

Force-current structure in classical and open quantum systems

大上由人

2025年11月21日

Yoshimura, et al. PRR2023,2025 のまとめ。

第Ⅰ部 古典系

古典系の話を知っていた方が面白いので古典系の話もしておく。

1 マスター方程式

1.1 マスター方程式

マルコフジャンプ過程における時間発展はマスター方程式を用いて記述される：

$$\frac{dp_n(t)}{dt} = \sum_m W_{nm} p_m(t) \quad (1.1)$$

$$W_{nm} = \sum_\nu W_{nm}^\nu \quad (1.2)$$

ただし、 W_{nm}^ν は熱浴 ν との相互作用による遷移レートである。また、局所詳細つり合い条件

$$W_{nm}^\nu e^{-\beta_\nu E_n} = W_{mn}^\nu e^{-\beta_\nu E_m} \quad (n \neq m) \quad (1.3)$$

を課す。

局所詳細つり合い条件の下で、エントロピー生成は以下のように書けることが知られている。

$$\dot{\sigma}(t) = \sum_{n \neq m} \sum_\nu W_{nm}^\nu p_m(t) \ln \frac{W_{nm}^\nu p_m(t)}{W_{mn}^\nu p_n(t)} \quad (1.4)$$

$$(1.5)$$

これは KL ダイバージェンスの形をしており、その非負性が示される。

1.2 グラフによる記法

グラフによるマルコフジャンプ過程の記述をまとめておく。

記号

- 頂点: $n \in \{1, 2, \dots, N\}$
- 有向辺: $e \in \{1, 2, \dots, E\}$
- 時刻 t における分布: $\mathbf{p}(t) = (p_1(t), p_2(t), \dots, p_N(t))^T$
- node の始点と終点: $\iota(e), \iota'(e)$
- 向きが逆の辺: $-e$

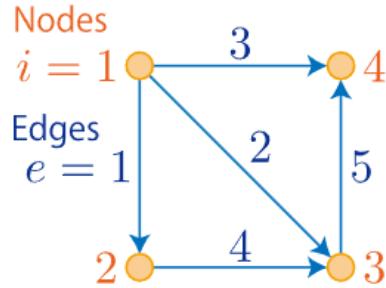


図 1 グラフの例

グラフの構造は行列 ∇^\top を用いて

$$(\nabla^\top)_{ne} = \begin{cases} +1 & (n = \iota'(e)) \\ -1 & (n = \iota(e)) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (1.6)$$

により表される。ただし \top は転置を表す。 $\iota(e) \rightarrow \iota'(e)$ の向きのフラックスを

$$K_e(p) = W_e p_{\iota(e)} \quad (1.7)$$

$$(1.8)$$

と書く。また、 $\iota'(e) \rightarrow \iota(e)$ の向きのフラックスを $K_{-e}(p)$ と書く。以下、 $K_{\pm e}(p) > 0$ を仮定する。このとき確率流は

$$J_e(p) = K_e(p) - K_{-e}(p) \quad (1.9)$$

と書ける。頂点 n への確率の流入は $\sum_e (\nabla^\top)_{ne} J_e(p)$ となるので

$$\frac{dp_n(t)}{dt} = \sum_e (\nabla^\top)_{ne} J_e(p(t)) \quad (1.10)$$

が得られる。

辺 e に対応する力学的な力を

$$F_e(p) = \ln \frac{K_e(p)}{K_{-e}(p)} \quad (1.11)$$

により定義する。局所詳細つり合いを仮定すると、これは辺 e での遷移によるエントロピー変化に対応する。このときエントロピー生成率は

$$\dot{\sigma}(p) = \sum_e J_e(p) F_e(p) = J(p)^\top F(p) \quad (1.12)$$

と表せる。(面倒になってきたので以下適宜 p を省略する。)

辺に沿った Onsager 係数を

$$l_e = \frac{J_e}{F_e} = \frac{K_e - K_{-e}}{\ln K_e - \ln K_{-e}} \quad (1.13)$$

と定義する。このとき、 $L = \text{diag}(l_1, l_2, \dots, l_E)$ とおくと、これは正值行列である。新たな内積とノルムを

$$\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle_L = \mathbf{u}^\top L \mathbf{v} = \sum_e l_e u_e v_e \quad (1.14)$$

$$\|\mathbf{u}\|_L = \sqrt{\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle_L} = \sqrt{\sum_e l_e u_e^2} \quad (1.15)$$

