴の中に, 系 S と仕事浴 W が入っている. 系 S は  $E_1, \dots, E_n$  の  $n$  の準位を持つ. 仕事浴 W は  $0, w$  の二つの準位を持つ. 系が仕事浴から仕事を受けると  $w > 0$ , 系が仕事浴に仕事をするなら  $w < 0$  とする.

以下では, 図 5.1 のような系を考える. システムの準位  $E_i$  の確率を  $p_i$  とする. このとき, Gibbs 分布は  $p_i^G = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}$  と書ける. また, 仕事浴の  $0, w$  の準位にいる確率を  $r = (r^{down}, r^{up})$  とかくことにする. このと

き、仕事浴の Gibbs 分布は

$$r^G = \left( \frac{1}{1 + e^{-\beta w}}, \frac{e^{-\beta w}}{1 + e^{-\beta w}} \right) \equiv (r^{G,down}, r^{G,up}) \quad (5.10)$$

とかける。また、 $r^{up} = (0, 1)$ ,  $r^{down} = (1, 0)$  を、仕事浴の状態が上、下の状態での確率分布とする。この問題における GPM は、 $p^G \otimes r^G$  を保存する写像として考える。

以下で考えたい問題を一旦整理しておく。

問題設定

初期状態: $p = p^G, r = r^{up}$ , 終状態: $p, r = r^{down}$  とする。このとき、Gibbs 分布  $p^G \otimes r^G$  を保存する写像で SW が時間発展するとき、初期状態から終状態への遷移が可能な GPM が存在するための条件は？

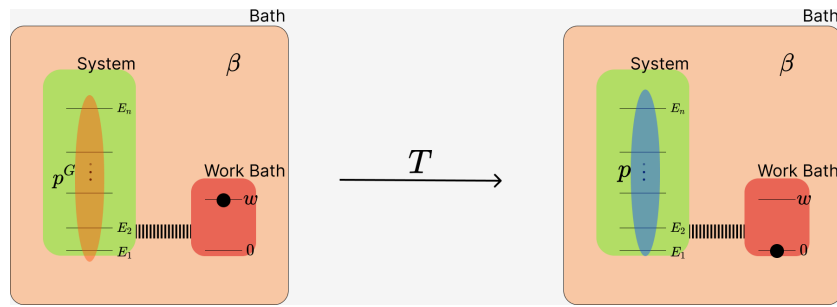


図 5.2 考える問題のセッティング. 仕事浴を下げてシステムに仕事をするので、システムを非平衡状態  $p$  にしたい。

Majorization は、このような問題に対して有効に活用出来る。つまり、

$$\exists T : \text{GPM s.t. } T(p^G \otimes r^{up}) = p \otimes r^{down} \quad (5.11)$$

$$\Leftrightarrow p \otimes r^{down} \prec_{p^G \otimes r^G} p^G \otimes r^{up} \quad (5.12)$$

となる。あとは、 $(p \otimes r^{down}, p^G \otimes r^G)$  と  $(p^G \otimes r^{up}, p^G \otimes r^G)$  に対応する相対ローレンツカーブを書いて議論する。それぞれの確率分布を書き下せば、

$$p^G \otimes r^{up} = (0, p_1^G, 0, p_2^G, \dots, 0, p_n^G) \quad (5.13)$$

$$p \otimes r^{down} = (p_1, 0, p_2, 0, \dots, 0, p_n) \quad (5.14)$$

$$p^G \otimes r^G = (p_1^G r^{G,up}, p_1^G r^{G,down}, p_2^G r^{G,up}, p_2^G r^{G,down}, \dots, p_n^G r^{G,up}, p_n^G r^{G,down}) \quad (5.15)$$

これをふまえて、相対ローレンツカーブを書くと図 5.3 のようになる。

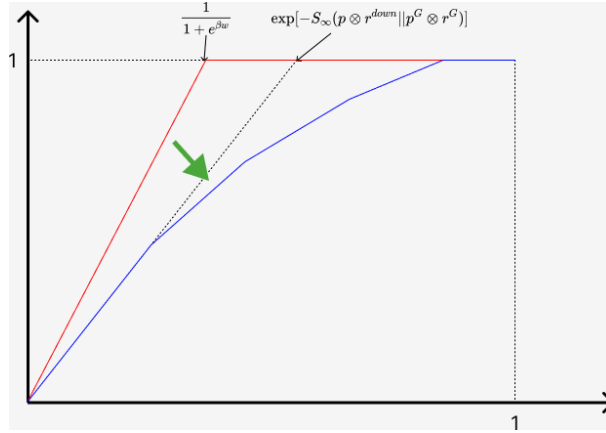


図 5.3 この問題設定でのローレンツカーブ. 赤が  $p^G \otimes r^{up}$  のローレンツカーブであり,  $p \otimes r^{down}$  (青のローレンツカーブ) への状態遷移が可能であるためには, そのローレンツカーブが赤のカーブより下にいれば OK であるが, 特に一番最初の傾きが赤より青が緩やかであれば OK.

図から, この遷移が可能であるための必要十分条件は,

$$\frac{1}{1+e^{\beta w}} \leq \exp \left\{ -S_{\infty}(p \otimes r^{down} || p^G \otimes r^G) \right\} \quad (5.16)$$

$$\frac{1}{1+e^{\beta w}} \leq \frac{1}{1+e^{-\beta w}} e^{-S_{\infty}(p || p^G)} \quad (5.17)$$

$$w \geq \frac{1}{\beta} S_{\infty}(p || p^G) \quad (5.18)$$

とかける. この不等式は,  $p^G \rightarrow p$  の遷移が可能となるための仕事の下限を与える. ここで, 一旦 KLD (つまり  $\alpha = 1$  のとき) について考えれば,

$$\frac{1}{\beta} S_1(p || p^G) = kT \sum_i p_i \log p_i - kT \sum_i p_i \log \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \quad (5.19)$$

$$= -kT S_1(p) + kT \log Z + \langle E \rangle \quad (5.20)$$

$$= F(p, \beta, H) - F \quad (5.21)$$

となる. ただし, 第一項は非平衡自由エネルギー, 第二項は平衡状態での自由エネルギーである. つまり,  $\alpha = \infty$  の場合でも似たような量であると推察すれば, 非平衡な状態に遷移するために必要な仕事の下限は, 自由エネルギーの差に相当する量である.

## 5.2.2 平衡状態への緩和で取り出せる仕事

以下では, 上の議論と逆のことを考える. つまり, システムが非平衡状態  $p$  から GPM で平衡状態  $p^G$  に緩和するとき, どれだけの仕事を取り出せるかの上限を考える. また,  $w < 0$  として考える.

問題設定

初期状態:  $p, r = r^{up}$ , 終状態:  $p = p^G, r = r^{down}$  とする. このとき, Gibbs 分布  $p^G \otimes r^G$  を保存する写像で SW が時間発展するとき, 初期状態から終状態への遷移が可能な GPM が存在するための条件は?

