

エネルギー制御系における Jarzynski 等式—その理論と応用

勝田 仁之¹

東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻 M1

1997年、Jarzynski によって「Jarzynski 等式」が発見された [1, 2]。Jarzynski 等式とは、系に仕事 W を加えたときに任意の系について非平衡過程においても厳密に成り立つ次の等式である。

$$\langle e^{-\beta W} \rangle = e^{-\beta \Delta F}. \quad (1)$$

Jarzynski 等式の持つ意味を理解するために、下図 1 のような状況を考察しよう。

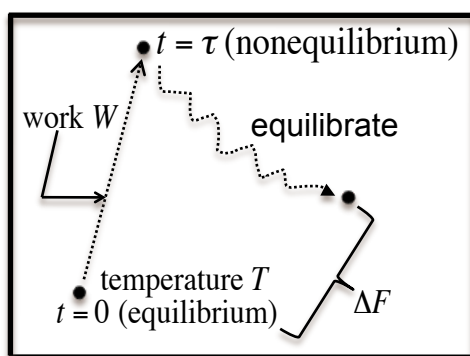


図 1: Jarzynski 等式 of 概念図。

まず、初期時刻 $t=0$ で系は逆温度 β の熱平衡状態にある。(初期時刻で温度を指定しさえすれば、その後は別の熱浴と接触させようと系を孤立させようと以下の議論に変更はない。)そこに終時刻 $t=\tau$ まで仕事 W を加える。もちろん仕事を加えるのをやめた時点では系は非平衡状態にあるが、十分時間が経過すれば系は平衡状態に落ち着くだろう。(これはもちろん仮定である)すると、仕事を加える前後の熱平衡状態の間には Helmholtz 自由エネルギーに差 ΔF が生じる。ここで注意したいのは、ミクロな視点で(つまり力学的に)系を見ると温度 β の熱平衡状態には無数の状態があるということである。その無数にある平衡状態の内、どの状態から出発するかによって仕事 W の値は異なる。Jarzynski 等式 (1) の左辺は、そのすべての仕事に関して $e^{-\beta W}$ という量の統計平均を取ることを意味している。つまり左辺は非平衡状態に関する値である。一方右辺に現れる物理量は温度と Helmholtz 自由エネルギーであるから、右辺は平衡状態に関する値である。

従来の平衡状態と非平衡状態の間に成り立つ関係式は不等式であったが、Jarzynski 等式は厳密な“恒等式”であることに注意されたい。(また、そのような不等式は Jarzynski 等式から導出できる。)しかも適用対象はどんなに平衡状態から大きく外れた系であろうと構わない。そのような事情から、近年 Jarzynski 等式に対する注目はますます高まるばかりである。様々な系に Jarzynski 等式が適用されていく一方で、その理論の拡張も盛ん

¹katsuda@stat.phys.titech.ac.jp

である。2000年にはCrooksによってゆらぎの定理を用いた確率論的な視点からの再検討が行われた [3]。さらに同年には田崎によって孤立量子系 [4]、2009年にはCampisiらによって開放量子系についても [5]Jarzynski 等式が成立することが示された。

2005年にはAdibによって等エネルギー過程におけるJarzynski 等式が報告された [6]。等エネルギー過程とは、ハミルトニアン関数形は変化してもその値は人工的な熱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。本講演ではさらに上記の結果をエネルギー制御系²へと拡張した結果について報告する。[7] 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、Adibの理論に比べてより一般性の高い理論となり、応用可能性もさらに広がった。本講演ではその理論の枠組みを説明し、さらに応用例のひとつとして最適化問題への応用を紹介する。

今後の課題として、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理論が適用可能となるし、トンネル効果に代表される量子ゆらぎも利用できる。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。その周辺の話題も講演の中で紹介する。

参考文献

- [1] C. Jarzynski, Phys. Rev. Lett. **78**, 2690 (1997).
- [2] C. Jarzynski, Phys. Rev. E. **56**, 5018 (1997).
- [3] G. E. Crooks, Phys. rev. E. **61**, 2361 (2000).
- [4] H. Tasaki, arXiv: cond-mat/0009244 (2000).
- [5] M. Campisi, P. Talkner, and P. Hanggi, Phys. Rev. Lett. **102**, 210401 (2009)
- [6] A. B. Adib, Phys. Rev. E. **71**, 056128 (2005).
- [7] H. Katsuda and M. Ohzeki, arXiv:1101.3826 (2011)

²これは京都大学大学院情報学研究科システム科学専攻の大関真之氏との共同研究である。