

学位論文 博士(理学)

線形フィードバック系における熱力学量と情報量の関係

2012年度

慶應義塾大学大学院理工学研究科

鈴木 博之

目次

第1章	序論	1
1.1	はじめに	1
1.2	制御を伴う熱力学の歴史	3
1.3	情報量	5
1.4	ジャルジンスキー等式	6
1.5	本研究の目的と本論文の構成	7
第2章	外電場によるブラウン粒子の輸送	8
2.1	モデルと定式化	8
2.1.1	測定ノイズがなく推定を必要としない場合	11
2.1.2	測定ノイズを含み推定を必要とする場合	12
2.2	数値計算の結果	13
2.3	まとめと考察	18
第3章	線形フィードバック系の熱力学の一般論	21
3.1	問題の背景	21
3.2	線形フィードバック系	21
3.3	分離定理	23
3.4	詳細つりあいの定理	27
3.5	プラントにおけるジャルジンスキー等式	28
3.6	まとめと考察	31
第4章	調和ポテンシャルによるブラウン粒子の輸送	35
4.1	モデルと定式化	35
4.2	計算方法	39
4.3	数値計算の結果	41
4.4	まとめと考察	49
第5章	まとめと展望	50
付録A	J の最小値	53

付 録 B カルマンフィルタ	55
B.1 入力のない場合	55
B.2 入力のある場合	57
謝辞	58

第1章 序論

1.1 はじめに

熱力学では、系と熱浴の外に内部自由度の無視できる操作者がいて、系に操作をすることを考える（図 1.1）。熱浴をひとつだけ使い、少なくとも初めと終わりは、系は同じ熱浴と接して平衡状態にあるという操作を等温操作と呼ぶ [1]。操作をして系の状態が元にもどる過程をサイクルという。熱力学第二法則は、ケルヴィンの原理

「任意の等温サイクルにおいて、系にした仕事は非負である。」

で表わすことができる。ケルヴィンの原理を使えば

「等温操作によって系にする仕事 W_{sys} は、系のヘルムホルツ自由エネルギーの変化分 ΔF_{sys} より小さくはない。」

ことがわかる。つまり次の関係式になる。

$$W_{\text{sys}} \geq \Delta F_{\text{sys}} . \quad (1.1)$$

準静的に操作したとき、上式の等号が成立し、 W_{sys} は最小となる。これを最小仕事の原理という。

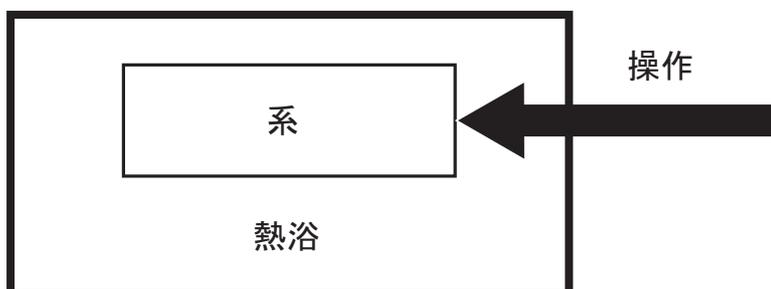


図 1.1: 「系 + 熱浴」は全体として断熱系である。外部操作者は純力学的であると考えられる。太線と細線はそれぞれ断熱壁と透熱壁を表す。この図で、系と熱浴の境界はすべて透熱的であるかのように描かれているが、系の一部分が断熱的であってもよい。

等温操作における系の内部エネルギーの変化分 ΔU_{sys} は、 \mathcal{W}_{sys} と「系の吸熱量」の和である。熱浴は準静的変化をすると考えられるので、「熱浴の吸熱量」は、熱浴の温度 T と熱浴のエントロピーの変化分 ΔS_{bath} の積に等しい。系のエントロピーの変化分 ΔS_{sys} を使えば、最小仕事の原理は次のように変形できる。

$$\begin{aligned} 0 \leq \mathcal{W}_{\text{sys}} - \Delta \mathcal{F}_{\text{sys}} &= \mathcal{W}_{\text{sys}} - (\Delta U_{\text{sys}} - T \Delta S_{\text{sys}}) \\ &= \mathcal{W}_{\text{sys}} - \{(-T \Delta S_{\text{bath}} + \mathcal{W}_{\text{sys}}) - T \Delta S_{\text{sys}}\} = T (\Delta S_{\text{bath}} + \Delta S_{\text{sys}}) . \end{aligned} \quad (1.2)$$

右辺の $\Delta S_{\text{bath}} + \Delta S_{\text{sys}}$ は、「系 + 熱浴」という断熱系の「エントロピーの変化分」を表す。したがって、熱浴と系を合わせた断熱系のエントロピーは減少しないことになる。これは「エントロピー原理」を表している。等温操作に限るなら、「系 + 熱浴」の「エントロピー原理」より、系の熱力学量だけの間の関係を表す「最小仕事の原理」の方が便利なが多いだろう。

測定した結果から系の状態を推定し、推定値に応じて外部操作者がする操作を決定するフィードバック制御を考えよう。測定して操作を決定する部分と制御される系（プラント）が同じ熱浴に接しているとすると、それらを合わせた系に対して最小仕事の原理は成立する。通常、注目されるのはプラントだから、プラントの熱力学量の間関係式がわかれば、(1.1) 式の最小仕事の原理より便利なが多いだろう。次節に示すように、フィードバック制御によって、プラントにする仕事が、そのヘルムホルツの自由エネルギーの変化分より小さくできる例が知られている。