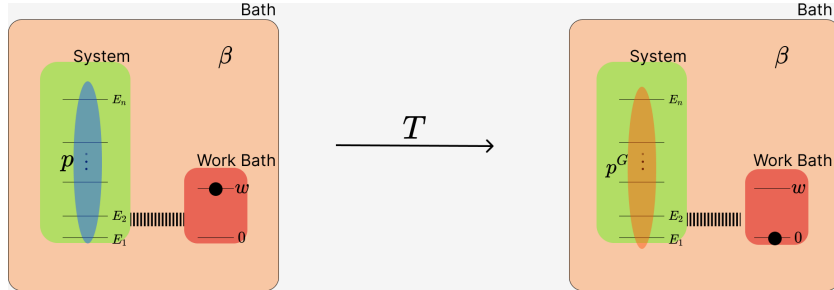


図 5.4 考える問題のセッティング. 非平衡状態から平衡状態に緩和する際に取り出した仕事を  $-w$  とする. ただし,  $w < 0$  とする.

議論の流れはまったく同様なので詳細は割愛するが, ローレンツカーブは以下ようになる.

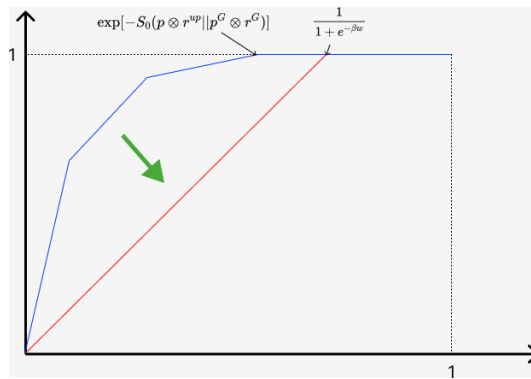


図 5.5 この問題設定でのローレンツカーブ. 図から, 今度は  $S_0(p \otimes r^{up} || p^G \otimes r^G)$  の方で比較すればよい.

図から, この遷移が可能であるための条件は,

$$\exp \left\{ -S_0(p \otimes r^{up} || p^G \otimes r^G) \right\} \leq \frac{1}{1 + e^{-\beta w}} \quad (5.22)$$

$$-w \leq \frac{1}{\beta} S_0(p || p^G) \quad (5.23)$$

となる.

このとき, 非常に興味深いのは,  $p \rightarrow p^G$  と  $p^G \rightarrow p$  とで, 仕事  $w$  のバウンドは  $\alpha = 0$  か  $\alpha = \infty$  かが異なる点である.

### 5.2.3 平衡状態から平衡状態への遷移

最後に, 初期状態と終状態でエネルギー準位が変化したときの遷移可能条件を考える. このために, 新たに clock 系を考える. この clock に対応する確率分布を  $s = (c_0, c_1)^T$  としたとき, clock が  $s = c = (1, 0)^T$  のときに系の準位が  $\{E_i\}_{i=1}^n$ ,  $s = c' = (0, 1)^T$  のときに系の準位が  $\{E'_i\}_{i=1}^n$  となるとする. また, 実際に考える状態では  $s$  は  $c, c'$  のいずれかであるとする.

問題設定

初期状態で  $s = c = (1, 0)$ ,  $r = r^{up}$ ,  $p = p^G$  ( $p_i^G = \exp\{-\beta E_i\} / \sum_i \exp\{-\beta E_i\}$ ) とする. また, 終状態は  $s = c' = (0, 1)$ ,  $r = r^{down}$ ,  $p = p'^G$  ( $p_i'^G = \exp\{-\beta E'_i\} / \sum_i \exp\{-\beta E'_i\}$ ) とする. 初期状態から終状態への遷移が可能な GPM が存在するための必要十分条件は?

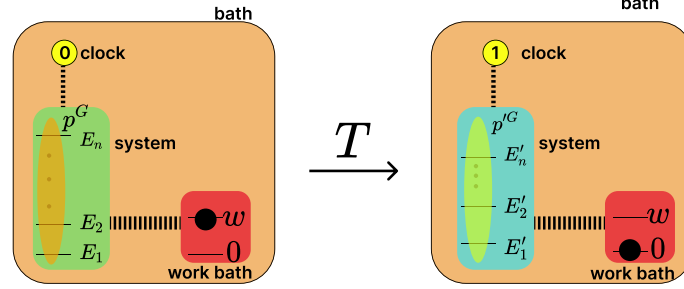


図 5.6 考える問題のセッティング.

このとき, 時間発展を記述する確率遷移行列の固定点となっていてほしい確率分布は, パット見では非自明である. 分配関数を計算する処方では, ハミルトニアンの変化的な変化に対応出来ないからである. だからこそ, clock 系を実際に物理的実体として考慮に入れる必要がある. このとき, 保存する Gibbs 分布は,

$$(p \otimes r \otimes s)^G = \frac{Z}{Z + Z'} p^G \otimes r^G \otimes c + \frac{Z'}{Z + Z'} p'^G \otimes r^G \otimes c' \quad (5.24)$$

と書ける. といっても, なんだか微妙に腑に落ちないかもしれない. これは, 量子系での対応物を考えた方が直観的にわかりやすい. 着目系と clock 系の複合系 (SC 系) のハミルトニアンを考える. 古典系の文脈で clock 系の状態が  $s = c = (1, 0)$  であるということを, clock 系が  $|0\rangle_C$  にあると読み替え,  $s = c' = (0, 1)$  であることを clock 系が  $|1\rangle_C$  にあると読み替える. clock 系が  $|0\rangle_C$  のとき, 着目系のハミルトニアンが  $H_S$ ,  $|1\rangle_C$  のとき, 着目系のハミルトニアンが  $H'_S$  であるとすれば, SC 系のハミルトニアンは

$$H_{SC} = H_S \otimes |0\rangle\langle 0| + H'_S \otimes |1\rangle\langle 1| \quad (5.25)$$

と書ける. 第一項と第二項は可換であることに留意すれば,

$$\exp(-\beta H_{SC}) = \exp(-\beta H_S \otimes |0\rangle\langle 0|) \exp(-\beta H'_S \otimes |1\rangle\langle 1|) \quad (5.26)$$

$$= \exp(-\beta H_S) \otimes |0\rangle\langle 0| + \exp(-\beta H'_S) \otimes |1\rangle\langle 1| \quad (5.27)$$

つまり,  $\exp(-\beta H_{SC})$  は clock 系の基底を  $|0\rangle, |1\rangle$  と取れば, ブロック対角化できる. 分配関数を計算するときは, それぞれのブロックで対角成分を足し合わせればよい. また, 仮定として, clock そのものの状態にエネルギー差は存在しないとす. つまり, clock だけなら状態変化のために仕事を要さない. つまり, この問題設定で考える  $w$  の条件は, 系が新たな平衡状態に達するためにどの程度仕事を要するかの条件である.

ここから, Thermo-majorization の処方により, この遷移が可能な必要十分条件を導出する. 実は, 表式の複雑さとは裏腹に, 始状態と終状態の着目系の状態がいずれも Gibbs 状態であるためにローレンツカーブは簡単になる.



