

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 5 日現在

機関番号：32660

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2016

課題番号：26800205

研究課題名(和文)統計力学への幾何学的アプローチ

研究課題名(英文)A geometric approach to statistical physics

研究代表者

橋爪 洋一郎 (Hashizume, Yoichiro)

東京理科大学・理学部第一部応用物理学科・助教

研究者番号：50711610

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：フィッシャー情報行列によって定義された多様体上で、熱力学的状態変化を追跡できる可能性を示した。特に、測地線の物理的意味に直結する具体的な解析を、典型的な統計力学模型に対して行った。その結果、多様体上の距離が状態変化の変化量と見做すことができることが明らかになった。これは始点と終点と同じであっても、経路によって途中での状態の変化が等しくないことを示すことにもなった。これらの結果と熱場ダイナミクスとの関係や、量子アニーリングを用いた特異値分解の提案にもつながった。

研究成果の概要(英文)：We showed a possibility to trace the change of states along a thermodynamic process using a Riemannian manifold defined by Fisher metric. For example, some typical toy models were investigated by means of geodesic lines. As a result, the difference of states on a thermodynamic process can be described by the path length on the manifold. Furthermore, this research project also presented relations between the present dynamics and thermo-field dynamics, and how to perform singular-value decomposition using quantum annealing.

研究分野：統計物理学

キーワード：熱力学的状態変化 情報幾何学 相図 準静的過程

## 1. 研究開始当初の背景

一般に、平衡系の統計力学を用いて実際の物質などを研究する際に困難となるのは、自由エネルギーを直接、しかもある程度厳密に、求めることが難しい点である。特に、系のもつ幾何学的な特徴であるフラストレーションやベリ位相のような量子効果などが非常に複雑であるため、トレース演算を行う一般論が構築できていない。しかし、物質科学に限らず物理学全般において幾何学的に特殊な構造を持つ系は多く、それらの研究に対しては個別にさまざまなアプローチが構成されてきている。近年では、これらの特殊な構造を反映した、量子状態や非平衡状態の実現などが実験的にも確認されるようになってきている。そのため、より一般的な視点から統計力学の幾何学的構造を明らかにすることで、多体系の理解を飛躍的に進展させることができると期待される。

## 2. 研究の目的

本研究では系の密度行列の持つ幾何学的な側面に注目して、平衡系を中心とした統計力学への一般的な応用を確立し、相図などのグローバルな幾何学的性質を明らかにすることを目的とする。平衡系の統計力学は、物質科学を中心として非常に有効だが、一般に分配関数におけるトレースの演算は非常に難しいことが多い。この問題に対して、幾何学的な視点から一般的に議論できる有効な理論を構築する。具体的には、統計力学的関数と幾何学的な量との関係を明らかにし、統計力学への幾何学的アプローチを体系付け、物性物理学への応用を可能にする。これらの研究を通して、伝統的な方法ではアプローチの難しい問題に取り組むひとつの新しい視点を提供する。

## 3. 研究の方法

ある系がどのような状態をとっているかは、その系の温度や体積などといった熱力学変数の組を指定することで定めることができる。このような熱力学変数の組を  $\{x^\mu\}$  と表す。熱力学変数  $\{x^\mu\}$  を特定の条件の下で変化させて、例えば断熱変化や等温変化を行う場合に、熱力学変数の変化量の絶対値は同じであったとしても、条件付き状態変化の下で実際に状態はどちらがより変化しているのだろうか。この状態変化は、素朴には系のフラストレーションなどの特異な性質を反映すると考えられ、それらを検出する一つの指針として役立てられるだろう。しかし、ある熱力学的状態と、そこから少しだけ  $\{x^\mu\}$  を変化させたときの熱力学的状態がどの程度「近い」のかについてを定量的に議論する方法は確立されていない。そこで、本研究では熱力学的状態間の距離の定義として、情報幾何学で知られていた、フィッシャー情報行列に立脚したリーマン距離を取り入れることにした。すなわち、密度行列  $\rho$  (系のとり

うる状態の確率密度分布)を用いて、計量テンソル

$$g_{\mu\nu} = -\langle \partial_\mu \partial_\nu \log \rho \rangle \quad (1)$$

を導入し、これによって熱力学的状態間の距離を定義した。このような計量テンソルにもとづく多様体の幾何学は、熱力学の一つの表現方法として Ruppeiner や Brody の理論が知られているが、本研究ではこれを積極的に状態間の距離として活用するという研究方法をとった。

