arXiv:2602.01669v1 [quant-ph] 2 Feb 2026

有限量子系统中的统一熵产生

Tomohiro Nishiyama*
Independent Researcher, Tokyo 206-0003, Japan

Yoshihiko Hasegawa†
Department of Information and Communication Engineering, Graduate School of Information Science and Technology, The University of Tokyo, Tokyo 113-8656, Japan(日期：2026年2月3日)

在有限维量子系统中，温度无法被唯一确定。因此，由于经典熵产生取决于温度，有限维量子系统中的熵产生也有多种定义方式。我们提出了一种统一的熵产生定义，该定义基于相对于由有效温度表征的参考态的量子相对熵之差。我们证明，所提出的定义可自然分解为克劳修斯型熵产生，以及由有效温度随时间变化而产生的额外贡献。此外，我们还表明，若要求熵产生率采用熵变与热流之和这一传统形式，则有效温度必须为常数，或等于某个特定的能量匹配有效温度。对于一般初始态，熵产生可能为负；在这种情况下，我们推导出熵产生的下界，并利用迹距离建立其非负的充分条件。

I. 引言

温度是热力学中的一个基本概念；然而，温度通常是在平衡系统中定义的，而在非平衡情形下定义温度，尤其是对有限系统定义温度，仍然极具挑战性 [1]。在量子领域中，根据具体的操作或理论背景，人们提出了多种有效温度的概念。例如，可以通过熵—能量关系（例如，通过 dS/dE） [2], 定义随时间变化的温度，或者根据所选任务或测量方案对温度进行操作性定义 [3]。相关方法也在有限环境和基于轨迹的表述背景下得到讨论 [4]。人们提出了各种操作性和理论性定义 [2–6]。非平衡系统中缺乏唯一的温度定义之所以成问题，是因为许多热力学量都依赖于温度。一个显著例子是熵产生，它刻画了动力学的不可逆性。熵产生在量化热机的热力学代价以及热力学不确定性关系方面发挥着基础作用 [7–14]。在量子热力学中，人们提出并评述了熵产生的多种定义 [15]。例如，熵产生可以表示为系统—环境态与适当参考态之间的相对熵 [16], ，也可以在量子跃迁/轨迹形式中基于随机轨迹进行定义 [17]。对于有限环境，一种克劳修斯型基于有效逆温度的熵产生已被提出 [6]。通常，量子熵产生被定义为系统冯·诺依曼熵的变化与环境能量变化除以温度所得结果之和。如上所述，由于有限维环境中的温度并没有唯一的定义，因此对于有限维量子系统中的熵产生定义，尚未形成共识。

本文提出了适用于一般有效温度的统一熵产生定义 [参见式（13）]。定义熵产生时，我们要求满足以下三个条件：1）当初始态为乘积形式，且环境的初始态取为吉布斯态时，熵产生非负（热力学第二定律）；2）当初态和末态（包括有效温度）相同时，熵产生为零；3）当有效温度为常数时，该定义退化为适用于大环境的定义。满足这三个条件的最简单定义，可通过量子相对熵之差给出。我们证明，对于有效温度 β_t^*，我们提出的定义会退化为先前提出的克劳修斯型熵产生；该有效温度的定义方式是，使环境的瞬时平均能量与吉布斯态的瞬时平均能量一致 [参见式（12）]。此外，我们证明，若要使熵产生率对应于熵变与热量变化之和，则有效温度只能取常数或 β_t^*。由于一般初始态下熵产生可能为负，即使温度为常数也是如此（实验也已证实 [18], ），我们推导了有效温度下熵产生的下界。在此背景下，

* htam0ybboh@gmail.com
† hasegawa@biom.t.u-tokyo.ac.jp

针对负熵产生，人们已讨论了广义第二定律型界（与兰道尔原理相关） [19]。基于这些界，我们进一步给出了熵产生非负的充分条件。

II. 方法

考虑一个开放量子系统，由系统 S 和环境 E 组成，其维数有限$d_S < \infty$ 且 $d_E < \infty$。设 H_S（t）和 H_E 分别为表示系统 S 和环境 E的哈密顿算符。设 H_{SE}（t）为系统与环境之间的相互作用哈密顿算符。假设 H_E 不随时间变化，且 H_E 至少有两个不同的特征值。总哈密顿量定义为

$$H(t) = H_S(t) + H_E + H_{SE}(t). \tag{1}$$

设 ρ_{SE}（t）为一个密度算符，且 ρ_{SE}（t）在联合幺正算符 $U_t = \mathbb{T}e^{-i\int_0^t H\ (s)\ ds}$作用下演化：

$$\rho_{SE}(t) = U_t \rho_{SE}(0) U_t^\dagger. \tag{2}$$

这里 $\mathbb{T}$表示时间序算符。本文中，我们采用约定，令 $\hbar = 1$ 和$k_B = 1$。设tr_X 表示关于 X 的偏迹：$=\{S, E\}$，并设 $\rho_S := \mathrm{tr}_E[\rho_{SE}]$ 和 $\rho_E := \mathrm{tr}_S[\rho_{SE}]$ 分别为系统和环境的密度算符。我们将密度算符 ρ的冯·诺依曼熵定义为

$$S(\rho) := -\mathrm{tr}[\rho \ln \rho]. \tag{3}$$

下文中，我们将冯·诺依曼熵称为熵。对于 ρ_X，熵定义为 $S(\rho_X) :=-\mathrm{tr}_X[\rho_X \ln\ \rho_X]$。令 $I(\rho_{SE})$ 为互信息：