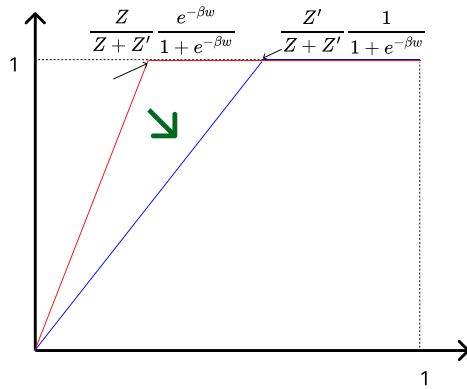


図 5.7 この問題での始状態、終状態のローレンツカーブ

この斜めの部分の傾きが,

$$(\text{始状態でのローレンツカーブ}) \geq (\text{終状態でのローレンツカーブ}) \quad (5.28)$$

となれば OK. 特に,  $y = 1$  との交点のみに注目すればよいから,

$$\frac{Z}{Z+Z'} \frac{e^{-\beta w}}{1+e^{-\beta w}} \leq \frac{Z'}{Z+Z'} \frac{1}{1+e^{-\beta w}} \quad (5.29)$$

$$w \geq \Delta F \quad (5.30)$$

ただし,  $F = -\beta^{-1} \ln Z$ ,  $F' = -\beta^{-1} \ln Z'$ ,  $\Delta F = F' - F$  である. これは, この章の冒頭の式 (5.8) と一致する. 遷移可能性の議論から, 熱力学第二法則が再現されるのは非常に興味深い.

## 第6章

# 量子情報における情報理論と Majorization

以下の内容は古典のエントロピーの内容と対応する。以下、考える系や補助系のヒルベルト空間は有限次元であるとする。また、 $\mathcal{L}(\mathcal{H})$  は  $\mathcal{H}$  上の線形演算子全体の集合とする。

### 6.1 CPTP 写像, ユニタリ写像

**定義 6.1.1** (CPTP 写像).  $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$  をそれぞれヒルベルト空間とする。  $\mathcal{E} : \mathcal{L}(\mathcal{H}_A) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_B)$  を線形写像とする。このとき、 $\mathcal{E}$  が **Trace preserving (TP)** であるとは、

$$\forall \rho \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A) \quad \text{Tr}(\rho) = \text{Tr}(\mathcal{E}(\rho)) \quad (6.1)$$

をみたすことをいう。また、 $\mathcal{E}$  が **positive** であるとは、

$$\forall \rho (\geq 0) \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A) \quad \mathcal{E}(\rho) \geq 0 \quad (6.2)$$

であることをいう。

$$\forall n \in \mathbb{N} \quad (\mathcal{E} \otimes \mathcal{I}_n) : \mathcal{L}(\mathcal{H}_A) \otimes \mathbb{C}^n \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_B) \otimes \mathbb{C}^n \quad (6.3)$$

が、 $(\mathcal{E} \otimes \mathcal{I}_n) \geq 0$  をみたすとき、 $\mathcal{E}$  は **Completely positive (CP)** であるという。CP かつ TP な写像を **CPTP 写像** という。

**定義 6.1.2** (ユニタリ写像).  $\mathcal{H}$  をヒルベルト空間とする。  $\mathcal{E} : \mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$  を線形写像とする。  $\mathcal{E}$  がユニタリ写像であるとは、 $\mathcal{E}$  が

$$\mathcal{E}(I) = I \quad (6.4)$$

をみたすことをいう。

ユニタリ写像は、古典の情報理論でいうところの 2 重確率遷移行列に相当する。正直な話、もっとマシな名前はなかったのかは思う。

### 6.2 von Neumann エントロピーと量子 KLD

**定義 6.2.1** (von Neumann エントロピー).  $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$  とする。このとき、

$$S_1(\rho) = -\text{Tr}[\rho \ln \rho] \quad (6.5)$$

を von Neumann エントロピーという.

密度行列はエルミートなので, ユニタリ行列で対角化できる. つまり,  $\mathcal{H}$  のある正規直交基底  $\{\phi_i\}_i$  をうまく持ってくれば,  $\rho = \sum_i p_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$  とかける. このとき, von Neumann エントロピーは, Shannon エントロピーと一致する. 量子系の情報理論において古典系と異なる点の一つとして, 状態が非可換であることが挙げられる. また, Shannon エントロピーの性質から,

$$0 \leq S_1(\rho) \leq \ln d \quad (\forall \rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})) \quad (6.6)$$

が成立する. また,  $\text{Tr}$  の循環性から, 任意のユニタリ演算子  $U$  に対して,  $S_1(U\rho U^\dagger) = S_1(\rho)$  が成立する.

**定義 6.2.2.** 量子 Kullback-Leibler divergence  $\rho, \sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$  とする. このとき,

$$S_1(\rho||\sigma) = \text{Tr}[\rho \ln \rho - \rho \ln \sigma] \quad (6.7)$$

を量子 Kullback-Leibler divergence という.

証明は複雑 (らしい. 追ったことはない) なので省略するが, 量子 KLD に対しても単調性が成立する.

**定理 6.2.3.**  $\rho, \sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ ,  $\Lambda : \mathcal{S}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{H})$  とする. このとき,

$$S_1(\rho||\sigma) \geq S_1(\Lambda(\rho)||\Lambda(\sigma)) \quad (6.8)$$

が成立する.

また, 以下で使うので, 量子における  $\alpha$ -Rényi divergence のうち,  $\alpha = 0, \infty$  の場合のみ定義しておく.

**定義 6.2.4.** 量子  $\alpha$ -Rényi divergence

$$S_0(\rho||\sigma) = -\ln[\text{Tr}[P_\rho\sigma]] \quad (6.9)$$

$$S_\infty(\rho||\sigma) = \ln[\min \lambda | \rho \leq \lambda \sigma] \quad (6.10)$$

これらは以下を満たす.

$$S_0(\rho||\sigma) \leq S_1(\rho||\sigma) \leq S_\infty(\rho||\sigma) \quad (6.11)$$

また, これらも単調性をみたく. また, のちに必要になるので補題を一つ示しておく.

**補題 6.2.5.**  $S_\infty(\rho||\sigma) = 0 \Leftrightarrow \rho = \sigma$

*Proof.* ( $\Leftarrow$ ) は自明なので, ( $\Rightarrow$ ) を示す.  $\Delta = \sigma - \rho$  として,  $S_\infty$  の定義から  $\Delta$  は半正值である.  $\Delta \neq 0$  と仮定すると, 全ての固有値が 0 以上である上に, 少なくとも一つの固有値は正であることになり,  $\text{Tr}[\Delta] > 0$  となる. これは  $\text{Tr}[\rho] = \text{Tr}[\sigma]$  に矛盾する.  $\square$

### 6.3 Quantum majorization

量子状態に対しても Majorization を導入できる.  $\rho, \sigma \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$

定義 6.3.1 (Quantum majorization).  $\rho, \sigma \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  とし, これらのスペクトル分解を

$$\rho = \sum_i p_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|, \quad \sigma = \sum_i q_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad (6.12)$$

とする. このとき,  $\rho \prec \sigma$  であるとは,  $p \prec q$  であることをいう.

