



2023年2月7日

報道関係者各位

慶應義塾大学

確率分布間距離にひそむ熱力学的意味の発見 —熱力学的時間の矢に新たな知見—

慶應義塾大学工学部のヴァー・バン・タン研究員と齊藤圭司教授は、熱環境(※1)にさらされた系における確率分布を考察し、2つの分布間距離を熱力学的不可逆性(※2)の度合いを使って解釈する関係式を見出しました。熱力学第二法則の根幹となる熱力学エントロピー(※3)と、状態間の動きやすさの度合いを示す量を導入することによって、熱環境にさらされた広範囲のダイナミクスが示す系の分布関数がこれらの量と密接に関連することが示されました。この発見は、熱力学的状態を動的に操作する際の操作時間を理解する上での基礎を与え、また、熱力学的な時間の矢の理解を深めます。さらに、熱環境下で動作するさまざまなデバイスにおける性能限界を理解する上で有用な知見を与えると期待されます。本研究成果は、2023年2月3日(現地時間)に米国物理学会誌「Physical Review X」のオンライン版にて公開されました。

1. 本研究のポイント

- 物理学において距離を定義し、その物理的な意味を明確にすることは、非常に重要です。例としては、相対性理論(※4)における時空間の距離があり、距離を定義し物理的に解釈することにより、光速に近い力学的運動を緻密に議論することが出来るようになりました。熱力学における確率分布においても、類似した距離と解釈が重要になることがあります。これまで、熱環境下での限定的なダイナミクスに対しては、確率分布間距離とその熱力学的解釈が存在しましたが、すべてのダイナミクスに対して適用できる熱力学的解釈が存在せず、理論が期待されていました。
- 熱力学エントロピーは、熱力学的不可逆性を記述する上で最も重要な物理量ですが、それ以外にも、状態間の遷移が熱力学的な外力によって誘起される割合(状態間のモビリティと呼ばれる)を導入すると、統一的な解釈がなされることが分かりました。
- 本理論により、熱力学的な操作を有限スピードで行う場合の熱力学的不可逆性の度合いを定量的かつ正確に議論することが可能になりました。また、熱環境下で動作するさまざまなデバイスにおいて、性能限界を理解する上で有用な知見を与えると期待されます。

2. 研究背景

図1(a)に示すように、箱の中に閉じ込められた気体を考えてみましょう。気体はアボガドロ数個(※5)の分子からなり、分子は分子同士相互に作用しながら、ニュートンの運動方程式に従い運動しています。ニュートン力学に従っているわけですから、個々の分子の速度は決定論的に決まってしまう。しかし気体の個数は膨大ですので、個々の分子の運動を正確に追うことは極めて困難です。そこで、すべての情報を得ることを断念し、ある領域に注目してその中の分子の速度分布を考えてみましょう。すると、速度分布は箱の中の気体の温度を使って、マックスウェル分布(※6)と呼ばれる普遍的な分布を持つことが分かります。この分布は、箱が孤立した状態でなく同じ温度の熱環境に接していても変化することはありません。つまり、普遍的な分布なのです。このように、熱力学的な対象に対しては、個々の力学的詳細を追うのではなく、むしろ「分布」を考えることで普遍的な側面を見ることが出来ます。

次に今度は、孤立した箱図 1(a) の状態から、突然箱の体積を 2 倍にしましょう (図 1(b))。この場合もやはり、内部では粒子たちがニュートンの運動方程式に従って運動していきます。我々の日常的感覚からも予想できるように、気体は一様に広がります。そして広がった気体は事実上 2 度と元の体積内に収まることはありません。このように元に戻らない熱力学的な性質は、「熱力学的不可逆性」と呼ばれます。物理学にはさまざまな分野がありますが、自然界におけるこのような「時間の矢」を記述するのは熱力学のみです。熱力学では、この不可逆性は、エントロピーという物理量を使って熱力学第二法則という法則でまとめられています。

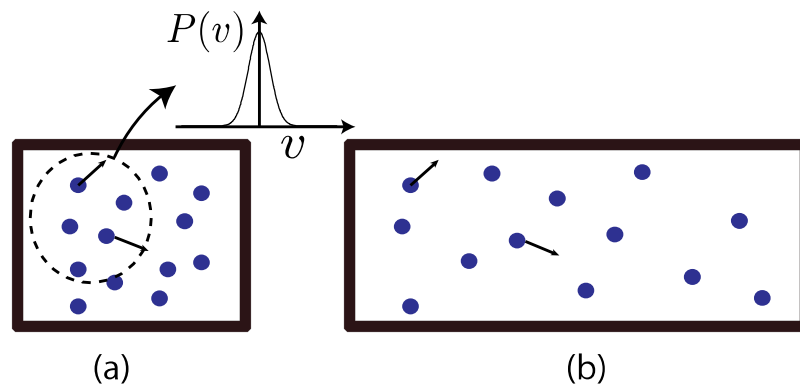


図 1(a): 箱に入ったアボガドロ数個の分子からなる気体。ある領域に注目し速度の分布をみると普遍的な分布になる。(b): 体積を急激に 2 倍にしたときの様子。

