

令和 6 年 6 月 17 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2023

課題番号：19K14615

研究課題名（和文）統計力学による熱平衡化過程の理論的解明

研究課題名（英文）Theoretical investigation of thermal relaxation processes from the viewpoint of statistical mechanics

研究代表者

白石 直人 (Shiraishi, Naoto)

東京大学・大学院総合文化研究科・准教授

研究者番号：30835179

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,100,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、熱平衡化現象という身近な現象について、非可積分性と熱平衡化、また熱力学といった複数の側面から解明を行った。

本研究では、熱平衡化と密接にかかわる非可積分性を厳密に示すための手法を開発し、これを適用することで複数の系で非可積分性が厳密に証明できた。また、熱平衡化の有無という重要な問題について、熱平衡化の有無は一般には決定不能であること、特定の系でなら熱平衡化が厳密に証明できること、の双方を示した。熱力学の側面からは、緩和現象での状態変化の距離が、熱力学的な散逸の大きさを評価できることを証明した。また、緩和途中で生じる振動の大きさが、定常的な散逸の大きさを評価できることも証明した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

これまで可積分性の証明は多数なされていたが、非可積分性が厳密に証明されたことはなく、非可積分性は数値的にしか示しえないとも考えられていた。本研究により、非可積分性は厳密に証明可能な性質であることが明らかにされ、新たな研究分野を切り開くことが出来た。

熱平衡化の有無は活発な研究領域である。熱平衡化の有無が一般的な形では決定不能だという研究成果は、この領域の方向性に大きな影響を与える。特に、一般論ではなく個別の対象の解析の方が有益であるという重要な示唆がなされる。

新しい熱力学的不等式の導出は近年活発に研究されているが、本研究で得た不等式はどちらも質的に新しいもの

研究成果の概要（英文）：In this research project, I studied the relaxation phenomena from the aspects of non-integrability, thermalization, and stochastic thermodynamics.

I invented a novel method for proving non-integrability, and applying this method I rigorously prove non-integrability of several chaotic models. In addition, I proved that the presence of thermalization is undecidable and that thermalization of a certain model can be proven.

From the aspect of stochastic thermodynamics, I proved that thermodynamic dissipation bounds the distance between the initial and final states. I also proved that thermodynamic dissipation also bounds the magnitude of oscillation in relaxation dynamics.

研究分野：非平衡統計力学

キーワード：熱平衡化 可積分系 ゆらぐ系の熱力学 熱力学不等式 決定不能性 計算複雑性 緩和現象

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

熱平衡化現象は極めて幅広く見られる現象だが、その物理学的な取り扱い、特にミクロからの理解は難しく、非平衡統計力学にとって重要な難問であった。

孤立した量子系の熱平衡化は近年活発に研究されている領域だが、数値計算に基づく議論が多く、解析的な理解はなかなか進んでいなかった。熱平衡化と密接に関連する性質である非可積分性もまた、解析的なアプローチは全くなされておらず、そもそも厳密な証明の対象とはならないだろうという悲観的な見方さえ存在した。

ランダムな系における熱平衡化の不在は、ランダムな組み合わせ最適化問題を解くことが困難であることと密接に関係しており、強い研究関心を集める対象である。しかし、数値計算に基づく研究と大胆な仮説を置いて近似的に計算を進める手法が多く、厳密な結果は多くなかった。ゆらぐ系の熱力学もまた活発に研究がなされている分野だが、この観点からの緩和現象へのアプローチは研究開始時点ではあまりなされていなかった。

2. 研究の目的

本研究では、非可積分性と熱平衡化、ランダム系の緩和、緩和の熱力学的特徴、という三つの観点から研究を進め、熱平衡化現象への理解を深めることを目標とする。

3. 研究の方法

非可積分性と熱平衡化については、まず非可積分性を具体的な系で証明する手法を構築し、それを用いることで具体的な系における非可積分性を厳密に証明する。また、熱平衡化については、非可積分性証明で得られた知見をもとに、局所的なノイズに対する安定性と結び付ける形で熱平衡化の有無を示すことを計画する。