このとき, HLP の定理と同様な定理が成立する.

定理 6.3.2.  $\rho, \sigma \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  とする. 以下は全て同値.

1.  $\rho \prec \sigma$
2.  $\rho = \mathcal{E}(\sigma)$  を満たす CPTP ユニタリ写像  $\mathcal{E}$  が存在する.
3. あるユニタリ写像の列  $\{U_k\}$  と,  $\sum_k r_k = 1, r_k \geq 0$  をみたす数列  $\{r_k\}$  が存在して,

$$\rho = \sum_k r_k U_k \sigma U_k^\dagger \quad (6.13)$$

をみたす.

*Proof.* (1  $\Rightarrow$  2)  $\rho \prec \sigma$  をみたすとき,  $p \prec q$  が成立する. このとき, HLP の定理から, 2 重確率遷移行列  $T$  が存在して,  $p = Tq$  をみたす. このとき,

$$\mathcal{E}(\sigma) = \sum_{i,j} T_{ij} |\phi_i\rangle\langle\psi_j| \sigma |\psi_j\rangle\langle\phi_i| \quad (6.14)$$

というふうに  $\mathcal{E}$  を構成する. このとき,  $M_{ij} = \sqrt{T_{ij}} |\phi_i\rangle\langle\psi_j|$  とおくと, これは  $\sum_{i,j} M_{ij}^\dagger M_{ij} = I$  をみたす. よって, この  $\mathcal{E}$  は CPTP 写像である. ( $\because$  クラウス表現). よって OK.

(2  $\Rightarrow$  1)  $\mathcal{E}$  は CPTP ユニタリであるとし,  $T_{ji}$  を

$$T_{ji} = \langle\phi_j| \mathcal{E}(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) |\phi_j\rangle \quad (6.15)$$

とすると,  $\sum_i T_{ji} = \sum_j T_{ji} = 1, T_{ji} \geq 0$  であり,  $T_{ji}$  は 2 重確率遷移行列である. また, このとき  $q = Tp$  より,  $\sigma \prec \rho$

(3  $\Rightarrow$  2) は明らか. (ユニタリの混合は CPTP ユニタリ. )

(1  $\Rightarrow$  3) を示す.  $\rho \prec \sigma$  を仮定する. このとき, 2 重確率遷移行列  $T$  が存在して,  $p = Tq$  を満たす. Birkhoff の定理 (証明はラックス線形代数を参照. ) から, 置換行列  $P_k$  を用いて  $P_k = \sum_k r_k P_k$  をみたす. このとき,  $P_k$  を  $\{|\phi_k\rangle\}$  を入れ替える写像とし,  $\{|\phi_k\rangle\}$  を  $\{|\psi_k\rangle\}$  に変換する写像を  $V$  とすれば,

$$\rho = \sum_k r_k V P_k \sigma P_k V \quad (6.16)$$

この  $P_k V$  はユニタリなので, OK.

□

最後に, 状態遷移の必要条件, 十分条件について述べる.

定理 6.3.3 (状態遷移の必要条件).  $(\rho, \sigma) \prec (\rho', \sigma')$  ならば,

$$S_0(\rho' || \sigma') \leq S_0(\rho || \sigma), \quad S_\infty(\rho' || \sigma') \leq S_\infty(\rho || \sigma) \quad (6.17)$$

が成立する.

*Proof.* divergence の単調性による。(示していないけどね.) □

**定理 6.3.4** (状態遷移の十分条件).

$$S_\infty(\rho' || \sigma') \leq S_0(\rho || \sigma) \quad (6.18)$$

ならば,  $(\rho', \sigma') \prec (\rho, \sigma)$  が成立する.

*Proof.* 具体的に  $\rho' = \mathcal{E}(\rho)$ ,  $\sigma' = \mathcal{E}(\sigma)$  なる  $\mathcal{E}$  を実際に構成する. 具体的には, 測定をして得られた結果を基に状態を準備する.  $P_\rho$  を  $\rho$  の台への射影として,  $\{P_\rho, I - P_\rho\}$  で表される射影測定を行う. (それぞれを結果 0,1 と対応づけることにする.) Rényi 0-divergence が  $S_0(\rho || \sigma) = -\ln[\text{Tr}[P_\rho \sigma]]$  で与えられることを思い出せば,  $\rho, \sigma$  それぞれの状態について, 結果が 0,1 となる確率は

$$P(0|\rho) = 1, \quad P(1|\rho) = 0, \quad P(0|\sigma) = c, \quad P(1|\sigma) = 1 - c \quad (6.19)$$

と書ける. ただし,  $c = e^{-S_0(\rho || \sigma)}$  とした.  $c = 1$  ならば  $S_0(\rho || \sigma) = 0$  であり, 仮定から  $S_\infty(\rho || \sigma) = 0$  となる. 補題 6.2.5 から, このとき  $\rho' = \sigma'$  がいえるので, 入力によらず任意の状態を  $\rho'$  に写す写像を持ってくれば, これは CPTP. あとは  $c \neq 1$  の場合を考えればよい. 入力した状態に対して上で示した射影測定を行い, 測定の結果が 0 であれば  $\rho'$ , 1 であれば

$$\sigma'' := \frac{\sigma' - c\rho'}{1 - c} \quad (6.20)$$

を用意することにする.  $\sigma''$  が半正定値であることは,  $S_\infty(\rho' || \sigma') \leq S_0(\rho || \sigma)$  から,

$$\sigma'' \geq \frac{\sigma' - e^{-S_\infty(\rho' || \sigma')}\rho'}{1 - c} \geq 0 \quad (6.21)$$

から従う. ただし, 最後の不等号は  $S_\infty(\rho' || \sigma')$  の定義を用いた. これが  $\mathcal{E}(\sigma) = \sigma'$  を満たすことは簡単に示せる. □

## 第7章

# 量子熱力学

### 7.1 Gibbs 保存写像と Thermal Operation

5章の内容を量子系に拡張したい。その前に、この場合の free operation が何かを確認する。これは、実は古典論の場合ほど自明ではない。

十分大きな熱浴に浸かった系が時間発展するとき、その時間発展にはどのような条件が課されるだろうか？ この答えの一つは、すでに5章で示してある。つまり、**Gibbs 保存写像 (GPM)**( $Tp^G = p^G$  を満たす確率遷移行列、 $p^G$  は熱浴の温度に関する Gibbs 分布。)である。実は、もう一つ考えられる。つまり、熱浴と系の複合系を孤立系と見たとき、エネルギーが保存するという条件を考えたときも時間発展に拘束条件が発生する。これについて考察するため、新たに **Thermal Operation (TO)** なるクラスの操作を定義する。

**定義 7.1.1** ((古典)thermal operation). ある確率遷移行列  $T$  は、以下の条件を満たすとき、**exact thermal operation** とよぶ。

条件: ある有限次元の熱浴と着目系と熱浴の複合系に作用する、系全体のエネルギーを保存する 2 重確率遷移行列  $D$  が存在して、

$$T_{ij} = \sum_{a,b} D_{(i,a)(j,b)} p_b^{G,bath} \quad (7.1)$$

を満たす。ただし、 $D$  が系全体のエネルギーを保存するとは、 $D_{(i,a)(j,b)} \neq 0 \Rightarrow E_i^S + E_a^B = E_j^S + E_b^B$  を満たすことである。