$$I(\rho_{SE}) := S(\rho_S) + S(\rho_E) - S(\rho_{SE}) \geq 0, \tag{4}$$

并令 $D(\rho\|\sigma)$ 为量子相对熵：

$$D(\rho\|\sigma) := \mathrm{tr}[\rho(\ln \rho - \ln \sigma)]. \tag{5}$$

令 $\gamma_E(\beta)$ 为逆温度为 β 时的吉布斯态：

$$\gamma_E(\beta) := \frac{e^{-\beta H_E}}{\mathcal{Z}(\beta)}, \tag{6}$$

其中，$\mathcal{Z}(\beta) := \mathrm{tr}_E[e^{-\beta H_E}]$ 表示配分函数。

A. 克劳修斯型熵产生

令 β_t^{eff} 为任意随时间变化的有效逆温度。为简化记号，将 β_t^{eff} 称为 β_t，将 $\rho_{SE}(0)$ 和 $\rho_{SE}(\tau)$ 分别称为 ρ_{SE} 和 σ_{SE}。令 $\Delta S_X := S(\sigma_X) - S(\rho_X)$，其中 $X = \{S, E\}$；并令 $\Delta I := I(\sigma_{SE}) - I(\rho_{SE})$。我们使用记号 $F[\beta_t]$ 表示有效逆温度 β_t 的泛函。

考虑从 $t = 0$ 到 τ 的克劳修斯型熵产生：

$$\begin{aligned}\Delta\Sigma_{\mathrm{CL}}[\beta_t] &:= \Delta S_S + \int_0^\tau \beta_t \frac{d}{dt}\mathrm{tr}_E[\rho_E(t) H_E] dt \\ &= \Delta S_S - \int_0^\tau \beta_t \frac{dQ(t)}{dt} dt,\end{aligned} \tag{7}$$

其中 $dQ(t)/dt = -\partial_t \mathrm{tr}_E[\rho_E(t) H_E]$ 是流入系统的热流。设 β^C 为常数有效温度。当 $\beta_t = \beta^C$, $\Delta\Sigma_{\mathrm{CL}}[\beta_t]$ 便化为众所周知的定义：

$$\Delta\Sigma_{\mathrm{CL}}[\beta^C] = \Delta S_S + \beta^C(\mathrm{tr}_E[\sigma_E H_E] - \mathrm{tr}_E[\rho_E H_E]). \tag{8}$$

参考文献 [16, 19–21]指出，对于恒定的逆温度 β^C，克劳修斯型熵产生 $\Delta\Sigma_{\mathrm{CL}}[\beta^C]$ 可以写成相对于参考态 $\rho_S(t) \otimes \gamma_E(\beta^C)$ 的量子相对熵变化：

$$\begin{aligned}\Delta\Sigma_{\mathrm{CL}}[\beta^C] &= D(\sigma_{SE}\|\sigma_S \otimes \gamma_E(\beta^C)) - D(\rho_{SE}\|\rho_S \otimes \gamma_E(\beta^C)) \\ &= \Delta I + D(\sigma_E\|\gamma_E(\beta^C)) - D(\rho_E\|\gamma_E(\beta^C)).\end{aligned} \tag{9}$$

据我们所知，参考文献 [20], 首次明确提出了这种表述，其中采用时间无关参考态（不一定是吉布斯态）来定义熵产生。第二个等号由恒等式 [16] 得出：

$$D(\rho_{SE}(t)\|\rho_S(t) \otimes \gamma_E(\beta)) = I(\rho_{SE}(t)) + D(\rho_E(t)\|\gamma_E(\beta)). \tag{10}$$

与恒定温度的情况不同，目前尚不清楚时间依赖的有效温度下，熵产生应基于量子相对熵还是克劳修斯型熵产生来定义。参考文献 [5, 6] 针对有限环境提出了一种克劳修斯型熵产生：

$$\Delta\Sigma^* := \Delta\Sigma_{\mathrm{CL}}[\beta_t^*]. \tag{11}$$

这里定义有效逆温度 β_t^*，使得 $\rho_E(t)$ 的能量期望值等于吉布斯态：

$$\mathrm{tr}_E[\rho_E(t) H_E] = \mathrm{tr}_E[\gamma_E(\beta_t^*) H_E]. \tag{12}$$

通过将定义扩展 β_t^* 到负值，该方程始终有唯一解（见附录 A）。因此，有效温度是定义良好的；当 $\rho_E(t)$ 为吉布斯态时，它与标准定义一致。

III. 结果

在用一般的有效温度定义熵产生之前，我们先讨论熵产生必须满足的条件。由于熵产生的定义 [式（8）和（11）] 已知是

非负的，当 $\rho_{SE}=\rho_S\otimes\gamma_E(\beta^C)$ [16] 或 $\rho_{SE}=\rho_S\otimes\gamma_E(\beta_0^*)$ [5], 时，这些定义对于特定的初始态满足热力学第二定律；该初始态具有乘积形式，且环境的初始态是吉布斯态。回顾一下，如果密度算符 $\rho_{SE}(t)$ 周期性地返回初始态，并且有效温度也被周期性地定义，那么熵产生应保持不变。对于具有离散能量本征态的时间无关量子系统，量子递归定理 [22] 通过对密度算符进行纯化，保证了上述周期性的存在。