と定義する。このとき、エントロピー生成率は

$$\dot{\sigma} = \sum_e J_e F_e \quad (1.16)$$

$$= \sum_e l_e F_e^2 \quad (1.17)$$

$$= \|\mathbf{F}\|_L^2 \quad (1.18)$$

と書ける。

詳細つり合いを満たすような平衡分布 p^{eq} が存在する場合を考える。このとき、

$$K_e(p^{\text{eq}}) = K_{-e}(p^{\text{eq}}) \quad (1.19)$$

である。このとき、

$$F_e(p) = \ln \frac{K_e(p)}{K_{-e}(p)} \quad (1.20)$$

$$= \ln \frac{K_e(p)/K_e(p^{\text{eq}})}{K_{-e}(p)/K_{-e}(p^{\text{eq}})} \quad (1.21)$$

$$= -(\nabla \phi)_e \quad (1.22)$$

$$\phi_n = \ln \frac{p_n}{p_n^{\text{eq}}} \quad (1.23)$$

と書ける。

(\cdot)

$$\sum_n \nabla_{en} \ln \frac{p_n}{p_n^{\text{eq}}} = \nabla_{e\iota(e)} \ln \frac{p_\iota(e)}{p_\iota(e)^{\text{eq}}} + \nabla_{e\iota'(e)} \ln \frac{p_{\iota'(e)}}{p_{\iota'(e)}^{\text{eq}}} \quad (1.24)$$

$$= -\ln \frac{p_\iota(e)}{p_\iota(e)^{\text{eq}}} + \ln \frac{p_{\iota'(e)}}{p_{\iota'(e)}^{\text{eq}}} \quad (1.25)$$

$$= \ln \frac{K_e(p)/K_e(p^{\text{eq}})}{K_{-e}(p)/K_{-e}(p^{\text{eq}})} \quad (1.26)$$

□

すなわち、力をポテンシャルの勾配として表せる。

第 II 部

量子系

2 GKS 方程式

2.1 GKS 方程式の導入

開放量子系における Markov 的な時間発展は GKS 方程式 (量子マスター方程式) により記述される。まずは GKS 方程式を現象論的に導入する。^{*1} 開放量子系における時間発展は CPTP 対応 (完全正値性、トレース保存を満たす対応) Λ によりにより記述される。任意の CPTP 対応は Kraus 表現

$$\Lambda(\rho) = \sum_k \hat{M}_k \hat{\rho} \hat{M}_k^\dagger \quad (2.1)$$

$$\sum_k \hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k = \hat{I} \quad (2.2)$$

で表される。この \hat{M}_k を Kraus 演算子と呼ぶ。

ここで、時間発展を微小時間 Δt で刻んで考える。特に Markov 性を満たすような Kraus 演算子を現象論的に導入する。

$$\hat{M}_0 = \hat{I} + (\hat{K} - i\hat{H})\Delta t \quad (2.3)$$

$$\hat{M}_k = \hat{L}_k \sqrt{\Delta t} \quad (k \geq 1) \quad (2.4)$$

$$\sum_k \hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k = \hat{I} \quad (2.5)$$

とおく。ただし、 \hat{K}, \hat{H} はエルミート演算子である。また、 \hat{L}_k は相互作用を特徴づける演算子である。^{*2} 直感的には \hat{M}_0 は event が何も起こらなかったことに対応し、 \hat{M}_k は event k が起きたことに対応する。これを用いて、

$$\hat{\rho}(t + \Delta t) = \sum_k \hat{M}_k \hat{\rho}(t) \hat{M}_k^\dagger \quad (2.6)$$

$$= \hat{M}_0 \hat{\rho}(t) \hat{M}_0^\dagger + \sum_{k \geq 1} \hat{M}_k \hat{\rho}(t) \hat{M}_k^\dagger \quad (2.7)$$

$$= (\hat{I} + (\hat{K} - i\hat{H})\Delta t) \hat{\rho}(t) (\hat{I} + (\hat{K} + i\hat{H})) \Delta t \quad (2.8)$$

$$+ \sum_{k \geq 1} \hat{L}_k \hat{\rho}(t) \hat{L}_k^\dagger \Delta t \quad (2.9)$$

$$= \hat{\rho}(t) - i[\hat{H}, \hat{\rho}(t)]\Delta t + \left(\sum_{k \geq 1} \hat{L}_k \hat{\rho}(t) \hat{L}_k^\dagger + \hat{K} \hat{\rho}(t) + \hat{\rho}(t) \hat{K} \right) \Delta t + o(\Delta t) \quad (2.10)$$