また、ある確率遷移行列が **thermal operation** であるとは、着目系の同じハミルトニアンに対して exact thermal operation の列  $\{T_n\}$  が存在して、 $n \rightarrow \infty$  で  $T$  に収束することである。

実は、古典系においては TO と GPM が等価であることが知られている。[9] しかしながら、これは量子系では成立しない。以下ではこれを見ていく。以下で GPM, TO はすべて量子系での GPM, TO を指し、古典系での対応物を指す時はそれを明示することとする。

**定義 7.1.2** ((量子)Gibbs 保存写像). 系  $S$  のハミルトニアンを  $H_s$ 、熱浴の温度を  $\beta$  とする。系  $S$  上の CPTP 写像  $\mathcal{E}_S$  が Gibbs 保存であるとは、

$$\mathcal{E}(e^{-\beta H_s}) = e^{-\beta H_s} \quad (7.2)$$

をみたすことである。

**定義 7.1.3** ((量子)thermal operation). 系 S のハミルトニアンを  $H_S$ , 熱浴の温度を  $\beta$  とする. 系 S 上の CPTP 写像  $\mathcal{E}_S$  は, ある温度  $\beta$  の熱浴 (ハミルトニアンは  $H_B$ ) と対応する  $\rho_B^G = e^{-\beta H_B} / Z_B$  と複合系上のユニタリ演算子  $U$  が存在して

$$\mathcal{E}_S(\rho_S) = \text{Tr}_B [U \rho_S \otimes \rho_B^G U^\dagger] \quad (7.3)$$

$$[U, H_S + H_B] = 0 \quad (7.4)$$

を満たすとき, **exact thermal operation** という. また, 系 S 上の CPTP 写像  $\mathcal{E}_S$  は,  $\mathcal{E}_S$  に収束する exact thermal operation の列が存在するとき, **thermal operation** という.

TO と GPM の関係について考察する前に, TO についてもう少し掘り下げる. 今から考える物理系に対応するヒルベルト空間を  $\mathcal{H}$ ,  $G$  を対称群として,  $g \in G$  に対して  $U_g$  を  $\mathcal{H}$  を表現空間とする  $g$  の表現行列とする. このとき,  $\forall g \in G U_g \rho U_g^\dagger = \rho$  をみたすとき,  $\rho$  は **symmetric** であるという. これを満たさないとき,  $\rho$  は **asymmetric** であるという. また, **Covariant Operation** を

$$\forall g \in G \forall \rho U_g \mathcal{E}(\rho) U_g^\dagger = \mathcal{E}(U_g \rho U_g^\dagger) \quad (7.5)$$

を満たす  $\mathcal{E}$  とする. つまり, 表現行列による相似変換と  $\mathcal{E}$  が可換であるような変換を指す. このとき,  $\mathcal{F}$  を symmetric state,  $\mathcal{O}$  を covariant operations とすると, これはリソース理論としての資格があることが簡単にわかる.\*1このリソース理論  $(\mathcal{F}, \mathcal{O})$  を **resource theory of asymmetry** とよぶ. 例えば,  $G = U(1)$  として,  $U_t = e^{iHt}$  を表現とする. ( $H = \sum_i E_i |i\rangle\langle i|$  はハミルトニアン.) このとき, asymmetric state はコヒーレント状態に対応している. つまり, エネルギー固有状態から free operation を用いて重ね合わせを作ることには出来ない. また, thermal operation はエネルギー保存の制約のついた covariant operation のサブクラスである.

話を戻そう. 今から示すことは, 以下の2点である.

- TO  $\subset$  GPM
- $\exists \mathcal{E} \in \text{TO}$  s.t.  $\mathcal{E} \notin \text{GPM}$

つまり, TO  $\subsetneq$  GPM を示したい.

**命題 7.1.4.** TO  $\subset$  GPM

*Proof.*

$$\mathcal{E}(\rho_S^G) = \text{Tr}_B \left[ U \frac{e^{-\beta H_S}}{Z_S} \otimes \frac{e^{-\beta H_B}}{Z_B} U^\dagger \right] \quad (7.6)$$

$$= \frac{1}{Z_S Z_B} \text{Tr}_B \left[ e^{-\beta U(H_S + H_B)U^\dagger} \right] \quad (7.7)$$

$$= \frac{1}{Z_S Z_B} \text{Tr}_B \left[ e^{-\beta(H_S + H_B)} \right] \quad (7.8)$$

$$= \frac{e^{-\beta H_S}}{Z_S} = \rho_S^G \quad (7.9)$$

より,  $\mathcal{E}$  は TO  $\Rightarrow$   $\mathcal{E}$  は GPM. □

\*1 covariant operation の定義を2回用いればよい.

**命題 7.1.5.**  $\exists \mathcal{E} \in \text{TO}$  s.t.  $\mathcal{E} \notin \text{GPM}$

*Proof.* 先ほどの話から, Thermal operation はエネルギー固有状態をコヒーレント状態に写すことはできない. よって, エネルギー固有状態をその重ね合わせに写す GPM を構成してやれば OK. ハミルトニアンが  $H_S = E_0 |0\rangle\langle 0| + E_1 |1\rangle\langle 1|$  と書けるような 2 準位系を考える. ただし,  $E_0 < E_1$  とする.  $p_i = e^{-\beta E_i} / Z_S$ ,  $Z_S = \sum_{i=1,2}$  とし,  $\sigma = p_0^{-1}(\rho_S^G - p_1 |+\rangle\langle +|)$  とすれば, これは半正定値でトレースが 1 の演算子である. そこで  $\mathcal{E}$  を,

$$\mathcal{E}(\rho_S) = \langle 0 | \rho_S | 0 \rangle \sigma + \langle 1 | \rho_S | 1 \rangle |+\rangle\langle +| \quad (7.10)$$

とすれば,  $\mathcal{E}(\rho_S^G) = \rho_S^G$ ,  $\mathcal{E}(|1\rangle\langle 1|) = |+\rangle\langle +|$  となり, 構成できた.  $\square$

以上から, 量子系においては TO と GPM は操作のクラスとしては一致しないことが示された. これ以降は GPM を主に用いるが, 最後にこの symmetry まわりで面白い話を紹介しておく, インコヒーレントな状態に対して触媒系を加えて free operation を作用させても, 着目系はコヒーレントな状態になりえないことが知られている. (No-broadcasting theorem,[10]) インコヒーレント状態にどんな触媒系を考えようが, free operation で写している限りはコヒーレンスは生まれえない. 無駄なあがきなのである.

## 7.2 仕事のみたす不等式

以下では, 5 章での内容の量子系での対応物を紹介する. 古典の場合には, 「 $(p, q) \prec (p', q') \Leftrightarrow (p', q')$  のローレンツカーブが  $(p, q)$  のそれを上回る」といった強力な性質が成立していたものの, これは量子系に対しては一般には成立しない.