A. 熵产生的定义

基于这些考虑，我们要求一般有效温度下的熵产生满足以下三个条件:

1. 当初始态为乘积形式，且环境的初始态取为吉布斯态（即 $\rho_{SE}=\rho_S\otimes\gamma_E(\beta_0)$）时，熵产生非负（热力学第二定律）。

2. 当包含有效温度的初态和末态相同时（即 $\sigma_{SE}=\rho_{SE}$和 $\beta_\tau=\beta_0$），熵产生为零。

3. 当 9式成立时，该定义退化为方程（ $\beta_t=\beta^C$）。

引入最后一个条件是为了使该定义与大环境下的熵产生定义相符。我们提出一种定义，用于描述从时间 $t=0$ 到 τ、具有有效逆温度的熵产生:

$$\begin{aligned}\Delta\Sigma(\beta_0,\beta_\tau)&:=D(\sigma_{SE}\|\sigma_S\otimes\gamma_E(\beta_\tau))-D(\rho_{SE}\|\rho_S\otimes\gamma_E(\beta_0))\\&=\Delta I+D(\sigma_E\|\gamma_E(\beta_\tau))-D(\rho_E\|\gamma_E(\beta_0)).\end{aligned}\tag{13}$$

这是本文的第一个主要结果。公式 (13) 是满足条件 1 至 3 的最简单定义。将 $\rho_S(t)\otimes\gamma_E(\beta_t)$ 视为逼近密度算符 $\rho_{SE}(t)$ 的参考态时，右侧表示参考态与时间 t 下实际态之间的差异如何从 $t=0$ 变为 τ。尽管其他候选定义 $\Delta\Sigma_{\rm CL}[\beta_t]$ 和 $\Delta S_S+\beta_\tau{\rm tr}_E[\sigma_E H_E]-\beta_0{\rm tr}_E[\rho_E H_E]$ 满足条件 3，但尚不清楚它们是否满足条件 1 或 2。

B. 与克劳修斯型熵产生的关系

我们展示了方程（13）与克劳修斯型熵产生 $\Delta\Sigma_{\rm CL}[\beta_t]$ 之间的关系，并说明我们的定义包含定义方程（11）。

$\Delta\Sigma(\beta_0,\ \beta_\tau)$与 $\Delta\Sigma_{\rm CL}[\beta]$ 之间的关系为

$$\Delta\Sigma(\beta_0,\beta_\tau)=\Delta\Sigma_{\rm CL}[\beta_t]+\Delta D[\beta_t],\tag{14}$$

其中

$$\begin{aligned}\Delta D[\beta_t]&:=\int_0^\tau\dot\beta_t\,\frac{\partial}{\partial\beta}D(\rho_{SE}(t)\|\rho_S(t)\otimes\gamma_E(\beta))\Big|_{\beta=\beta_t}dt\\&=\int_0^\tau\dot\beta_t({\rm tr}_E[\gamma_E(\beta_t^*)H_E]-{\rm tr}_E[\gamma_E(\beta_t)H_E])dt.\end{aligned}\tag{15}$$

公式 (14) 是本文的第二个主要结果。证明见附录 B。项 $\Delta D[\beta_t]$ 表示由有效温度的时间依赖性引起的 $D(\rho_{SE}(t)\|\rho_S(t)\otimes\gamma_E(\beta_t))$变化。由于公式 (14) 左侧表示 $D(\rho_{SE}(t)\|\rho_S(t\ \otimes\gamma_E(\beta_t))$从 $t=0$ 到 τ的总变化，因此，$\Delta\Sigma_{\rm CL}[\beta_t]$可解释为仅由密度算符 $\rho_{SE}(t)$的时间演化所引起的变化。作为公式 (14) 的推论，当 $\beta_t=\beta_t^*$时，定义公式 (13) 可化简为公式 (11):

$$\Delta\Sigma(\beta_0^*,\beta_\tau^*)=\Delta\Sigma^*.\tag{16}$$

我们展示 $\Delta\Sigma(\beta_0,\beta_\tau)$ 与 $\Delta\Sigma^*$ 之间的关系。根据 [23], ，勾股恒等式在 $\rho_E(t)$、 $\gamma_E(\beta_t^*)$ 和 $\gamma_E(\beta)$ 之间成立（参见附录 C）：

$$D(\rho_E(t)\|\gamma_E(\beta))=D(\rho_E(t)\|\gamma_E(\beta_t^*))+D(\gamma_E(\beta_t^*)\|\gamma_E(\beta)).\tag{17}$$

方程（10）和（17）再次得到如下勾股恒等式。

$$\begin{aligned}&D(\rho_{SE}(t)\|\rho_S(t)\otimes\gamma_E(\beta_t))\\&=I(\rho_{SE}(t))+D(\rho_E(t)\|\gamma_E(\beta_t^*))+D(\gamma_E(\beta_t^*)\|\gamma_E(\beta_t))\\&=D(\rho_{SE}(t)\|\rho_S(t)\otimes\gamma_E(\beta_t^*))+D(\gamma_E(\beta_t^*)\|\gamma_E(\beta_t)).\end{aligned}\tag{18}$$

方程（18）意味着，有效逆温度 β_t^* 可解释为从点 $\rho_{SE}(t$投影到流形 $\{\rho_S(t)\otimes\gamma_E(\beta)\ |\ \beta\in\mathbb{R}\}$:

$$\beta_t^*={\rm argmin}_{\beta\in\mathbb{R}}D(\rho_{SE}(t)\|\rho_S(t)\otimes\gamma_E(\beta)).\tag{19}$$

