2013 年 6 月 17 日、田崎晴明

「現代物理学」レポート 4

4-1. 以下の手順に従って Jensen 不等式を証明せよ[*1]。

まず、任意の実数 $f_1,\, f_2$ と $0 \le p \le 1$ を満たす p について、

$$e^{pf_1+(1-p)f_2} \le p\, e^{f_1} + (1-p)e^{f_2} \tag{1}$$

を示せ。みなさんにとってどういう証明が親しみやすいのかはわからないが、本質は凸性（$(e^x)'' \ge 0$）に尽きる。

次に $\Omega = 1, 2, \ldots$ として、任意の実数 $f_1, f_2, \ldots, f_\Omega$ と確率分布 $\boldsymbol{p} = (p_1, p_2, \ldots, p_\Omega)$ について、

$$\exp\Bigl[\sum_{i=1}^{\Omega} p_i f_i\Bigr] \le \sum_{i=1}^{\Omega} p_i e^{f_i} \tag{2}$$

を示せ。$\Omega = 2$ の場合は既に示したから Ω についての数学的帰納法を使う。

4-2. Jarzynski 等式は様々な設定で証明できる。離散状態系についての一つのバージョンを示そう[*2]。

ある物理系の状態が $i = 1, 2, \ldots, \Omega$ と指定され、対応するエネルギーは E_i だとする。系の初期状態はカノニカル分布

$$p_i^{\mathrm{can}} = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z(\beta)} \tag{3}$$

で表現されるとする。

ここでは、系への操作の結果は、状態の確率的な変化で表現されるとする。つまり、系の初期状態が i のとき、操作後の状態が j である確率は $\tau_{i\to j} \ge 0$ であるとする。確率の意味からして、とうぜん規格化条件

$$\sum_{j=1}^{\Omega} \tau_{i\to j} = 1 \tag{4}$$

[*1] ここでは離散的な状態の場合のみを扱う。講義では連続状態についての不等式を使ったが、それは、（リーマン積分の定義に戻れば）離散的な場合の極限として証明できる

[*2] 実は、当初の計画では、このバージョンを講義で扱うつもりでいた。でも、実際にやったニュートン力学バージョンのほうが圧倒的によかった。

が任意の i について成立する。また、この確率は、任意の j に対して、

$$\sum_{i=1}^{\Omega} \tau_{i \to j} = 1 \tag{5}$$

という条件も満たすとする。これは当たり前の条件ではなく、力学系の Liouville の定理に相当する物理的な要請である[*3]。

こうして、初期状態と操作が定式化された。系の初期状態が i であり、かつ、操作後の状態が j である確率は、

$$p_{i,j} := p_i^{\mathrm{can}}\, \tau_{i \to j} \tag{6}$$

と書ける。これは規格化

$$\sum_{i=1}^{\Omega} \sum_{j=1}^{\Omega} p_{i,j} := 1 \tag{7}$$

を満たす。よって、一般に i, j 双方に依存する量 $f_{i,j}$ の期待値を

$$\langle \hat{f} \rangle := \sum_{i=1}^{\Omega} \sum_{j=1}^{\Omega} p_{i,j} f_{i,j} \tag{8}$$

と定義する。

系の初期状態が i であり、操作後の状態が j であるとき、系が外にした仕事は

$$W_{i,j} := E_i - E_j \tag{9}$$

である。Jarzynski 等式

$$\left\langle e^{\beta \hat{W}} \right\rangle = 1 \tag{10}$$

を示せ。

4-3. 上の問題と同じ設定。$\Omega = 2$ とでもして、(4), (5) を満たす $\tau_{i \to j}$ の具体例（実際に、数字をあてはめる）を作り、$\left\langle e^{\beta \hat{W}} \right\rangle$ と $\langle \hat{W} \rangle$ を具体的に計算し[*4]、その結果を吟味せよ。

[*3] **量子力学をご存知の人へ：** これは、量子力学系のユニタリー性にも対応する。実際、エネルギー固有状態を ψ_i と書き、操作を伴う時間発展の演算子を $\hat{U}$ とすると、$|\langle \psi_j, \hat{U} \psi_i \rangle|^2$ が $\tau_{i \to j}$ に対応する。条件 (4), (5) は自動的に成立する（やってみよう）。

[*4] β, E_1, E_2 はそのまま残して期待値を評価せよ。