### 7.2.1 期待値に対する制限

古典系と同様に, 全体系は着目系 S, 仕事浴 W, clock 系 C からなる. clock 系の状態が  $|0\rangle$  のとき着目系のハミルトニアンが  $H_S$ , clock 系の状態が  $|1\rangle$  のとき着目系のハミルトニアンが  $H'_S$  と与えられるとすれば, 仕事浴のハミルトニアンを  $H_W$  とすれば, SCW 系のハミルトニアンは

$$H_{SC} = H_S \otimes |0\rangle\langle 0| + H'_S \otimes |1\rangle\langle 1| + H_W \quad (7.11)$$

とかける. このとき, SCW 系の Gibbs 状態は,

$$\rho_{SCW} = \rho_{SC} \otimes \rho_W \quad (7.12)$$

$$\rho_{SC} = \frac{Z_S}{Z_S + Z'_S} \rho_S^G \otimes |0\rangle\langle 0| + \frac{Z'_S}{Z_S + Z'_S} \rho'_S{}^G \otimes |1\rangle\langle 1| \quad (7.13)$$

とかける. 詳細については式 (5.26) を参照すれば追えるはずである.

また, 量子系での非平衡自由エネルギーをここで定義しておく.  $Z = \text{Tr}[e^{-\beta H}]$  を分配関数,  $F = -\beta^{-1} \ln Z$  を平衡自由エネルギーとする.  $\alpha = 0, 1, \infty$  に対して, 非平衡  $\alpha$ -自由エネルギーを

$$F_\alpha(\rho, H) = \frac{1}{\beta} S_\alpha(\rho || \rho^G) + F \quad (7.14)$$

と定義する. ただし,  $\rho^G$  は温度  $\beta$  に対する Gibbs 状態とする. 定義から,  $F_\alpha(\rho, H) \geq F$  が成立する. 1-自由エネルギーは  $F_1(\rho, H) = E - \beta^{-1} S_1(\rho)$  となり, ゆらぎの熱力学などでよく見る非平衡自由エネルギー



の表式と一致する。さて、本題にうつる。SCW 系の初期状態を

$$\rho = \rho_S \otimes |0\rangle\langle 0| \otimes \rho_W \quad (7.15)$$

としておく。これを SCW 系の GPM  $\mathcal{E}_{SCW}$  で写した状態  $\rho' = \mathcal{E}_{SCW}(\rho)$  が SW 系の状態を表す密度行列  $\rho'_{SW}$  と C 系の状態を表す密度行列  $|1\rangle\langle 1|$  のテンソル積で書けるとする。(最終的に clock 系の状態は  $|1\rangle\langle 1|$  になってほしいので至極まっとうな仮定である。)  $\rho'_S = \text{Tr}_W[\rho'_{SW}]$ ,  $\rho'_W = \text{Tr}_S[\rho'_{SW}]$  とかくとき、着目系 S が仕事浴 W から受けた仕事の期待値  $W$  を

$$W = \text{Tr}[(\rho_W - \rho'_W)H_W] \quad (7.16)$$

とかくことにする。また、 $S_1(\rho_W) = S_1(\rho'_W)$  を仮定することにする。これは、仕事浴が系全体のエントロピーの増減に関与しないようにするための仮定である。

$$S_1(\rho || \rho_{SCW}^G) = S_1(\rho_S || \rho_S^G) + \beta F_S + \ln(Z_S + Z'_S) + S_1(\rho_W || \rho_W^G) \quad (7.17)$$

$$S_1(\rho' || \rho_{SCW}^G) = S_1(\rho'_{SW} || \rho'_{SW}{}^G) + \beta F'_S + \ln(Z_S + Z'_S) \quad (7.18)$$

となる、ただし、 $\rho_{SCW}^G = \rho_S^G \otimes \rho_W^G$  であり、 $\rho_S^G$  は着目系のハミルトニアンが  $H_S$  のときの Gibbs 分布である。ここで、von Neumann エントロピーの劣加法性から、

$$S_1(\rho'_{SW} || \rho'_{SW}{}^G) = \text{Tr}[\rho'_{SW} \ln \rho'_{SW} - \rho'_{SW} \ln \rho'_{SW}{}^G] \quad (7.19)$$

$$= -S_1(\rho'_{SW}) - \text{Tr}[\rho'_{SW} \ln \rho_S^G] - \text{Tr}[\rho'_W \ln \rho_W^G] \quad (7.20)$$

$$\geq -S_1(\rho'_S) - S_1(\rho'_W) - \text{Tr}[\rho'_S \ln \rho_S^G] - \text{Tr}[\rho'_W \ln \rho_W^G] \quad (7.21)$$

$$= S_1(\rho'_S || \rho_S^G) + S_1(\rho'_W || \rho_W^G) \quad (7.22)$$

と計算できる。また、

$$S_1(\rho_W || \rho_W^G) - S_1(\rho'_W || \rho_W^G) = -S_1(\rho_W) + S_1(\rho'_W) - \text{Tr}[\rho_W \ln \rho_W^G] + \text{Tr}[\rho'_W \ln \rho_W^G] \quad (7.23)$$

$$= -\text{Tr}[\rho_W(-\beta H_W)] + \ln Z_W + \text{Tr}[\rho'_W(-\beta H_W)] - \ln Z_W \quad (7.24)$$

$$= \beta W \quad (7.25)$$

とかける。量子 KLD の単調性を思い出せば、

$$S_1(\rho || \rho_{SCW}^G) \geq S_1(\mathcal{E}_{SCW}(\rho) || \mathcal{E}_{SCW}(\rho_{SCW}^G)) = S_1(\rho' || \rho_{SCW}^G) \quad (7.26)$$

$$S_1(\rho_S || \rho_S^G) + \beta F_S + \ln(Z_S + Z'_S) + S_1(\rho_W || \rho_W^G) \geq S_1(\rho'_{SW} || \rho'_{SW}{}^G) + \beta F'_S + \ln(Z_S + Z'_S) \quad (7.27)$$

$$\geq S_1(\rho'_S || \rho_S^G) + S_1(\rho'_W || \rho_W^G) + \beta F'_S + \ln(Z_S + Z'_S) \quad (7.28)$$

$$S_1(\rho_W || \rho_W^G) - S_1(\rho'_W || \rho_W^G) - \beta \Delta F_S \geq S_1(\rho'_S || \rho_S^G) - \geq S_1(\rho_S || \rho_S^G) \quad (7.29)$$

$$\beta(W - \Delta F_S) \geq S_1(\rho'_S || \rho_S^G) - S_1(\rho_S || \rho_S^G) \quad (7.30)$$