近年、熱力学はナノスケールやミクロンスケール(※7)サイズの小さな系にも適用され、大きな熱的なゆらぎのある状況でも、さまざまな熱力学的性質が研究されています。このようなゆらぎの大きい熱力学は「ゆらぎ系の熱力学」(※8)として体系付けられ、活発に議論されています。例えば、図 2(a)のように、コロイドをある温度の水に入れ、レーザートラップという技術でポテンシャル中に閉じ込め、ポテンシャルを時間的に変化させます。この場合も、コロイド粒子の位置の「分布」を考えます。熱環境とみなされる水分子も考えると膨大な粒子の数になります。このことから、水分子を含めた個々の粒子の力学的情報でなく、注目する代表的な粒子の「分布」が熱力学的に重要な情報を与えます。この場合も、熱力学的不可逆性の性質の詳細は、最重要課題としてさまざまな角度から調べられています。また、図 2(b)のように、我々の体の中にある生体内の分子モーター(※9)なども、熱環境にさらされながら確率的な動きを示す重要な物理的な対象になります。分子モーターの回転に関する確率的な挙動は、実験的にも理論的にも活発に議論されています。分子モーターでは、回転角度が 120 度ずつ動くため、離散的な (飛び飛びの値を持つ) 状態を示す系としても捉えることができ、その分布とその時間的変化が重要になります。

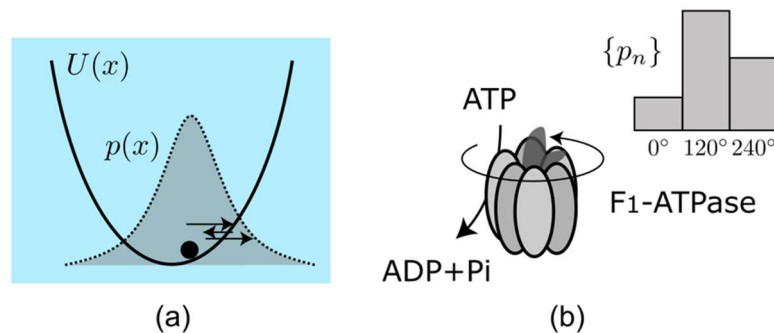


図 2(a): 水の中 (熱環境) でランダムな挙動を示すコロイド粒子。(b): 生体内の分子モーターの概念図。

このように、熱環境下にある熱力学的な物理的対象では「分布」が活躍し、熱力学的な時間の矢を理解する上での基盤になります。それでは、ある時刻である分布をとり、後の時刻で別の分布をとるとき、その分布の違い、あるいは分布の距離には、物理的にどのような深い意味が隠されているのでしょうか？物理学において距離を定義し、その物理的な意味を明確にすることは、深い物理的な性質を探る上で非常に役に立つ場合があります。例えば相対性理論においては、物理的な考察から時空間の距離を定義し解釈することにより、光速近くで運動する物体の力学を緻密に議論することが出来るようになりました。熱力学では、果たして、確率分布間の距離とその解釈によって時間の矢の詳細をより緻密化することができるのでしょうか？

3. 研究内容・成果

本研究グループは、分布間の距離を特徴づけるため、ワッサースタイン計量と呼ばれる計量に着目しました。ワッサースタイン計量は、もともと、初期に配置された荷物を別の配置に配置換えするために必要な、動かす荷物の最小距離を定量化する数学的な量です。全く別の荷物の配置を考えると、移動する距離が遠いため、配置換えをするためには「苦勞」をしなければなりません。その苦勞の度合いをワッサースタイン計量は数学的に定量化していると言えます。熱力学における確率分布の文脈では、ある分布から別の分布に動かすために、確率過程(※10)のダイナミクスを考え、状態に割り当てられた分布を移動するためのコストを考えることとなります。そのコストは、熱力学的にどのような苦勞が必要かを定量化してくれるのです。本研究グループは、状態間レベルでのモビリティという物理量を導入しました。そして、「熱力学的エントロピー」と「状態間のモビリティ」が確率分布間の距離と結びつき、ある分布から別の分布に移る際に、熱力学的な意味で支払わなければならないコストの度合いになることを見出しました。