^{*1} ミクロな導出はここでは行わない。

^{*2} 古典 master 方程式の遷移レートに対応する。

となるから、

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = -i[\hat{H}, \hat{\rho}(t)] + \sum_{k \geq 1} \hat{L}_k \hat{\rho}(t) \hat{L}_k^\dagger + \hat{K} \hat{\rho}(t) + \hat{\rho}(t) \hat{K} \quad (2.11)$$

が得られる。第一項は von Neumann 方程式に対応し(ユニタリ発展)、それ以降の項は環境との相互作用に対応する(非ユニタリ発展)。完全性条件を用いることで \hat{K} を消去することができる。

$$\sum_{k \geq 0} \hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k = \hat{I} + (2\hat{K} + \sum_{k \geq 1} \hat{L}_k^\dagger \hat{L}_k) \Delta t = \hat{I} \quad (2.12)$$

であるから、

$$K = -\frac{1}{2} \sum_{k \geq 1} \hat{L}_k^\dagger \hat{L}_k \quad (2.13)$$

を得る。したがって、GKSL 方程式は反交換子を用いて

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = -i[\hat{H}, \hat{\rho}(t)] + \sum_{k \geq 1} \left(\hat{L}_k \hat{\rho}(t) \hat{L}_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{L}_k^\dagger \hat{L}_k, \hat{\rho}(t) \} \right) \quad (2.14)$$

と書ける。これがよくみる形である。このとき \hat{L}_k を Lindblad 演算子(jump 演算子)と呼ぶ。

2.2 記法の整理

以下、GKSL 方程式

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H, \rho] + \sum_{\mu \in \mathcal{L}_L} D_\mu[\rho] \quad (2.15)$$

$$D_\mu[\rho] = \sum_{\mu \in \mathcal{L}_L} [\gamma_\mu^+ (L_\mu \rho L_\mu^\dagger - \frac{1}{2} \{ L_\mu^\dagger L_\mu, \rho \}) + \gamma_\mu^- (L_\mu^\dagger \rho L_\mu - \frac{1}{2} \{ L_\mu L_\mu^\dagger, \rho \})] \quad (2.16)$$

に従う系を考える。ただし、 $\gamma_\mu^\pm \in \mathbb{R}$ はパラメータ、 L_μ は jump op. である。また、 $\mu \in \mathcal{L}_L$ は jump の添字である。Hamiltonian は

$$H = \sum_{\mu \in \mathcal{L}_H} (\zeta_\mu^* V_\mu + \zeta_\mu V_\mu^\dagger) \quad (2.17)$$

と表される。また、 $\mathcal{L} = \mathcal{L}_L \cup \mathcal{L}_H$ とし、³ S_μ を

$$S_\mu = \begin{cases} L_\mu & (\mu \in \mathcal{L}_L) \\ V_\mu & (\mu \in \mathcal{L}_H) \end{cases} \quad (2.18)$$

と定義する。

³ 便宜のため $\mathcal{L}_L \cap \mathcal{L}_H = \emptyset$ とする。

3 カレント

古典系において、カレントは系の時間発展やエントロピー生成率 (EPR) を記述するのに重要な役割を果たす。量子系においても同様にカレントを定義することができる。まず、Observable current と呼ばれる量を考える。

Def.Observable current

jump に対応する Observable current は

$$Q_\mu(\rho) = \gamma_\mu^+ \text{Tr}[L_\mu^\dagger L_\mu \rho] - \gamma_\mu^- \text{Tr}[L_\mu L_\mu^\dagger \rho] \quad (3.1)$$

で定義される。また、Hamiltonian に対応する Observable current は

$$Q_\mu(\rho) = \text{Tr}[\rho(-i\zeta_\mu V_\mu^\dagger + i\zeta_\mu^* V_\mu)] \quad (3.2)$$

で定義される。また、全 Observable current は

$$\vec{Q}(\rho) = \{Q_\mu(\rho)\}_{\mu \in \mathcal{L}_L \cup \mathcal{L}_H} \quad (3.3)$$