从几何视角来看，$\Delta D[\beta_t^*]=0$ 在方程（15）中成立，是因为 β_t^* 是$D(\rho_{SE}(t)\|\rho_S(t)\otimes\gamma_E(\beta)$ 的驻点。利用方程（18），我们得到

$$\begin{aligned}&\Delta\Sigma(\beta_0,\beta_\tau)\\&=\Delta\Sigma^*+D(\gamma_E(\beta_\tau^*)\|\gamma_E(\beta_\tau))-D(\gamma_E(\beta_0^*)\|\gamma_E(\beta_0)).\end{aligned}\tag{20}$$

该关系是对 $\Delta\Sigma(\beta_0^*,\beta_0^*)=\Delta\Sigma^*+D(\gamma_E(\beta_\tau^*)\|\gamma_E(\beta_0^*))$的推广，这一结果已在文献 [5, 6]中给出。该关系意味着，对于满足$\beta_0=\beta_0^*$的有效温度，$\Delta\Sigma^*$ 是熵产生中的最小值:

$$\Delta\Sigma^*=\min_{\beta_\tau\in\mathbb{R}}\Delta\Sigma(\beta_0^*,\beta_\tau).\tag{21}$$

利用式（10），$S(\rho_{SE}) = S(\sigma_{SE})$ 以及如下关系（见附录C），

$$\begin{aligned} &D(\rho_{SE}(t)\|\rho_S(t)\otimes\gamma_E(\beta_t^*)) \\ &= I(\rho_{SE}(t)) + S(\gamma_E(\beta_t^*)) - S(\rho_E(t)) \\ &= S(\rho_S(t)) + S(\gamma_E(\beta_t^*)) - S(\rho_{SE}(t)), \end{aligned} \tag{22}$$

$\Delta\Sigma^*$ 可写为如下形式 [5]。

$$\Delta\Sigma^* = \Delta I + \Delta S_\gamma = \Delta S_S + \Delta S_E + \Delta S_\gamma. \tag{23}$$

这里定义 $\Delta S_\gamma := \{S(\gamma_E(\beta_\tau^*)) - S(\sigma_E)\} - \{S(\gamma_E(\beta_0^*)) - S(\rho_E)\}$。

接下来我们考察熵产生率。在式（13）的定义中，由于对初始态没有任何假设，我们可以取 $t = 0$ 为任意时间。在式（$\tau \to 0$ 13）中取极限，并将 $\tau = 0$改写为 $\tau = t$，由式（7）、（14）和（15），我们得到

$$\begin{aligned} \sigma(t,\beta_t,\dot\beta_t) &:= \frac{d}{dt}D(\rho_{SE}(t)\|\rho_S(t)\otimes\gamma_E(\beta_t)) \\ &= \frac{dS(\rho_S(t))}{dt} - \beta_t\frac{dQ(t)}{dt} \\ &+ \dot\beta_t(\mathrm{tr}_E[\gamma_E(\beta_t^*)H_E] - \mathrm{tr}_E[\gamma_E(\beta_t)H_E]), \end{aligned} \tag{24}$$

其中 $\sigma(t,\beta_t,\dot\beta_t)$ 是熵产生率。与传统热力学一样，若要求右端第三个项为零，则 $\beta_t = 0$ 或 $\beta_t = \beta_t^*$必须始终成立。这里我们利用 $\mathrm{tr}_E[\gamma_E(\beta) H_E]$关于 β 严格递减这一性质（见附录 A）。

C. 下界

我们再次考虑一般的有效温度。对于一般初始态，熵产生可能为负。假设熵产生 $\Delta\Sigma^*$ 有一个下界：

$$\Delta\Sigma^* \geq \Lambda(\rho_{SE}), \tag{25}$$

其中 $\Lambda(\rho_{SE})$ 是一个仅由初始态构成的下界。由式（20），$\Delta\Sigma(\beta_0,\beta_\tau)$ 的一个下界为

$$\Delta\Sigma(\beta_0,\beta_\tau) \geq \Lambda(\rho_{SE}) - D(\gamma_E(\beta_0^*)\|\gamma_E(\beta_0)). \tag{26}$$

由于 $D(\gamma_E(\beta_0^*)\|\gamma_E(\beta_0)) > 0$对于 $\beta_0 \neq \beta_0^*$成立，右端在 $\beta_0 = \beta_0^*$时取最大值。由13式中 $\beta_t = \beta_t^*$ 的定义可得

$$\Delta\Sigma^* \geq -D(\rho_{SE}\|\rho_S\otimes\gamma_E(\beta_0^*)) =: \Lambda_S(\rho_{SE}). \tag{27}$$

应用式（22）可得 $t = 0$，从而得到熵产生的下界 $\Delta\Sigma^*$:

$$\begin{aligned} \Lambda_S(\rho_{SE}) &= S(\rho_{SE}) - S(\rho_S) - S(\gamma_E(\beta_0^*)) \\ &= S(\rho_{SE}) - S(\rho_S\otimes\gamma_E(\beta_0^*)). \end{aligned} \tag{28}$$