この関係を使うと、ある分布から別の分布への操作に要する時間に関して、熱力学的な限界を緻密に議論することが出来ます。本研究グループは、この関係の応用として、情報処理で重要になる情報の初期化のスピードを定式化することにも成功しました。これは、計算と熱力学を時間の観点から結びつけるものです。さらに、ダイナミクスが量子力学的な過程である場合でも、同様な定式化することに成功しています。

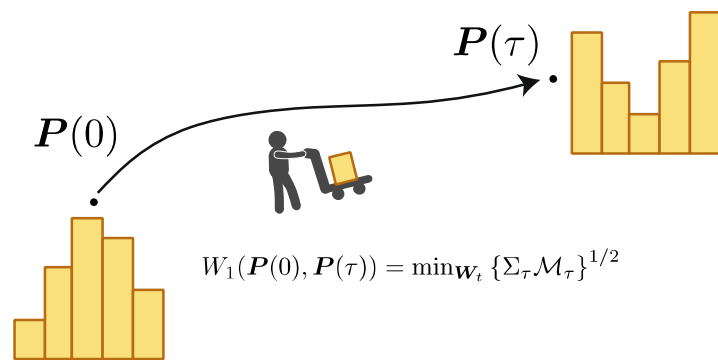


図 3: 分布から分布への変化の概念図。

4. 今後の展開

本研究は、熱環境下で有限時間に系を操作する際、その操作スピードに関する重要な知見を与えます。状態間のモビリティという物理量は今回の研究で新しく導入されたものであり、本研究の文脈以外でどのように役立つかに関して、さらなる研究が必要になります。また、今回得た確率分布変化に対する熱力学的解釈は、熱環境で動作する計算機や量子デバイスへの定量的応用などが期待され、より具体的な設定での研究が必要になります。

<研究支援>

本研究は日本学術振興会（JSPS）科学研究費補助金基盤研究（S）「メゾスコピック量子ホール系の低次元準粒子制御と非平衡現象（研究代表者：藤澤 利正）」による支援を受けて行われました。

<原論文情報>

Tan Van Vu and Keiji Saito, “Thermodynamic Unification of Optimal Transport: Thermodynamic Uncertainty Relation, Minimum Dissipation, and Thermodynamic Speed Limits”, *Physical Review X*, Published online

doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.13.011013>

<用語説明>

- ※1 熱環境：温度を持ち多数の粒子からなる環境を指す。一定温度を持つ空気や、水などは典型的な熱環境を与える。
- ※2 熱力学的不可逆性：熱力学的に元に戻れない性質。熱力学第二法則によって定量的に記述される。
- ※3 熱力学エントロピー：熱力学第二法則において、熱力学的な不可逆性を定量的に表現するための物理量。
- ※4 相対性理論：物体の速度が光速を超えられないことを考慮し、時空間の距離を定義することで、光速に近い運動での力学を正確に記述する。
- ※5 アボガドロ数：物質1モルを構成する粒子の個数。 6×10^{23} 乗。巨視的な熱力学的対象の典型的な粒子数。
- ※6 マックスウェル分布：固定された温度での粒子の速度分布。ガウス分布と呼ばれる分布で表される。
- ※7 ナノスケールやミクロンスケール：ナノメートルは、10億分の1メートルであり、ミクロン（マイクロメートル）は、100万分の1メートル。
- ※8 ゆらぐ系の熱力学：熱的にゆらぐ微小系でも、熱力学を議論できるように体系付けられた学問分野。
- ※9 分子モーター：生体内にあるモーター。ミトコンドリア膜にあり、アデノシン三リン酸を合成しながら水素イオンを輸送して回転するが、取り外すとアデノシン三リン酸を分解しながら回転する。熱環境下で動作する、微小な機関である。
- ※10 確率過程：確率分布の時間発展を与えるダイナミクスのもとでの分布の時間発展。

※ご取材の際には、事前に下記までご一報くださいますようお願い申し上げます。

※本リリースは文部科学記者会、科学記者会、各社科学部等に送信させていただいております。

・研究内容についてのお問い合わせ先

慶應義塾大学 理工学部 物理学科 教授 齊藤 圭司（さいとう けいじ）

TEL：045-566-1652 FAX：045-566-1672 E-mail：saitoh@rk.phys.keio.ac.jp

・本リリースの配信元

慶應義塾広報室（望月）

TEL：03-5427-1541 FAX：03-5441-7640

E-mail：m-pr@adst.keio.ac.jp <https://www.keio.ac.jp/>