## 4. 研究成果

本研究の研究成果は以下のとおりである。

【1】導入した多様体が、状態変化を確かに表していることを確認した。

【2】計量テンソルの具体的検討において、派生的に量子アニーリングを用いた特異値分解の方法を提案した。

【3】熱場ダイナミクスとの対応関係を検討し、その発展の可能性を示した。

本項目では、上記の研究成果のそれぞれについて具体的に報告する。

【1】計量テンソル(1)に基づいた距離の定義が、直観的な状態変化の定量化になっているかどうかの検討を行った。伏見・テンパー模型や1次元イジング模型、2準位模型などの厳密解が求められる典型的な統計力学模型に対して状態変化を解析し、計量テンソル(1)によって与えられる距離を算出した。その結果、状態変化の過程について、例えば等温過程や断熱過程などといった条件を課した時に、その過程に依存した距離を示すことが明らかとなった。これは、その変化量が状態変化の始点と終点のみによって決まる、通常の状態量(エントロピーや内部エネルギーなど)とは本質的に異なるものであることがわかる。また、この経路の条件として、断熱過程で結ぶことのできる2点を始点と終点にすると、その2点を結ぶ測地線(最短距離を与える曲線)は断熱過程と一致しており、エントロピー変化のない過程が測地線であることが分かった。これらの成果の一部は国内学会[1,2]や国際会議[4]などで発表を行った。

【2】ハミルトニアンが熱力学変数  $\{x^\mu\}$  と確率変数  $\{Q_\mu\}$  の積によってのみ表される場合、計量テンソル(1)は分散共分散行列を与えることが容易に示される。本研究の遂行において、この計量テンソルによって与えられる分散共分散行列の具体的な表記とその固有値や特異値に注目して解析していたところ、量子アニーリングを用いた特異値分解の手法の開発に至った。これは当初予定していた研究課題ではなかったが、画像データやフラクタル図形への拡張を踏まえて、量子アニーリングを用いたデータ解析手法への新

しい一歩として今後の発展が期待できる重要な成果だと考えられる。この研究成果は、雑誌論文[1,3]や国内学会[3,10,11,12]および国際会議[5,6,9]などで発表を行った。

さらに、本研究課題の主要テーマである、状態間の距離への活用として、計量テンソルの特異値分解表示への利用も検討している。計量テンソルの特異値分解表現は、微小距離が特徴的な方向を持つことを示しており、相境界の方向との関連性などを調べることも可能になった。

【3】本研究課題が平衡状態を幾何学的に記述することを目指すものであるのに対して、代数的に記述する手法の一つとして熱場ダイナミクスがある。これは、系の熱力学的状態を表すために、ヒルベルト空間を拡張した2重ヒルベルト空間を用いるというもので、それによって、熱的なゆらぎを含めた状態ベクトルを定義することができる。この熱的な状態ベクトルも、熱力学変数 $\{x^{\mu}\}$ への摂動によってわずかながら変化する。この変化量についての解析から、熱力学的状態の変化量に相当する因子を求めることが可能であることが分かった。これに先立って、本研究の一部として、熱場ダイナミクスの与える散逸の様子を調べることを系統的に行った。それらの結果は、雑誌論文[4,5]や国内学会[14]、国際会議[13]などで発表を行っている。

本研究課題の主な研究成果は、以上の【1】～【3】が中心である。本研究では物質や材料の特質解明に直結する結果はまだ得られていないが、熱力学変数の変更に伴って、系の熱力学的状態が変化する様子を追尾する一連の道具立てを揃えることができた。特に、断熱過程を実現可能な2状態間を結ぶ測地線として、断熱過程を再帰的に得られることは有用な結果であると考えている。断熱過程ではエントロピー変化は生じないことから推察されるように、一般の熱力学過程においても測地線はエントロピー生成量の最も少ない過程である可能性が数値計算などによって見出されている。この解析的な証明は残された重要な課題である。また、本研究課題の直接的な発展として、熱場ダイナミクスとの連携をより強固なものにすることで、非平衡系も含むより広範な問題群への指針となることが期待できる。このように、本研究課題は当初の目的には限定されず、量子アニーリングや測地線の物理的解釈など、より広範な課題の提供とその活用の可能性を示す展開となった。なお、以上で引用した雑誌論文や学会発表などは、続く「主な発表論文等」に列挙したものである。

5. 主な発表論文等  
(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計5件)

[1] Hiroaki Matsueda, Ching Hua Lee, Yoichiro Hashizume,  
“Comment on “Snapshot Spectrum and Critical Phenomenon for Two-Dimensional Classical Spin Systems” ”  
Journal of the Physical Society of Japan. 85 (2016) 86001.  
[DOI:10.7566/JPSJ.85.086001]

[2] Hitoshi Honmi, Yoichiro Hashizume, Takashi Nakajima, Soichiro Okamura,  
“Microscopic study on magnetic and electrocaloric effects near the critical point”  
Physica A: Statistical Mechanics and its Applications 433 (2015) 126-135.  
[DOI: 10.1016/j.physa.2015.03.079]

[3] Yoichiro Hashizume, Takashi Koizumi, Kento Akitaya, Takashi Nakajima, Soichiro Okamura, and Masuo Suzuki  
“Singular-value decomposition using quantum annealing”  
Physical Review E 92 (2015) 023302.  
[DOI:10.1103/PhysRevE.92.023302]