式（26）和式（28）是本文的第三项主要结果。下面依次讨论这两种特殊情况。当 $\rho_E = \gamma_E(\beta)$ 时，可得 $\beta_0^* = \beta$ 且

$$\Lambda_S(\rho_{SE}) = -I(\rho_{SE}), \tag{29}$$

其中我们使用了式（4）。当 $\rho_{SE} = \rho_S\otimes\rho_E$时，将$S(\rho_{SE}) = S(\rho_S) + S(\rho_E)$ 代入式（28）可得

$$\Lambda_S(\rho_{SE}) = S(\rho_E) - S(\gamma_E(\beta_0^*)). \tag{30}$$

接下来，我们通过迹距离给出下界。令$\|\rho-\sigma\|_1 := \mathrm{tr}[\sqrt{(\rho-\sigma)^\dagger(\rho-\sigma)}]$,，并令 $\mathcal{T}(\rho,\sigma) := \|\rho-\sigma\|_1/2$ 为迹距离。令 $H_2(p) := -p\ln p -(1-p)\ln(1-p)$ 为二维香农熵，则 Fannes–Audenaert不等式 [24, 25]为

$$|S(\rho) - S(\sigma)| \leq \mathcal{T}(\rho,\sigma)\ln(d-1) + H_2(\mathcal{T}(\rho,\sigma)), \tag{31}$$

其中 d 是 ρ 的维数，且 σ。已知此界是紧的。由式（27）和（28），可得

$$\Lambda_S(\rho_{SE}) \geq \Lambda_{\mathcal{T}}(\rho_{SE}) := -\delta_{\mathcal{T}}\ln(d_S d_E - 1) - H_2(\delta_{\mathcal{T}}), \tag{32}$$

其中 $\delta_{\mathcal{T}} := \mathcal{T}(\rho_{SE}, \rho_S\otimes\gamma_E(\beta_0^*))$。

假设 ρ_{SE} 可以写成

$$\rho_{SE} = \rho_S\otimes\gamma_E(\beta) + \chi_{SE}. \tag{33}$$

这里，χ_{SE} 是满足以下条件的厄米算符

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}_E[\chi_{SE}] &= 0, \\ \mathrm{tr}_S[\chi_{SE}] &= \chi_E, \end{aligned} \tag{34}$$

且 χ_E 是一个厄米算符，在H_E的能量本征基中表示时没有对角元素。根据对 χ_E的假设，式（12）给出 $\beta_0^* = \beta$，由此可得 $\delta_{\mathcal{T}} = \|\chi_{SE}\|_1/2$。因此，可以根据 $\|\chi_{SE}\|_1$计算下界式（32）。当$\rho_{SE} = \rho_S\otimes\rho_E$时，由 $\|A\otimes B\|_1 = \|A\|_1\|B\|_1$ 和 $\|\rho_S\|_1$ =1 可得 $\delta_{\mathcal{T}} = \mathcal{T}$（$\rho_E$，$\gamma_E(\beta_0^*)$）。结合式（30）与式（31），可得

$$\begin{aligned} &\Lambda_S(\rho_{SE}) \geq \Lambda'_{\mathcal{T}}(\rho_{SE}) := -\delta_{\mathcal{T}}\ln(d_E - 1) - H_2(\delta_{\mathcal{T}}), \\ &\text{if } \rho_{SE} = \rho_S\otimes\rho_E. \end{aligned} \tag{35}$$

D. 非负值的充分条件

我们通过迹距离给出了使 $\Delta\Sigma(\beta_0,\beta_\tau)$ 非负的充分条件。这一关系有助于直观地理解第 IIID 1 节中熵产生非负的区域。结合量子 Pinsker 不等式 [26] $D(\rho\|\sigma) \geq 2\mathcal{T}(\rho,\sigma)^2$与式（13）、（26）和（32），可得

$$\Delta\Sigma(\beta_0,\beta_\tau) \geq 2\mathcal{T}(\sigma_{SE}, \sigma_S\otimes\gamma_E(\beta_\tau))^2 + \Lambda_{\mathcal{T}}(\rho_{SE}) - D_\gamma(\beta_0), \tag{36}$$

其中 $D_\gamma(\beta_0) := D(\gamma_E(\beta_0^*)\|\gamma_E(\beta_0))$。因此，我们得到熵产生非负的充分条件如下。

$$\mathcal{T}(\sigma_{SE}, \sigma_S \otimes \gamma_E(\beta_\tau))^2 \geq \frac{1}{2}\left(D_\gamma(\beta_0) - \Lambda_{\mathcal{T}}(\rho_{SE})\right). \quad (37)$$

接下来，设初始态具有乘积形式， $\rho_{SE} = \rho_S \otimes \rho_E$。由式（10），可得$D(\sigma_{SE}\|\sigma_S \otimes \gamma_E(\beta_\tau)) \geq D(\sigma_E\|\gamma_E(\beta_\tau))$。与式（36）类似，由式（35），可得

$$\begin{aligned}\Delta\Sigma(\beta_0, \beta_\tau) &\geq D(\sigma_E\|\gamma_E(\beta_\tau)) + \Lambda'_{\mathcal{T}}(\rho_{SE}) - D_\gamma(\beta_0) \\ &\geq 2\mathcal{T}(\sigma_E, \gamma_E(\beta_\tau))^2 + \Lambda'_{\mathcal{T}}(\rho_{SE}) - D_\gamma(\beta_0).\end{aligned} \quad (38)$$

