Young Scientists Meeting on Statistical Physics and Information Processing 2010

等エネルギー過程及びエネルギー制御系でのJarzynski 等式

勝田 仁之
東京工業大学 理学部 物理学科 4 年

1997 年に C. Jarzynski によって「Jarzynski 等式」が発見された [1, 2]。Jarzynski 等式とは、温度 β の環境下で系に仕事 W を加えたときに成り立つ次の等式である。

$$\langle \exp(-\beta W) \rangle = \exp(-\beta \Delta F). \tag{1}$$

ここで ΔF は仕事の前後での Helmholtz 自由エネルギーの変化である。Jarzynski 等式の左辺 $\langle \cdots \rangle$ は非平衡過程での W に関するアンサンブル平均である一方、右辺は平衡状態での物理量のみで記述される。すなわち非平衡過程での物理量と平衡状態での物理量が等式で結ばれている。Jarzynski 等式が発見されるまでは、不等式でしか両者を結びつけるものは知られていなかった。例えば Clausius 不等式などである。これにより非平衡現象への Jarzynski 等式によるアプローチは急速に進み、今日でも盛んに行われている。また Jarzynski 等式の理論は古典系に関しては完成しているものの、量子系に対しては孤立系のみでしか明確な形での証明が与えられていない。

上で述べた内容は等温環境でのものであったが、2005 年には A. B. Adib によって等エネルギー過程においても Jarzynski 等式が発見された [3]。等エネルギー過程とは、ハミルトニアンの関数形は変化してもその値はエネルギー浴の効果によって常に E で一定に保たれるような過程である。通常のハミルトン力学に相空間上の人工的な場 $\mathbf{F} = (\mathbf{F}_x, \mathbf{F}_p)$ を付け加え、

$$\dot{\mathbf{x}}_t = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_t} + \mathbf{F}_x \ , \ \dot{\mathbf{p}}_t = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_t} + \mathbf{F}_p \tag{2}$$

とすることで実現する。等エネルギー過程での Jarzynski 等式は、仕事を加える時間を t_s として次のように表される。

$$\langle \exp(t_s \overline{\Lambda_{t_s}}) \rangle = \exp(\Delta S / k_B). \tag{3}$$

ただし

$$\overline{\Lambda_{t_s}} = \frac{1}{t_s} \int_0^{t_s} dt \frac{\partial}{\partial \mathbf{\Gamma}_t} \cdot \dot{\mathbf{\Gamma}}_t$$

であり、

$$\mathbf{\Gamma}_t = (\mathbf{x}_t \, , \mathbf{p}_t) \, , \, \Delta S : \text{エントロピー変化} \, , \, k_B : \text{ボルツマン定数}.$$

とする。しかしながら、等エネルギー過程での具体的な系による検証は未だ全く報告されていなかった。エネルギーという、温度とは別の切り口からの非平衡物理へのアプローチを開拓していくためにも、具体的な系への適用を進めていくべきであると考える。そこで調和振動子をモデルとして等エネルギー過程での Jarzynski 等式を具体的な系で検証し、両辺の値が一致することを確認した。

さらに上記の結果をエネルギー制御系へと拡張した。エネルギー制御系とは、$E = E(t)$ の様に系のエネルギーの値を外から任意に制御した系である。連続自由度であるエネルギーを外から制御することで、系の基底状態付近の解析、粒子をポテンシャルの中に捕捉、あるいは最適化問題への応用などに利用できると考えられる。エネルギー制御系でも Jarzynski 等式は等エネルギー過程の場合と全く同様な形に拡張できて、こちらについても具体的な系での検証を行い両辺の値が一致することを確かめた。

今後の課題として、等エネルギー過程及びエネルギー制御系での Jarzynski 等式を量子力学の枠組みの中で構築したい。量子系では離散的な物理量を扱うことができるので、スピン系などに対してもエネルギー制御が可能である。そうなれば最適化問題など、情報科学への応用の可能性もますます高まる。等温環境下での量子系 Jarzynski 等式の証明における困難は、本質的には熱浴の確率的な取り扱い方にある。一方エネルギー制御系では式 (2) のように、通常のダイナミクスにエネルギー浴の項を加えて取り扱っている。このことがエネルギー浴を取り扱いやすくしている要素である。量子系へエネルギー制御系での Jarzynski 等式を拡張していく中で、そのような利点、あるいは生じる問題点を明確にしていきたい。

参考文献

[1] C. Jarzynski, *Nonequilibrium Equality for Free Energy Differences*, Phys. Rev. Lett. **78**, 2690 (1997).

[2] C. Jarzynski, *Equilibrium free-energy differences from nonequilibrium measurement: A master-equation approach*, Phys. Rev. E. **56**, 5018 (1997).

[3] A. B. Adib, *Entropy and density of states from isoenergetic nonequilibrium processes*, Phys. Rev. E. **71**, 056128 (2005).