となる。非平衡 1-自由エネルギーを用いれば、

$$W \geq F_1(\rho'_S, H'_S) - F_1(\rho_S, H_S) \quad (7.31)$$

とかける。これが求めたかった制限である。特に仕事の平均について知りたい場合、古典と量子に大きな差異はなく、結局のところは divergence の単調性やエントロピーの劣加法性などを用いて計算しているだけである。また、熱力学第一法則を年頭に置けば、着目系の吸熱は

$$Q = \text{Tr}[H'_S \rho'_S] - \text{Tr}[H_S \rho_S] - W \quad (7.32)$$

と置くのが自然である。先の不等式を少し変形すれば,

$$S_1(\rho'_S) - S_1(\rho_S) \geq \beta Q \quad (7.33)$$

となり, Clausius の不等式が再現される。ここでは GPM を用いて仕事の満たす不等式, ないしは熱力学第二法則を導出したが, TO をだいたい緩めたクラスの写像, つまり SCW 系と熱浴 B を合わせた合成系でエネルギーの期待値が保存されるような写像で写しても同様の関係式が得られることが知られている。

### 7.3 Single-shot での仕事の制限

以下では, single-shot での仕事の制限を見ていく。念頭においておくのは, 5 章での議論なので, まだ読んでないならばそちらを参照されたい。前節の議論では  $H_W$  の形を具体的に与えなかったが, 古典系での議論から, 以下のように与える。

$$H_W = E_i |i\rangle\langle i| + E_f |f\rangle\langle f|, \quad E_i - E_f = w \quad (7.34)$$

また, 考える系は, 前節のように SCW の複合系とし, 初期状態と終状態でハミルトニアンが異なるような系を考える。このような場合について,  $w$  の仕事を消費することによる遷移可能性を以下のように定義する。

**定義 7.3.1** (Single-shot の仕事による補助ありの遷移可能性).  $w \in \mathbb{R}$  とし, 初期状態でのハミルトニアンを  $H_S$ , 終状態でのハミルトニアンを  $H'_S$  とする。ある SCW 系に関する GPM が存在して,

$$\mathcal{E}_{SCW}(\rho_S \otimes |0\rangle\langle 0| \otimes |i\rangle\langle i|) = \rho'_S \otimes |1\rangle\langle 1| \otimes |f\rangle\langle f| \quad (7.35)$$

をみたすとき,  $\rho_S$  は  $\rho'_S$  に  $w$ -assisted state transformable であるといい,  $\rho_S \xrightarrow{w\text{-assisted}} \rho'_S$  とかく。

このとき, 以下が従う。

**定理 7.3.2** (遷移可能性の必要条件, 十分条件). 1. (必要条件)

$\rho_S \xrightarrow{w\text{-assisted}} \rho'_S$  ならば,  $\alpha = 0, 1, \infty$  に対して

$$\beta(w - \Delta F_S) \geq S_\alpha(\rho'_S || \rho_S^G) - S_\alpha(\rho_S || \rho_S^G) \quad (7.36)$$

2. (十分条件)

$$\beta(w - \Delta F_S) \geq S_\infty(\rho'_S || \rho_S^G) - S_0(\rho_S || \rho_S^G) \quad (7.37)$$

ならば  $\rho_S \xrightarrow{w\text{-assisted}} \rho'_S$

*Proof.*  $\rho_W^G$  は,

$$\rho_W^G = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z_W} |i\rangle\langle i| + \frac{e^{-\beta E_f}}{Z_W} \quad (7.38)$$

とかける。(ただし,  $Z_W = e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_f}$ .) よって,  $\alpha = 0, 1, \infty$  のとき,

$$S_\alpha(\rho || \rho_{SCW}^G) = S_\alpha(\rho_S || \rho_S^G) + \beta F_S + \ln(Z_S + Z'_S) + \beta E_i + \ln Z_W \quad (7.39)$$

$$S_\alpha(\rho' || \rho_{SCW}^G) = S_\alpha(\rho'_S || \rho_S^G) + \beta F'_S + \ln(Z_S + Z'_S) + \beta E_f + \ln Z_W \quad (7.40)$$

とかける。必要条件は, 量子  $\alpha$ -divergence の単調性から従う。十分条件は, 定理 6.3.4 から  $S_\infty(\rho || \rho_{SCW}^G) \geq S_0(\rho' || \rho_{SCW}^G)$  ならば  $\rho \rightarrow \rho'$  は可能である。ここから同様にすれば所与の不等式を得る。□

系として以下が得られる.

系 7.3.3.

$$\rho_S \xrightarrow{w\text{-assisted}} \rho_S^G \Leftrightarrow -\beta w \leq S_0(\rho_S || \rho_S^G) \quad (7.41)$$

*Proof.* 定理に対して,  $H_S = H'_S$ ,  $\rho'_S = \rho_S^G$  とすれば OK.  $\square$

系 7.3.4.

$$\rho_S^G \xrightarrow{w\text{-assisted}} \rho'_S \Leftrightarrow \beta w \geq S_\infty(\rho'_S || \rho_S^G) \quad (7.42)$$

*Proof.* 定理に対して,  $H_S = H'_S$ ,  $\rho_S = \rho_S^G$  とすれば OK.  $\square$

これらはそれぞれ 5.2.1 節, 5.2.2 節に対応する.

系 7.3.5.

$$\rho_S^G \xrightarrow{w\text{-assisted}} \rho_S^G \Leftrightarrow w \geq \Delta F_S \quad (7.43)$$

*Proof.*  $\rho'_S = \rho_S^G$ ,  $\rho_S = \rho_S^G$  とすれば OK.  $\square$

これらは, 結果的に 5 と同じ結果を与える. 古典とは異なる道筋で示したように見えるかもしれないが, 古典の場合も結局は状態遷移の必要条件, 十分条件が定理 4.3.4 で与えられるのでローレンツカーブの性質が使えずとも古典と同じ結果が得られるのは必然な気がする.

## 付録 A

# Hardy-Littlewood-Polya の定理の証明

この補遺では, Hardy-Littlewood-Polya の定理を証明する. 主張をまとめておく.

**定理 A.0.1.** (Hardy-Littlewood-Polya)  $p, p' \in \mathcal{P}_d$  とする. 以下は全て同値.

1.  $p' \prec p$
2.  $\forall t \in \mathbb{R} \quad \sum_{i=1}^d |p'_i - t| \leq \sum_{i=1}^d |p_i - t|$
3. 任意の下に凸な関数  $f$  に対して,  $\sum_{i=1}^d f(p'_i) \leq \sum_{i=1}^d f(p_i)$
4. 2重確率遷移行列  $T$  が存在して,  $p' = Tp$  が成立する.

*Proof.* 4  $\Rightarrow$  3 は  $f$ -divergence の凸性から従う. 3  $\Rightarrow$  2 は  $f(x) = |x - t|$  が下に凸であることから従う.