因此，我们得到如下充分条件:

$$\mathcal{T}(\sigma_E, \gamma_E(\beta_\tau))^2 \geq \frac{1}{2}\left(D_\gamma(\beta_0) - \Lambda'_{\mathcal{T}}(\rho_{SE})\right). \quad (39)$$

1. *Example*

我们考虑一个二维环境。设 $[0, \epsilon]$为环境哈密顿量 H_E的特征值。设 $\mathcal{M}_E$ 为环境所有可能的密度算符的集合。我们选取能量本征矢作为环境希尔伯特空间的基。对于 p， $s \in \mathbb{R}$和 $\mathfrak{a}$， $\mathfrak{b} \in \mathbb{C}$，环境的密度算符为

$$\rho_E = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1+p & \mathfrak{a} \\ \mathfrak{a}^* & 1-p \end{bmatrix}, \quad (40)$$

and

$$\sigma_E = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1+s & \mathfrak{b} \\ \mathfrak{b}^* & 1-s \end{bmatrix}, \quad (41)$$

其中 $\mathfrak{a}^*$ 和 $\mathfrak{b}^*$ 表示复共轭。由于 σ_E 的特征方程为 $\lambda^2 - \lambda + (1 - s^2 - |\mathfrak{b}|^2)/4 = 0$，要使 $[0, 1]$中存在特征值，必须满足 $s^2 + |\mathfrak{b}|^2 \leq 1$。因此，我们将集合 $\mathcal{M}_E$ 视为三维球。由于吉布斯态在能量本征态下对角化，因此它们分布在$\mathfrak{b} = 0$ （s-轴）上。对于 $r(\beta) \in \mathbb{R}$，吉布斯态为

$$\gamma_E(\beta) = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1+r(\beta) & 0 \\ 0 & 1-r(\beta) \end{bmatrix}. \quad (42)$$

这里，负的 $r(\beta)$对应于负的有效温度。由方程（12）可得 $r(\beta_0^*) = p$和 $r(\beta_\tau^*) = s$。由于 $\rho_E - \gamma_E(\beta_0^*)$和$\sigma_E - \gamma_E(\beta_\tau)$的特征值分别为 $\pm|\mathfrak{a}|/2$和$\pm\sqrt{(s - r(\beta_\tau))^2 + |\mathfrak{b}|^2}/2$，迹距离为 $\delta_{\mathcal{T}} = |\mathfrak{a}|/2$ 和$\mathcal{T}(\sigma_E, \gamma_E(\beta_\tau)) = \sqrt{(s - r(\beta_\tau))^2 + |\mathfrak{b}|^2}/2$。代入将这些结果代入方程（39），并利用方程（35），熵产生非负的一个充分条件为

$$(s - r(\beta_\tau))^2 + |\mathfrak{b}|^2 \geq 2H_2\left(\frac{|\mathfrak{a}|}{2}\right) + 2D_\gamma(\beta_0). \quad (43)$$

右侧仅取决于 ρ_E 的非对角元素，以及 β_0 和 β_0^*处吉布斯态之差。当 $\beta_t = \beta^C = \beta_0$时，这一区域是球体之外的部分，该球体的中心为（$r(\beta_0)$，0，0），半径为 $\sqrt{2H_2(|\mathfrak{a}|/2) + 2D_\gamma(\beta_0)}$。当 $\beta_t = \beta_t^*$时，回想一下$r(\beta_\tau^*) = s$，式（43）可化简为

$$|\mathfrak{b}|^2 \geq 2H_2\left(\frac{|\mathfrak{a}|}{2}\right). \quad (44)$$

IV. 结论

本研究通过量子相对熵之差，提出了适用于一般有效温度的熵产生定义。该定义自然推广了大环境下的熵产生，并施加以下要求：1）当初始态为乘积形式且环境的初始态取吉布斯态时，热力学第二定律成立；2）当初态与末态（包括有效温度）相同时，熵产生为零。所提出的熵产生可分解为一个克劳修斯型分量，以及一个随有效温度的时间变化而变化的分量。我们证明，对于有效温度 β_t^*，该定义可还原为先前提出的克劳修斯型定义；此处的有效温度定义为使环境的瞬时平均能量与吉布斯态的瞬时平均能量相等的温度。一般有效温度下的熵产生可分解为：若要使熵产生率像传统热力学中那样等于熵变与热量变化之和，有效温度必须为常数或等于 β_t^*。一般有效温度下的熵产生可分解为 β_t^* 下的熵产生与由有效温度定义之差所产生的量子相对熵之和。利用这一结果，我们还推导出了一般初始态下熵产生的下界，并基于迹距离给出了熵产生非负的充分条件。总的来说，本研究增进了我们对有效温度下熵产生的理解。