と表される。

jump に対応する Observable current は単位時間当たりの jump μ の正味の発生回数に対応する。また、Hamiltonian に対応する Observable current は我々がよく知っているカレント (粒子流、電流など) に対応する。^{*4}

また、それより抽象的な量として、Dynamical current と呼ばれる量も考えることができる。

Def.Dynamical current

jump に対応する Dynamical current は

$$J_\mu(\rho) = \frac{1}{2}(\gamma_\mu^+ L_\mu \rho - \gamma_\mu^- \rho L_\mu) \quad (3.4)$$

で定義される。また、Hamiltonian に対応する Dynamical current は

$$J_\mu(\rho) = i\zeta_\mu(\Pi_\mu^+ \rho + \rho \Pi_\mu^- - \Pi_\mu^+ \rho \Pi_\mu^-) \quad (3.5)$$

で定義される。ただし、 Π_μ^+ は $\text{Im } V_\mu$ への射影演算子であり、 Π_μ^- は $\text{Im } V_\mu^\dagger$ への射影演算子である。

これらは Observable current よりも抽象的な定義であるが^{*5}、これらは時間発展や Observable current を表現するのに便利である。実際、以下の関係式を示すことができる。

^{*4} ほげほげ

^{*5} 定義自体は GKSL 方程式での最適輸送から持ち込んでいるらしい。

Thm.

時間発展や Observable current は Dynamical current を用いて以下のように表される。

$$\frac{d\rho}{dt} = \sum_{\mu \in \mathcal{L}} ([J_\mu(\rho), S_\mu^\dagger] - [J_\mu^\dagger(\rho), S_\mu]) \quad (3.6)$$

$$Q_\mu(\rho) = \text{Tr}[J_\mu^\dagger(\rho)S_\mu] + \text{Tr}[J_\mu(\rho)S_\mu^\dagger] \quad (3.7)$$

Prf.

$$[J_\mu(\rho), V_\mu^\dagger] = i\zeta_\mu [\Pi_\mu^+ \rho (1 - \Pi_\mu^-) + \rho \Pi_\mu^-] V_\mu^\dagger + iV_\mu^\dagger [\Pi_\mu^+ \rho + (1 - \Pi_\mu^+) \rho V_\mu^-] \quad (3.8)$$

$$= i\zeta_\mu (\rho V_\mu^\dagger - V_\mu^\dagger \rho) \quad (3.9)$$

$$= i\zeta_\mu [\rho, V_\mu^\dagger] \quad (3.10)$$

を用いることで、

$$[J_\mu(\rho), V_\mu^\dagger] - [J_\mu^\dagger(\rho), V_\mu] = -i[\zeta_\mu V_\mu^\dagger + \zeta_\mu^* V_\mu, \rho] \quad (3.11)$$

が得られる。また、

$$[J_\mu(\rho), L_\mu^\dagger] = \frac{1}{2}\gamma_\mu^+ (L_\mu \rho L_\mu^\dagger - L_\mu^\dagger L_\mu \rho) + \frac{1}{2}\gamma_\mu^- (L_\mu^\dagger \rho L_\mu - \rho L_\mu L_\mu^\dagger) \quad (3.12)$$

を用いることで、

$$[J_\mu(\rho), L_\mu^\dagger] - [J_\mu^\dagger(\rho), L_\mu] = \gamma_\mu^+ \left(L_\mu \rho L_\mu^\dagger - \frac{1}{2}\{\rho, L_\mu^\dagger L_\mu\} \right) + \gamma_\mu^- \left(L_\mu^\dagger \rho L_\mu - \frac{1}{2}\{\rho, L_\mu L_\mu^\dagger\} \right) \quad (3.13)$$

が得られる。これらを合わせることで、時間発展の表式が得られる。 \square

4 内積構造

上で導いた時間発展の表式は双対構造を誘導する。dynamical current の空間とエルミート演算子の空間のそれぞれで内積を導入する。dynamical current の空間 $\mathfrak{J} := \text{opr}(H)^\mathcal{L} \ni A, B$ 上の内積を

$$\langle A, B \rangle := \sum_{\mu \in \mathcal{L}} (\text{Tr}[A_\mu^\dagger B_\mu] + \text{Tr}[A_\mu B_\mu^\dagger]) \in \mathbb{R} \quad (4.1)$$