ランダム系については、先行研究がランダム平均を取った際の系や組み合わせ最適化問題の平均量しか扱っていないことが問題だと考え、ランダム性のない構成的な組み合わせ最適化問題で、その問題を解くことが困難であるものを具体的に構築し、その解析を行う。

緩和の熱力学的な特徴づけとしては、緩和過程においては、熱力学的な散逸の大きさが、始状態と終状態の間のカルバック・ライブラー情報量で下から不等式評価できるだろうということを予想しているので、それを証明する。

4. 研究成果

非可積分性と熱平衡化については、さまざまな大きな進展があった。まず、可能な保存量を形式的に書き下し、その係数を交換関係の条件から一つ一つ絞り込んでいくという手続きにより、非可積分性を厳密に証明することが出来ることを明らかにした。そしてこれを用いることで、「1次元 $S=1/2$ の XYZ 模型に磁場を加えた模型」と「次近接相互作用する 1次元 $S=1/2$ ハイゼンベルグ模型」の二つの模型が非可積分であることを厳密に証明した。これらの模型はともに非可積分であろうと強く予想されていたものの、それは数値実験などで示唆されるのみで、解析的な証明は全くなされていなかった。そもそも今回の結果以前には非可積分性は解析的に取り扱えないものだという悲観的な見方さえ存在していた。今回の結果は、単に二つの模型で非可積分性を示しただけでなく、「非可積分性の厳密証明」という全く新しい研究領域を切り開いたものである。

熱平衡化については、当初の予想とは異なる重要な事実が明らかになった。孤立量子系の熱平衡化の研究領域では、与えられた系(ハミルトニアン)に対して熱平衡化の有無を決めることが一つの重要な問題であった。これに対し、実は熱平衡化の有無は一般には決定不能命題(任意の系について、与えられた系が熱平衡化するか否かを判定する手続きは原理的に存在しない)であることを証明することに成功した。これは、孤立量子系の熱平衡化の中心問題が実は一般的な形では原理的に解きえない問題であることを明らかにしており、孤立量子系の熱平衡化の研究の方向性に一石を投じるものである。特に、熱平衡化の問題の解明には、一般論を志向するよりも個別の系を詳細に解析する方がよいことが示唆される。その示唆に従って研究を進めた結果、熱平衡化が厳密に証明できる系を具体的に構築することに成功した。熱平衡化は数値計算では多くの系で見られていたものの、仮定抜きで厳密に証明することはこれまで出来ておらず、これは熱平衡化を厳密に示した最初の例に当たる。

ランダム系についても一定の進展があった。この研究では「最大独立集合問題」という、グラフに対する組み合わせ最適化問題を対象とした。まず、最大独立集合問題を解くのが困難な典型的なランダムグラフと共通の性質を有している、決定論的に構成されたグラフを与えることに成功した。最大独立集合問題を解く既知のいくつかのアルゴリズムを用いた場合には、このグラフの最大独立集合問題を解くことが出来ないことを証明することも成功した。

関連して、組み合わせ最適化問題を解く量子計算の一つの方法である量子アニーリングについても解析した。難しい組み合わせ最適化問題は、量子アニーリングを用いても解くことが出来な

いと経験的に考えられている。なぜ量子アニーリングは組み合わせ最適化問題を解くことに失敗するのか、の解明は、最適化問題の難しさや量子計算の性能の理解にも重要な問題であり、活発に議論されている。量子アニーリングの失敗の要因として、先行研究では、途中で横磁場の量子一次相転移が生じることが原因ではないかという仮説が提案されていた。これに対し、本研究では、横磁場の量子一次相転移を回避できるような量子アニーリングが容易に構築できることを示した。この事実は、量子アニーリングの失敗の原因は横磁場の量子一次相転移ではないことを示唆している。