致谢

本研究得到 JSPS KAKENHI 项目资助，项目编号为 JP23K24915 和JP24K03008。

[1]J. Casas-V´azquez 和 D. Jou, 《非平衡态中的温度：未决问题与当前方案综述》, 《物理学进展报告》66, 1937（2003）。[2] S. Alipour、F. Benatti、M. Afsary、F. Bakhshinezhad、M. Ramezani、T. Ala-Nissila 和 A. Rezakhani, 《非平衡量子系统中的温度》, arXiv 预印本 arXiv:2105.11915（2021）。[3] P. Lipka-Bartosik、M. Perarnau-Llobet 和 N. Brunner, 《量子态温度的操作性定义》, 《物理评论快报》130, 040401（2023）。[4] S. V. Moreira、P. Samuelsson 和 P. P. Potts, 《与有限尺寸储库耦合的量子点的随机热力学》, 《物理评论快报》131, 220405（2023）。[5] P. Strasberg 和 A. Winter, 《量子热力学的第一定律和第二定律：基于熵的微观定义的一致推导》, 《PRX Quantum》2, 030202（2021）。[6] P. Strasberg、M. G. D´ıaz 和 A. Riera-Campeny, 《有限热浴的克劳修斯不等式揭示普适效率提升》, 《物理评论E》104, L022103（2021）。[7] A. C. Barato 和 U. Seifert, 《生物分子过程的热力学不确定性关系》, 《物理评论快报》114, 158101（2015）。[8] T. R. Gingrich、J. M. Horowitz、N. Perunov 和 J. L. England, 《耗散界限约束所有稳态电流涨落》, 《物理评论快报》116, 120601（2016）。[9] J. P. Garrahan, 《计数观测量首次通过时间的涨落与不确定性关系的简单界限》, 《物理评论E》95, 032134（2017）。[10] Y. Hasegawa 和 T. Van Vu, 《涨落定理不确定性关系》, 《物理评论快报》123, 110602（2019）。[11] P. Erker、M. T. Mitchison、R. Silva、M. P. Woods、N. Brunner 和 M. Huber, 《自主量子钟：热力学是否限制了我们的时间测量能力？》, 《物理评论X》7, 031022（2017）。[12] F. Carollo、R. L. Jack 和 J. P. Garrahan, 《揭示马尔可夫开放量子系统的大偏差统计》, 《物理评论快报》122, 130605（2019）。[13] G. Guarnieri、G. T. Landi、S. R. Clark 和 J. Goold, 《量子非平衡稳态中的精度热力学》, 《物理评论研究》1, 033021（2019）。[14] Y. Hasegawa, 《连续测量的量子热力学不确定性关系》, 《物理评论快报》125, 050601（2020）。[15] G. T. Landi 和 M. Paternostro, 《不可逆熵产生：从经典到量子》, 《现代物理评论》93, 035008（2021）。[16] M. Esposito、K. Lindenberg 和 C. Van den Broeck, 《熵产生作为系统与储库之间的关联》, 《新物理学杂志》12, 013013（2010）。[17] G. Manzano、J. M. Horowitz 和 J. M. R. Parrondo, 《任意环境下的量子涨落定理：绝热与非绝热熵产生》, 《物理评论X》8, 031037（2018）。[18] S. Aimet、M. Tajik、G. Tournaire、P. Sch¨uttelkopf、J. Sabino、S. Sotiriadis、G. Guarnieri、J. Schmiedmayer 和 J. Eisert, 《在量子多体区间实验探测兰道尔原理》, 《自然物理》, 1（2025）。[19] S. Mondal、A. Bhattacharyya、A. Ghoshal 和 U. Sen, 《修正的兰道尔原理：麦克斯韦妖利用一般系统-环境量子态能获得多少？》, arXiv 预印本 arXiv:2309.09678（2023）。[20]P. M. Riechers 和 M. Gu, 《任意量子过程的热力学耗散的初态依赖性》, 《物理评论E》103, 042145（2021）。[21] K. Ptaszy´nski 和 M. Esposito, 《熵产生中信息论贡献的系综依赖性》, 《物理评论E》107, L052102（2023）。[22] P. Bocchieri 和 A. Loinger, 《量子复现定理》, 《物理评论》107, 337（1957）。[23] D. Reeb 和 M. M. Wolf, 《具有有限尺寸修正的改进兰道尔原理》, 《新物理学杂志》16, 103011（2014）。[24] M. Fannes, 《自旋晶格系统熵密度的连续性》, 《数学物理通讯》31, 291（1973）。[25] K. M. Audenaert, 《冯·诺依曼熵的尖锐连续性估计》, 《物理学杂志A：数学与理论》40, 8127（2007）。[26] M. Ohya 和 D. Petz, *Quantum Entropy and Its Use*, 第2版, 《物理学文本与专著》（Springer, 2004）。

附录 A：式(12) 的解的唯一性

对 β 求 $\mathbb{E}_\gamma[H_E](\beta) := \mathrm{tr}_E[\gamma_E(\beta)H_E]$ 的导数，得到

$$\frac{d}{d\beta}\mathbb{E}_\gamma[H_E](\beta) = -\mathrm{Var}_\gamma[H_E](\beta) < 0, \tag{A1}$$

其中 $\mathrm{Var}_\gamma[H_E](\beta) := \mathbb{E}_\gamma[H_E^2](\beta) - \mathbb{E}_\gamma[H_E](\beta)^2$ 是 H_E 的方差。令 $\epsilon_{\max}$ 和 $\epsilon_{\min}$ 分别为 H_E 的最大和最小特征值。由于 $\mathbb{E}_\gamma[H_E](\beta)$ 严格递减且 $\mathbb{E}_\gamma[H_E](-\infty) = \epsilon_{\max}$, $\mathbb{E}_\gamma[H_E](\infty) = \epsilon_{\min}$，方程 (12) 总是有唯一解。