で定義する。^{*6} また、エルミート演算子の空間 $\text{Herm}(H) \ni A, B$ 上の内積を

$$\langle A, B \rangle := \text{Tr}[AB] \in \mathbb{R} \quad (4.2)$$

^{*6} 実数になってくれるのは $\text{Tr}[X] = \overline{\text{Tr}[X]^*}$ と $z + z^* \in \mathbb{R}$ が成り立つため。

で定義する。

ここで、グラディエント $\nabla_{\mathbb{S}} : \text{Herm}(H) \rightarrow \mathfrak{J}$ を、

$$\nabla_{\mathbb{S}} A = \{[A, S_{\mu}]\}_{\mu \in \mathcal{L}} \quad (4.3)$$

と定義する。また、ダイバージェンス $\nabla_{\mathbb{S}}^* : \mathfrak{J} \rightarrow \text{Herm}(H)$ を、

$$\nabla_{\mathbb{S}}^* \mathbb{A} = \sum_{\mu \in \mathcal{L}} ([A_{\mu}, S_{\mu}^{\dagger}] - [A_{\mu}^{\dagger}, S_{\mu}]) \quad (4.4)$$

と定義する。このとき、これらは双対であることが示される。

(::)

$$\langle \nabla_{\mathbb{S}} A, \mathbb{B} \rangle = \sum_{\mu \in \mathcal{L}} (\text{Tr}[[A, S_{\mu}]^{\dagger} B_{\mu}] + \text{Tr}[[A, S_{\mu}] B_{\mu}^{\dagger}]) \quad (4.5)$$

$$= \sum_{\mu \in \mathcal{L}} (\text{Tr}[S_{\mu}^{\dagger} A - A S_{\mu}^{\dagger}] B_{\mu} + \text{Tr}[A S_{\mu} - S_{\mu} A] B_{\mu}^{\dagger}) \quad (4.6)$$

$$= \sum_{\mu \in \mathcal{L}} (\text{Tr}[A(B_{\mu} S_{\mu}^{\dagger} - S_{\mu}^{\dagger} B_{\mu})] + \text{Tr}[A(S_{\mu} B_{\mu}^{\dagger} - B_{\mu}^{\dagger} S_{\mu})]) \quad (4.7)$$

$$= \text{Tr} \left[A \sum_{\mu \in \mathcal{L}} ([B_{\mu}, S_{\mu}^{\dagger}] - [B_{\mu}^{\dagger}, S_{\mu}]) \right] \quad (4.8)$$

$$= \langle A, \nabla_{\mathbb{S}}^* \mathbb{B} \rangle \quad (4.9)$$

□

このもとで、時間発展は

$$\frac{d\rho}{dt} = \nabla_{\mathbb{S}}^* \mathbb{J}(\rho) \quad (4.10)$$

と表される。

5 詳細つり合い条件の下での EPR

以下、局所詳細つりあい条件

$$k_B \ln \frac{\gamma_{\mu}^+}{\gamma_{\mu}^-} = \sigma_{\mu} \quad (5.1)$$

を仮定する。このとき、着目系/環境系/全体の EPR を以下のように定義する:

$$\dot{\sigma}_{\text{sys}} = -k_B \text{Tr}[\dot{\rho}(t) \ln \rho(t)] \quad (5.2)$$

$$\dot{\sigma}_{\text{bath}} = \sum_{\mu \in \mathcal{L}_L} \sigma_{\mu} Q_{\mu}(\rho(t)) \quad (5.3)$$

$$\dot{\sigma}_{\text{tot}} = \dot{\sigma}_{\text{sys}} + \dot{\sigma}_{\text{env}} \quad (5.4)$$

また、Thermodynamic force op. を

$$F_\mu(\rho) := \begin{cases} 0 & (\mu \in \mathcal{L}_H) \\ \sigma_\mu L_\mu + k_B [L_\mu, \ln \rho] & (\mu \in \mathcal{L}_L) \end{cases} \quad (5.5)$$

と定義する。このとき、

$$\dot{\sigma}_{\text{tot}} = \langle \mathbb{J}(\rho), \mathbb{F}(\rho) \rangle \quad (5.6)$$