2  $\Rightarrow$  1 を示す.  $t = p_k^\downarrow$  とおく. このとき,

$$\sum_{i=1}^d |p_i - t| = \sum_{i=1}^k (p_i^\downarrow - t) - \sum_{i=k+1}^d (p_i^\downarrow - t) \quad (\text{A.1})$$

$$= 2 \sum_{i=1}^k p_i^\downarrow - 1 + (d - 2k)t \quad (\text{A.2})$$

$$\sum_{i=1}^d |p'_i - t| \geq \sum_{i=1}^k (p'_i - t) - \sum_{i=k+1}^d (p'_i - t) \quad (\text{A.3})$$

$$= 2 \sum_{i=1}^k p_i^{\prime\downarrow} - 1 + (d - 2k)t \quad (\text{A.4})$$

$$(\text{A.5})$$

より, 仮定の不等式から

$$\forall k \in \{1, 2, \dots, d\} \quad \sum_{i=1}^k p_i^\downarrow \geq \sum_{i=1}^k p_i^{\prime\downarrow} \quad (\text{A.6})$$

が示せた. 最後に, 1  $\Rightarrow$  4 を示す. このために, 以下の定理を示す.

**定理 A.0.2.** (超平面分離定理)  $A, B \subset \mathbb{R}^n$  を, 互いに素な空でない凸部分集合とする. このとき, ある  $v \in \mathbb{R}^n (v \neq \mathbf{0}), c \in \mathbb{R}$  が存在して,

$$\langle x, v \rangle \geq c, \quad \langle y, v \rangle \leq c \quad (\text{A.7})$$

を満たす.

これを以下で証明するが, そのために以下の補題を先に示す.

**補題 A.0.3.**  $K$  を  $\mathbb{R}^n$  の空でない閉凸部分集合とする. 集合  $K$  について, 最小ノルムを持つベクトルは一意に存在する.

*Proof.* (補題)  $K$  上のベクトル  $X$  のノルムの下限を  $\delta = \inf |x| \mid x \in K$  とする. (ノルムは 0 以上なので, 下界が存在し, 実数の連続性から下限の存在も言える.)  $|x_j|$  となるような  $K$  上の数列  $\{x_j\}$  について,  $K$  の凸性から  $\frac{x_i + x_j}{2} \in K$  が成立する. また,

$$\left| \frac{x_i + x_j}{2} \right| \geq \inf |x| = \delta \quad (\text{A.8})$$

より,

$$|x_i - x_j|^2 = 2|x_i|^2 + 2|x_j|^2 - |x_i + x_j|^2 \leq 2|x_i|^2 + 2|x_j|^2 - 4\delta^2 \quad (\text{A.9})$$

となる. この右辺の極限は 0 なので,  $|x_i - x_j| \rightarrow 0$  となる. つまり, これはコーシー列であり,  $K$  は完備(らしい)なので, その収束先は  $K$  の中に入る. よって,  $\delta$  はベクトル  $x \in K$  の最小ノルム.  $r \in K$  もノルムが  $\delta$  ならば, 同様の計算により,

$$|x - y|^2 \leq 2|x|^2 + 2|y|^2 - 4\delta^2 = 0 \quad (\text{A.10})$$

となるので,  $x = y$  である. □

*Proof.* (超平面分離定理) 互いに素な空でない凸集合  $A, B$  を考えたとき,  $K$  を

$$K = A + (-B) = \{x - y \mid x \in A, y \in B\} \quad (\text{A.11})$$

とする. この  $K$  も凸集合であり, 交わりがないことから  $0 \in K$  である.  $K$  の閉包  $\bar{K}$  は凸だから,  $\bar{K}$  上で最小のノルムを持つベクトル  $v \in \bar{K}$  が一意に定まる.  $\bar{K}$  の凸性から, 任意の  $u \in K$  に対して

$$0 \leq \forall t \leq 1 \quad v + t(u - v) \in \bar{K} \quad (\text{A.12})$$

が成立する. よって,

$$|v|^2 \leq |v + t(u - v)|^2 = |v|^2 + 2t \langle v, u - v \rangle + t^2 |u - v|^2 \quad (\text{A.13})$$

$$t|u - v|^2 + 2 \langle v, u \rangle - 2|v|^2 + t|u - v|^2 \geq 0 \quad (\text{A.14})$$

がいえる.  $t \rightarrow 0$  の極限を取れば,

$$\langle v, u \rangle = \langle v, x - y \rangle \geq |v|^2 \quad (\text{A.15})$$

$$\inf_{x \in A} \langle x, v \rangle \geq |v|^2 + \sup_{y \in B} \langle y, v \rangle \quad (\text{A.16})$$

$|v|^2 \neq 0$  より OK. □

Hardy-Littlewood-Polya の定理の (1  $\Rightarrow$  4) の部分の証明に戻る. 一旦考える全体の集合を  $\mathbb{R}^n$  まで拡張する. 2重確率遷移行列  $T$  の法を動かすことで,  $Tp$  の形で書けるようなベクトルの集合を  $S$  とすると,  $S$  は凸

集合であることが簡単に確かめられる。このとき、 $p' \notin S$ を仮定して矛盾を導きたい。 $p'$ もやはり凸集合であることに留意すれば、超平面分離定理から、あるベクトル $r$ に対してある $z \in S$ が存在して

$$r^T z < r^T p \quad (\text{A.17})$$

と出来る。 $r, p$ を降順に並べなおす置換行列をそれぞれ $P, Q$ として、 $q' = Pp'$ とおき、 $z = PQp$ と選べば、

$$r^{\downarrow T} (p^{\downarrow} - q') < 0 \quad (\text{A.18})$$

と書ける。ここで、 $q'$ は $p'$ を置換しただけなので、 $q' \prec p$ をみます。一方、任意に選んだ、降順に並んだ $n$ 次元ベクトル $w$ に対して、

$$w^T (p^{\downarrow} - q') = \sum_{i=1}^n w_i (p_i^{\downarrow} - q'_i) \quad (\text{A.19})$$

$$= \sum_{i=1}^n (w_i - w_{i+1}) \sum_{k=1}^i (p_k^{\downarrow} - q'_k) \geq 0 \quad (\text{A.20})$$

と描きなおせる。これは、 $w = r^{\downarrow}$ とすれば矛盾する。よって、4が示せた。□

## 参考文献

- [1] 沙川貴大. 非平衡統計力学—ゆらぎの熱力学から情報熱力学まで—. 共立出版, 2022.
- [2] 齊藤圭司. ゆらぐ系の熱力学: 非平衡統計力学の発展. サイエンス社, 2022.
- [3] Takahiro Sagawa. Entropy, divergence, and majorization in classical and quantum thermodynamics. Springer, 2020.
- [4] 清水明. 熱力学の基礎. 東京大学出版会, 2021.
- [5] 田崎晴明. 統計力学. 培風館, 2008.
- [6] 小川 朋宏他石坂 智. 量子情報科学入門. 共立出版, 2012.
- [7] Gilad Gour Eric Chitambar. Quantum resource theories. arXiv:1806.06107v3, 2019.
- [8] Jakob Yngvason Elliott H. Lieb. The mathematical structure of the second law of thermodynamics. arXiv:math-ph/0204007v2, 2002.
- [9] Naoto Shiraishi. Two constructive proofs on d-majorization and thermo-majorization. *J. Phys. A: Math. Theor.* 53 425301, 2020.
- [10] Matteo Lostaglio and Markus P. Müller. Coherence and asymmetry cannot be broadcast. *PHYSICAL REVIEW LETTERS* 123, 020403, 2019.