附录 B：方程 (14) 的证明

代入 $S(\sigma_{SE}) = S(\rho_{SE})$ 至方程 (13) 中，可得

$$\begin{aligned}\Delta\Sigma(\beta_0,\beta_\tau) &= \Delta S_S + \Delta S_E + D(\sigma_E\|\gamma_E(\beta_\tau)) - D(\rho_E\|\gamma_E(\beta_0))\\ &= \Delta S_S + \beta_\tau \mathrm{tr}_E[\gamma_E(\beta_\tau)H_E] - \beta_0 \mathrm{tr}_E[\gamma_E(\beta_0)H_E] + \ln\mathcal{Z}(\beta_\tau) - \ln\mathcal{Z}(\beta_0)\\ &= \Delta S_S + \int_0^\tau \frac{d}{dt}\left(\beta_t \mathrm{tr}_E[\rho_E(t)H_E] + \ln\mathcal{Z}(\beta_t)\right)dt\\ &= \Delta\Sigma_{\mathrm{CL}}[\beta_t] + \int_0^\tau \left(\frac{d\beta_t}{dt}\mathrm{tr}_E[\rho_E(t)H_E] + \frac{d}{dt}\ln\mathcal{Z}(\beta_t)\right)\\ &= \Delta\Sigma_{\mathrm{CL}}[\beta_t] + \int_0^\tau \dot\beta_t \left.\frac{\partial}{\partial\beta}D(\rho_E(t)\|\gamma_E(\beta))\right|_{\beta=\beta_t},\end{aligned} \tag{B1}$$

这里我们使用

$$D(\rho_E(t)\|\gamma_E(\beta)) = -S(\rho_E(t)) + \beta\mathrm{tr}_E[\rho_E(t)H_E] + \ln\mathcal{Z}(\beta), \tag{B2}$$

在最后一个等式中。利用方程 (10), 得到适用于 14 的方程

$$\Delta D[\beta_t] = \int_0^\tau \dot\beta_t \left.\frac{\partial}{\partial\beta}D(\rho_E(t)\|\gamma_E(\beta))\right|_{\beta=\beta_t} = \int_0^\tau \dot\beta_t \left.\frac{\partial}{\partial\beta}D(\rho_{SE}(t)\|\rho_S(t)\otimes\gamma_E(\beta))\right|_{\beta=\beta_t} dt. \tag{B3}$$

利用方程 (12), (B2) 以及 $\partial_\beta \ln\mathcal{Z}(\beta) = -\mathrm{tr}_E[\gamma_E(\beta)H_E]$，可得

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial}{\partial\beta}D(\rho_E(t)\|\gamma_E(\beta))\right|_{\beta=\beta_t} &= \mathrm{tr}_E[\rho_E(t)H_E] - \mathrm{tr}_E[\gamma_E(\beta_t)H_E]\\ &= \mathrm{tr}_E[\gamma_E(\beta_t^*)H_E] - \mathrm{tr}_E[\gamma_E(\beta_t)H_E].\end{aligned} \tag{B4}$$

因此，方程 (15) 中的第二个等式成立。

Appendix C: Proof of Eq. (17) and (22)

吉布斯态 $\gamma_E(\beta_t^*)$ 满足

$$\begin{aligned}0 = D(\gamma_E(\beta_t^*)\|\gamma_E(\beta_t^*)) &= D\left(\gamma_E(\beta_t^*)\|e^{-\beta_t^* H_E}/\mathcal{Z}(\beta_t^*)\right)\\ &= -S(\gamma_E(\beta_t^*)) + \beta_t^*\mathrm{tr}_E[H_E\gamma_E(\beta_t^*)] + \ln\mathcal{Z}(\beta_t^*).\end{aligned} \tag{C1}$$

通过 合并式（B2）与 β_t^* [式（12）] 的定义，并利用这一等式，可得

$$\begin{aligned}D(\rho_E(t)\|\gamma_E(\beta_t^*)) &= -S(\rho_E(t)) + \beta_t^*\mathrm{tr}_E[H_E\gamma_E(\beta_t^*)] + \ln\mathcal{Z}(\beta_t^*)\\ &= S(\gamma_E(\beta_t^*)) - S(\rho_E(t)).\end{aligned} \tag{C2}$$

由式（12）、（B2）及这一关系，可得式（17），如下所示。

$$\begin{aligned}&D(\rho_E(t)\|\gamma_E(\beta)) = -S(\rho_E(t)) + \beta\mathrm{tr}_E[H_E\gamma_E(\beta_t^*)] + \ln\mathcal{Z}(\beta)\\ &= [S(\gamma_E(\beta_t^*)) - S(\rho_E(t))] + [-S(\gamma_E(\beta_t^*)) + \beta\mathrm{tr}_E[H_E\gamma_E(\beta_t^*)] + \ln\mathcal{Z}(\beta)]\\ &= D(\rho_E(t)\|\gamma_E(\beta_t^*)) + D(\gamma_E(\beta_t^*)\|\gamma_E(\beta)).\end{aligned} \tag{C3}$$

将式（C2）和互信息的定义 [式（4）] 代入式（10），可得式（22）：

$$\begin{aligned}&D(\rho_{SE}(t)\|\rho_S(t)\otimes\gamma_E(\beta_t^*)) = I(\rho_{SE}(t)) + D(\rho_E(t)\|\gamma_E(\beta_t^*))\\ &= I(\rho_{SE}(t)) + S(\gamma_E(\beta_t^*)) - S(\rho_E(t)) = S(\rho_S(t)) + S(\gamma_E(\beta_t^*)) - S(\rho_{SE}(t)).\end{aligned} \tag{C4}$$