が成り立つ。

(\cdot \cdot)

$$\dot{\sigma}_{\text{sys}} = -k_B \text{Tr}[\dot{\rho}(t) \ln \rho(t)] \quad (5.7)$$

$$= -k_B \text{Tr}[\nabla_{\mathbb{S}}^* \mathbb{J}(\rho) \ln \rho(t)] \quad (5.8)$$

$$= -k_B \langle \nabla_{\mathbb{S}}^* \mathbb{J}(\rho), \ln \rho(t) \rangle \quad (5.9)$$

$$= -k_B \langle \mathbb{J}(\rho), \nabla_{\mathbb{S}} \ln \rho(t) \rangle \quad (5.10)$$

$$= -k_B \sum_{\mu \in \mathcal{L}} (\text{Tr}[J_\mu^\dagger(\rho) [\ln \rho, S_\mu]] + \text{Tr}[J_\mu(\rho) [\ln \rho, S_\mu^\dagger]]) \quad (5.11)$$

$$= k_B \sum_{\mu \in \mathcal{L}_L} (\text{Tr}[J_\mu^\dagger(L_\mu, \ln \rho)] + \text{Tr}[J_\mu(\rho) [\ln \rho, L_\mu^\dagger]]) \quad (5.12)$$

が成り立つ。⁷

また、

$$\dot{\sigma}_{\text{bath}} = \sum_{\mu \in \mathcal{L}_L} \sigma_\mu Q_\mu(\rho(t)) \quad (5.17)$$

$$= \sum_{\mu \in \mathcal{L}_L} \sigma_\mu (\text{Tr}[J_\mu^\dagger(\rho) L_\mu] + \text{Tr}[J_\mu(\rho) L_\mu^\dagger]) \quad (5.18)$$

を合わせることで、

$$\dot{\sigma}_{\text{tot}} = \sum_{\mu \in \mathcal{L}_L} (\text{Tr}[J_\mu^\dagger(\rho)(\sigma_\mu L_\mu + k_B [L_\mu, \ln \rho])] + \text{Tr}[J_\mu(\rho)(\sigma_\mu L_\mu^\dagger + k_B [L_\mu^\dagger, \ln \rho])]) \quad (5.19)$$

$$= \langle \mathbb{J}(\rho), \mathbb{F}(\rho) \rangle \quad (5.20)$$

が成り立つ。

□

⁷ ただし、

$$[J_\mu, V_\mu^\dagger] \propto [\rho, V_\mu^\dagger] \quad (5.13)$$

$$[J_\mu, V_\mu] \propto [\rho, V_\mu] \quad (5.14)$$

$$\text{Tr}[\ln \rho [\rho, V_\mu^\dagger]] = 0 \quad (5.15)$$

$$\text{Tr}[\ln \rho [\rho, V_\mu]] = 0 \quad (5.16)$$

が成り立つため、Hamiltonian 項は寄与しない。

2つの超演算子 $\mathbb{B}^+, \mathbb{B}^-$ について、

$$(\mathcal{M}_{\mathbb{B}^\pm})_\mu(\mathbb{A}) := \int_0^1 ds (B_\mu^-)^s A_\mu (B_\mu^+)^{1-s} \quad (5.21)$$

を定義する。ここで、

$$B_\mu^\pm = \sum_n b_n^{\mu\pm} |\chi_n^{\mu\pm}\rangle\langle\chi_n^{\mu\pm}| \quad (5.22)$$

と展開すると、

$$[\mathcal{M}_{\mathbb{B}^\pm}(\mathbb{A})]_\mu = \sum_{nm} \frac{b_n^{\mu-} - b_m^{\mu+}}{\ln(b_n^{\mu-}/b_m^{\mu+})} \langle\chi_n^{\mu-}|A_\mu|\chi_m^{\mu+}\rangle \langle\chi_n^{\mu-}|\chi_m^{\mu+}\rangle \quad (5.23)$$

と計算できる。このとき、以下の関係が成り立つ。

$$\mathbb{J}(\rho) = \mathcal{M}_{\Gamma^\pm}(\mathbb{F}(\rho)) \quad (5.24)$$

$$\boldsymbol{\Gamma}_\mu^\pm = \{\Gamma_\mu^\pm\}_{\mu \in \mathcal{L}} \quad (5.25)$$

$$\Gamma_\mu^\pm = \frac{1}{2} \gamma_\mu^\pm \rho \quad (5.26)$$

Prf.

