

# 熱力学リソース理論

## 1 熱力学、統計力学とは

熱力学とは、考える系の内部エネルギーや流入する熱、系のする仕事の関係を考察する学問です。主に巨視的(アボガドロ数  $N_A = 6.02 \times 10^{23}$  程度の構成要素をもつ)な対象で、平衡状態という典型的な状態にあるような系に対する予言が可能な体系ですが、近年では特にゆらぎの効果が無視できないような小さな系に対しても拡張することが出来ることがわかっています。また、統計力学は微視的な物理法則から巨視的な法則を導き出す学問です。

### 1.1 ギブス分布と等温過程

ある微視的状態のエネルギーが  $E_i$  であるとき、系がその状態  $i$  を取る確率は  $e^{-\beta E_i}$  に比例します。ただし、 $\beta = \frac{1}{k_B T}$  は逆温度です ( $k_B$  はボルツマン定数)。これを規格化することで、系の状態について確率分布  $p_i^G = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}$  が得られます。これをカノニカル分布といいます。

また、等温過程で系が変化するとき、系から取り出せる仕事  $W$  と系の自由エネルギー変化の間には、

$$W \leq -\Delta F \quad (1)$$

の関係が成立します。これは、熱力学第二法則から出てくる定理の一つです。

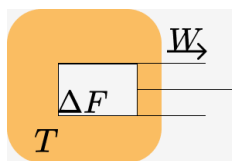


図 1: 等温過程で系から取り出せる仕事の上限は  $-\Delta F$ 。

## 2 リソース理論

リソース理論とは、系が取りうる状態のうち、フリーな(自由に得られる)状態とフリーな(自由に行える)操作を設定したとき、2状態間の遷移可能性を議論することでリソース状態と自由に得られる状態を分類する枠組みです。熱力学リソース理論における可能な操作はギブス分布を保存する写像です。この枠組みにより、情報理論の観点から式(1)と類似した式を導くことができます。

### 2.1 Thermo-Majorization

Majorization は、確率分布間に定義される二項関係で、確率分布間に(擬)順序を与えます。具体的には、 $p \prec q$  ( $q$  は  $p$  を majorize するという。)であるとき、 $q$  の方が  $p$  よりも、確率分布の偏りが大きいと言えます。このとき、熱浴の温度が無限大のときの平衡分布を保存する、 $q \rightarrow p$  の遷移が存在することが言えます。また、この Majorization の拡張である Thermo-majorization を用いれば、熱浴の温度が有限温度のときの平衡分布を保存する写像で  $q \rightarrow p$  の遷移が可能であるかを議論できます。

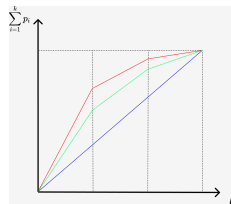


図 2: 確率分布と対応するローレンツカーブ。確率分布の成分を降順に並べたあと、前から  $k$  番目の成分まで足し合わせたものが縦軸。 $p \prec q$  は、 $q$  のローレンツカーブが  $p$  のローレンツカーブを上回ることと同値。

### 2.2 Majorization と第二法則

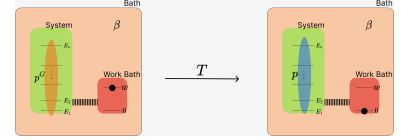


図 3: 考えるセッティング。系は右の仕事浴から仕事を受けながら状態遷移する。ただし、この状態遷移は系と仕事浴のギブス分布を保存する。

図のような系を考えます。仕事浴に  $w$  の仕事をされたときに、系の確率分布が  $p^G$  (平衡分布) から  $p$  (非平衡分布) に遷移できるかを議論します。このとき、このような遷移が可能な条件として、

$$w \geq kT S_\infty(p||p^G) \quad (2)$$

が得られます。ただし、 $S_\alpha(p||p^G)$  は Rényi  $\alpha$  ダイバージェンスです。 ( $\alpha = \infty$ ,  $p^G$  はギブス分布) これは、式(1)の情報理論的な表現になります。同様にして、非平衡状態から平衡状態に緩和するとき系から取り出せる仕事は

$$w \leq kT S_0(p||p^G) \quad (3)$$

となります。

### 参考文献

- [1] Sagawa, T., "Entropy, divergence, and Majorization in classical and quantum thermodynamics", Springer
- [2] Cover, T, Thomas, J., 情報理論 基礎と広がり 第2版, 共立出版
- [3] Chitambar, E., Gour, G., Quantum Resource Theories, arXiv:1806.06107