[4] Yoichiro Hashizume, Masuo Suzuki, and Soichiro Okamura,  
“Quantum analysis applied to thermo field dynamics on dissipative systems”,  
AIP conference proceedings 1648 (2015) 200007, 1-4.  
[DOI: 10.1063/1.4912485]

[5] Yoichiro Hashizume, Masuo Suzuki, and Soichiro Okamura,  
“A new perspective to formulate a dissipative thermos field dynamics”  
Physica A: Statistical Mechanics and its Applications 491 (2015) 506-512.  
[DOI: 10.1016/j.physa.2014.10.067]

〔学会発表〕(計14件)

[1] 橋爪洋一郎, 小泉太嘉志, 中嶋宇史, 岡村総一郎  
「幾何学的熱力学理論の誘電損失の研究への応用」  
第26回日本MRS年次大会  
2016年12月 横浜情報文化センター

[2] 小泉太嘉志, 橋爪洋一郎, 松枝宏明, 中嶋宇史, 岡村総一郎  
「平衡状態間の距離の情報幾何学的な導入」  
日本物理学会2016年秋季大会  
2016年9月 金沢大学

[3] 橋爪洋一郎, 田中宗, 田村亮  
「量子アニーリングを用いた階層的構造のあるデータ行列に対する特異値分解」  
日本物理学会 2016 年秋季大会  
2016 年 9 月 金沢大学

[4] Takashi Koizumi, Yoichiro Hashizume, Takashi Nakajima, Soichiro Okamura,  
“ Geometrical distance describing the difference between states on phase diagram ”  
StatPhys26  
Jul. 2016, Lyon

[5] Yoichiro Hashizume, Masuo Suzuki, Takashi Nakajima, Soichiro Okamura  
“ Applications of quantum annealing for data analysis ”  
StatPhys26  
Jul. 2016, Lyon

[6] Yoichiro Hashizume, Shu Tanaka, Ryo Tamura,  
“ Singular value decomposition analysis of fractal images by quantum annealing ”  
Adiabatic Quantum Computing Conference 2016  
Jun. 2016, Google Los Angels

[7] 橋爪洋一郎, 鈴木増雄, 中嶋宇史, 岡村総一郎  
「TFD におけるチルダ空間の特異値分解描像」  
日本物理学会第 71 回年次大会  
2016 年 3 月 東北学院大学

[8] Yoichiro Hashizume  
“ Theoretical Analysis on Polarization induced Resistance Switching Effects of Polymer Thin Films Including Dead Layers ”  
BIT 's 2nd Annual World Congress of Smart Materials-2016(WCSM-2016)  
Mar. 2016, Singapore

[9] Yoichiro Hashizume, Masuo Suzuki, Takashi Nakajima, Soichiro Okamura,  
“ Singular value decomposition picture of double Hilbert space on thermo field dynamics ”  
YITP Workshop on Quantum Information Physics (YQIP2016)  
Jan. 2016 YITP (Kyoto Univ.)

[10] 橋爪洋一郎, 田中宗, 田村亮  
「量子アニーリングを用いた特異値分解とエンタングルメントの研究」  
日本物理学会 2015 年秋季大会  
2015 年 9 月 関西大学

[11] 橋爪洋一郎, 小泉太嘉志, 秋田谷健人, 鈴木増雄, 岡村総一郎  
「量子アニーリングを用いた特異値分解とその物理的理解」  
日本物理学会第 70 回年次大会  
2015 年 3 月 早稲田大学

[12] 小泉太嘉志, 秋田谷健人, 橋爪洋一郎, 岡村総一郎  
「量子アニーリングを用いた主成分分析」  
日本物理学会第 70 回年次大会  
2015 年 3 月 早稲田大学

[13] Yoichiro Hashizume, Masuo Suzuki, and Soichiro Okamura,  
“ Quantum analysis applied to thermo field dynamics on dissipative systems ”  
International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics  
Sep. 2014, Rhodes, Greece

[14] 橋爪洋一郎, 鈴木増雄, 岡村総一郎  
「熱場ダイナミクスによる減衰振動の研究」  
日本物理学会 2014 年秋季大会  
2014 年 9 月 中部大学

#### 6. 研究組織

##### (1) 研究代表者

橋爪 洋一郎 (HASHIZUME, Yoichiro)

東京理科大学

理学部第一部応用物理学科・助教

研究者番号 : 50711610

##### (2) 研究分担者

なし

##### (3) 連携研究者

なし

##### (4) 研究協力者

中嶋 宇史 (NAKAJIMA, Takashi)

岡村 総一郎 (OKAMURA, Soichiro)

鈴木 増雄 (SUZUKI, Masuo)

松枝 宏明 (MATSUEDA, Hiroaki)