緩和現象の熱力学的特徴付けについても、大きな進展があった。まず緩和過程における散逸の大きさは、当初の予想通り、始状態と終状態間のカルバック・ライブラー情報量で下から押さえられることを一般的な形で証明することに成功した。この不等式は、状態空間中をどのように緩和のパスが通っていくのかに対して条件を課しており、可能な緩和現象に対して新たな原理的な制限を与えるものである。

また、化学反応系などにおいては、緩和の途中で観測量が大きくなったり小さくなったりを繰り返す振動現象がみられる場合がある。この振動の強さ（振動が減衰するまでにどれだけの階数振動できるか）もまた、定常状態の散逸で抑えられることが分かった。すなわち、大きな振動を見たいのであれば、定常状態はより激しく散逸していなければならないということである。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計16件（うち査読付論文 16件 / うち国際共著 2件 / うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Shiraishi Naoto	4. 巻 129
2. 論文標題 Time-Symmetric Current and Its Fluctuation Response Relation around Nonequilibrium Stalling Stationary State	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 020602-1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.129.020602	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shiraishi Naoto	4. 巻 2023
2. 論文標題 Fluctuation-response relation of time-symmetric quantities around general nonequilibrium stationary state	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment	6. 最初と最後の頁 033207 ~ 033207
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-5468/acbe9a	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shiraishi Naoto, Saito Keiji	4. 巻 3
2. 論文標題 Speed limit for open systems coupled to general environments	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 23074
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.3.023074	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shiraishi Naoto, Matsumoto Keiji	4. 巻 12
2. 論文標題 Undecidability in quantum thermalization	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 5084
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-021-25053-0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shiraishi Naoto	4. 巻 185
2. 論文標題 Optimal Thermodynamic Uncertainty Relation in Markov Jump Processes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Statistical Physics	6. 最初と最後の頁 19
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10955-021-02829-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shiraishi Naoto	4. 巻 53
2. 論文標題 Two constructive proofs on d-majorization and thermo-majorization	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical	6. 最初と最後の頁 425301 ~ 425301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1751-8121/abb041	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tajima Hiroyasu, Shiraishi Naoto, Saito Keiji	4. 巻 2
2. 論文標題 Coherence cost for violating conservation laws	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 43374
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.2.043374	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shiraishi Naoto, Sagawa Takahiro	4. 巻 126
2. 論文標題 Quantum Thermodynamics of Correlated-Catalytic State Conversion at Small Scale	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 150502
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.126.150502	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shiraishi Naoto	4. 巻 2019
2. 論文標題 Connection between quantum-many-body scars and the Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki model from the viewpoint of embedded Hamiltonians	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment	6. 最初と最後の頁 083103 ~ 083103
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-5468/ab342e	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shiraishi Naoto, Saito Keiji	4. 巻 123
2. 論文標題 Information-Theoretical Bound of the Irreversibility in Thermal Relaxation Processes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 110603~110603
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.123.110603	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shiraishi Naoto, Takahashi Jun	4. 巻 2019
2. 論文標題 Constructing concrete hard instances of the maximum independent set problem	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment	6. 最初と最後の頁 113401 ~ 113401
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-5468/ab409d	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Shiraishi Naoto	4. 巻 128
2. 論文標題 Proof of the absence of local conserved quantities in the XYZ chain with a magnetic field	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 EPL (Europhysics Letters)	6. 最初と最後の頁 17002 ~ 17002
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1209/0295-5075/128/17002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shiraishi Naoto	4. 巻 108
2. 論文標題 Entropy production limits all fluctuation oscillations	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 L042103-L042103
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.108.L042103	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamaguchi Mizuki, Shiraishi Naoto, Hukushima Koji	4. 巻 191
2. 論文標題 Proof of Avoidability of the Quantum First-Order Transition in Transverse Magnetization in Quantum Annealing of Finite-Dimensional Spin Glasses	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Journal of Statistical Physics	6. 最初と最後の頁 12-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10955-023-03223-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takagi Ryuji, Shiraishi Naoto	4. 巻 128
2. 論文標題 Correlation in Catalysts Enables Arbitrary Manipulation of Quantum Coherence	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 240501~240501
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.128.240501	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Shiraishi Naoto, Takagi Ryuji	4. 巻 132
2. 論文標題 Arbitrary Amplification of Quantum Coherence in Asymptotic and Catalytic Transformation	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 180202-180202
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.132.180202	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計21件(うち招待講演 15件/うち国際学会 19件)