詳細つり合い条件を用いることで、

$$F_\mu(\rho) = \sigma_\mu L_\mu + k_B [L_\mu, \ln \rho] \quad (5.27)$$

$$= k_B [L_\mu \ln(\gamma_\mu^+ \rho) - \ln(\gamma_\mu^- \rho) L_\mu] \quad (5.28)$$

$$= k_B [L_\mu (\ln \Gamma_\mu^+) - (\ln \Gamma_\mu^-) L_\mu] \quad (5.29)$$

となる。これを用いて、

$$\int_0^1 (\Gamma_\mu^-)^s [L_\mu (\ln \Gamma_\mu^+) - (\ln \Gamma_\mu^-) L_\mu] (\Gamma_\mu^+)^{1-s} ds = - \int_0^1 \frac{d}{ds} \left(e^{s \ln \Gamma_\mu^-} L_\mu e^{(1-s) \ln \Gamma_\mu^+} \right) ds \quad (5.30)$$

$$= L_\mu \Gamma_\mu^+ - \Gamma_\mu^- L_\mu \quad (5.31)$$

$$= \frac{1}{2} \gamma_\mu^+ L_\mu \rho - \frac{1}{2} \gamma_\mu^- \rho L_\mu = J_\mu(\rho) \quad (5.32)$$

が成り立つ。 \square

このとき、前の話から

$$\dot{\Sigma}_{\text{tot}}(\rho) = \langle \mathbb{F}(\rho), \mathbb{J}(\rho) \rangle \quad (5.33)$$

$$= \langle \mathbb{F}(\rho), \mathcal{M}_{\Gamma^\pm}(\mathbb{F}(\rho)) \rangle \quad (5.34)$$

$$= \langle \mathbb{J}(\rho), \mathcal{M}_{\Gamma^\pm}^{-1}(\mathbb{J}(\rho)) \rangle \quad (5.35)$$

である。ここで、内積

$$\langle \mathbb{A}, \mathbb{C} \rangle_{\mathbb{B}^\pm} := \langle \mathbb{A}, \mathcal{M}_{\mathbb{B}^\pm}(\mathbb{C}) \rangle \in \mathbb{R}, \quad (5.36)$$

を以下のように導入すると、

$$\langle \mathbb{A}, \mathbb{A} \rangle_{\mathbb{B}^\pm} \geq 0, \quad (5.37)$$

をきちんと満たしてくれる。⁸したがって、

$$\dot{\Sigma}_{\text{tot}}(\rho) = \langle \mathbb{F}(\rho), \mathbb{F}(\rho) \rangle_{\Gamma^\pm} \geq 0 \quad (5.38)$$

が成り立つ。ここで、

$$\mathbb{J}(\pi) = 0 \quad (5.39)$$

なる平衡状態 π が存在するとする。このとき、

$$\mathbb{F}(\pi) = \mathcal{M}_{\Gamma^\pm}^{-1}(\mathbb{J}(\pi)) = 0 \quad (5.40)$$

であるから、

$$\mathbb{F}(\rho) = \mathbb{F}(\rho) - \mathbb{F}(\pi) \quad (5.41)$$

$$= \{k_B [L_\mu, \ln \rho - \ln \pi]\}_{\mu \in \mathcal{L}} \quad (5.42)$$

$$= -\{[\phi, L_\mu]\}_{\mu \in \mathcal{L}} \quad (5.43)$$

$$= -\nabla_L \phi \quad (5.44)$$

となる $\phi = -k_B(\ln \rho - \ln \pi)$ が存在する。すなわち、力をポテンシャルの勾配として表すことができる。

古典系と量子系の対応を以下にまとめると。

	Classical	Quantum
Gradient	∇	∇_L
Continuity	$dp/dt = \nabla^\top J(p)$	$\mathcal{D}(\rho) = \nabla_L^* \mathbb{J}(\rho)$
Current	$K_e = K_e^+ - K_e^-$	$\mathbb{J}(\rho) = [L, \Gamma \otimes \rho]$
Force	$F_e = \ln(K_e^+ / K_e^-)$	$\mathbb{F}(\rho) = [L, \ln(\Gamma \otimes \rho)]$
Conservative	$F = -\nabla \phi$	$\mathbb{F}(\rho) = -\nabla_L \phi$
Detailed balance	$J(p^{\text{eq}}) = 0$	$\mathbb{J}(\rho^{\text{eq}}) = 0$
EPR	$J^T F$	$\text{tr} (\mathbb{J}(\rho)^\dagger \mathbb{F}(\rho))$

表 1 Classical-Quantum Correspondence

⁸ 他の内積の公理も満たしてくれる。上での基底を用いて展開した式を用いる。