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 Undecidability in quantum thermalization
3. 学会等名 Third Workshop on Stochastic Thermodynamics (WOST III) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 Fluctuation and response of time-symmetric current around nonequilibrium stationary states
3. 学会等名 Non-Equilibrium Dynamics, Thermodynamics and Fluctuations: From Fundamentals to the Next Generation of Microscopic Thermal Machines (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 Some anomalous thermalization phenomena
3. 学会等名 International Workshop Quantum Many-Body Dynamics: Thermalization and its Violations (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 Undecidability in quantum thermalization
3. 学会等名 New Trends in Quantum Condensed Matter Theory 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 Resource theories with correlated catalyst
3. 学会等名 Quantum Information Entropy in Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 Quantum thermodynamics of correlated-catalytic state conversion at small-scale
3. 学会等名 Beyond IID 9 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 Quantum thermodynamics of correlated-catalytic state conversion at small-scale
3. 学会等名 Quantum Thermodynamics 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 白石直人
2. 発表標題 非平衡定常状態における揺動応答関係
3. 学会等名 物性研ワークショップ： 開放系トポロジーと生体・量子・統計物理 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 Some bounds on entropy production stronger than the second law of thermodynamics
3. 学会等名 Stochastic thermodynamics of complex systems, Complexity Science Hub, Vienna, Austria (online) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 Proof of absence of local conserved quantity in some nonintegrable models
3. 学会等名 RIGOROUS STATISTICAL MECHANICS AND RELATED TOPICS II (online) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 Some counterexamples to eigenstate thermalization hypothesis
3. 学会等名 International Workshop on Quantum Thermodynamics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 Proof of absence of local conserved quantity in $S=1/2$ XYZ chain with a magnetic field
3. 学会等名 The 5th East Asia Joint Seminars on Statistical Physics 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 Bounds on entropy production stronger than the second law of thermodynamics
3. 学会等名 Workshop on Recent Progress in Mathematical and Statistical Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 Proof of absence of local conserved quantity in $S=1/2$ XYZ chain with a magnetic field
3. 学会等名 Workshop New Trends in Integrable Systems 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 Proof of non-integrability of $S=1/2$ XYZ chain with a magnetic field
3. 学会等名 STATPHYS27 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 白石直人
2. 発表標題 孤立した量子多体系の熱平衡化をめぐる問題
3. 学会等名 QMKEK 量子論の諸問題と今後の発展 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 Some bounds on entropy production stronger than the second law of thermodynamics
3. 学会等名 Frontiers of Complex Systems Science: Soft Matter, Biophysics, and Statistical Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 The problem of thermalization in isolated quantum many-body systems
3. 学会等名 Quantum Thermodynamics 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 Entropy production bounds (almost) everything
3. 学会等名 STATPHYS28 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi
2. 発表標題 Fluctuation-response relation of time-symmetric current around nonequilibrium stationary state
3. 学会等名 Perspectives on Non-Equilibrium Statistical Mechanics: The 45th Anniversary Symposium of Yamada Science Foundation (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Naoto Shiraishi and Ryuji Takagi
2. 発表標題 Alchemy of quantum coherence: Arbitrary amplification in asymptotic and catalytic coherence manipulation
3. 学会等名 Quantum resources 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 Naoto Shiraishi	4. 発行年 2023年
2. 出版社 Springer	5. 総ページ数 443
3. 書名 An Introduction to Stochastic Thermodynamics: From Basic to Advanced	

〔産業財産権〕

〔その他〕

Naoto Shiraishi's webpage https://sites.google.com/site/naotoshiraishiphys/home-jp
--

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------