1.2 制御を伴う熱力学の歴史

制御を伴った熱力学の研究は、1867年に発表されたマックスウェルの思考実験にまで遡る [2]。図 1.2 にあるように、内部に多数の自由粒子が存在する箱を考える。内部の仕切りにより、箱には二つの部屋がある。仕切りには、分子サイズの窓を作る。箱を熱浴に接触させ、両方の部屋の温度を一致させる。右の部屋から平均より速い分子が近づいてきたら窓を開け、遅い分子が近づいてきたら閉める。反対に左の部屋から平均より速い分子が近づいてきたら窓を閉め、遅い分子が近づいてきたら開ける。しばらくすると、左の部屋の温度が上がり、右の部屋の温度は下がる。

この過程が可能であると、外から仕事をせずに、低温熱源から高温熱源に熱を移動できることになる。これはケルヴィンの原理と等価なクラウジウスの原理に反するように見える。それは、粒子の速度を測定して窓の開閉という操作を決めるという制御が行われているプラントだけを見ているからである。

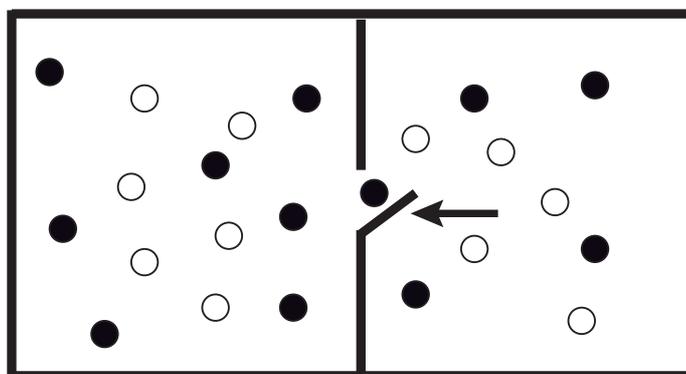


図 1.2: 速い粒子を○、遅い粒子を●で表わしている。右の箱の中の矢印の部分では、操作者が●を右の部屋に移すため、窓を開けている。ケルヴィンが窓の操作者を「悪魔」と呼んだ。

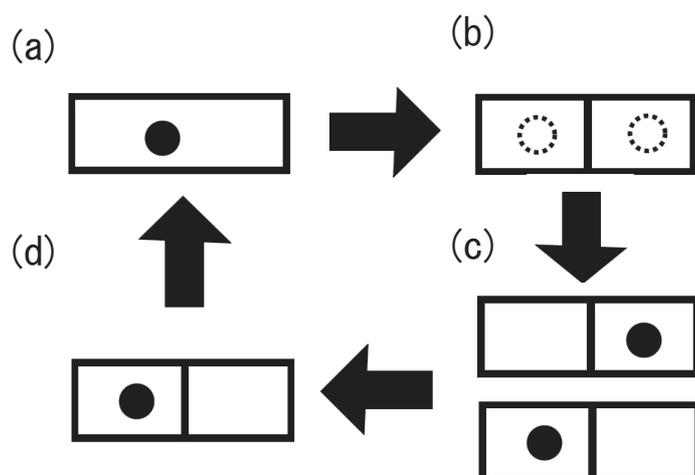


図 1.3: シラードエンジンの各ステップを示す。(a)→(b) で本文中で述べた操作 (1)、(b)→(c) で操作 (2)、(c) で操作 (3)、(c)→(d) で操作 (4)、(d)→(a) で操作 (5) を行う。

Szilard (1929) [3] は、定量的に議論できる簡単なモデルを考えた。温度 T の熱浴に接した体積 V_0 の箱に閉じ込められた、ひとつの粒子からなる系をプラントとする。次のようなサイクルを考える。

操作 (1) : 箱の中央に仕切りを入れ、動かないように止めることで、体積の等しい二つの部屋に分ける。この操作では仕事をしない。

操作 (2) : 粒子が左右の部屋のどちらにいるのか測定する。

操作 (3) : 粒子が左の部屋にいるなら、箱全体を回転させる。そうでなければ何もしない。

操作 (4) : 仕切り壁が右に移動したとき、仕事を取り出せるようにする。

操作 (5) : 仕切り壁が動けるようにする。粒子が仕切り壁を準静的に動かして、初めの状態に戻す。

理想気体の状態方程式が適用できるとすれば、 k_B をボルツマン定数として、このサイクルでプラントがした仕事は

$$\int_{V_0/2}^{V_0} dV \frac{k_B T}{V} = k_B T \ln 2 \quad (1.3)$$

となる。等温サイクルで系が正の仕事をしたと見ると、ケルヴィンの原理に反しているように見える。ケルヴィンの原理を当てはめるべきは、プラントと測定制御部分を合わせた全体なので、実際には第二法則が破れているわけではない [4]。シラードの研究以後も、測定を伴った操作による熱力学の研究が行われてきた [5 – 15]。

1.3 情報量

離散的な確率変数が n 個の値をとりうるとする。 j 番目の値の確率が p_j のとき、Shannon (1948)[16] は、情報量を次のように定義した。

$$-\sum_{j=1}^n p_j \ln p_j . \quad (1.4)$$

一様分布 $p_j = 1/n$ のとき、この値は最大値 $\ln n$ をとる。このとき、我々の知識の欠如が最大である、と解釈すると、「あいまいさ」を表すと考えることもできる。何かが起こると驚く程度も最大であろう。こう考えると、情報量は「驚き」の期待値を表すとも考えられる。シラードエンジンの場合、仕切り壁を入れてから粒子位置を測定する前には、粒子が左にいるか右にいるか確率 $1/2$ なので、情報量は $\ln 2$ となる。これの $k_B T$ 倍がプラントがした仕事になっているから、プラントの熱力学量と情報量には、何らかの関係があることが期待される。

連続的な確率変数 \mathcal{X} が値 x をとる。確率密度を $p(x)$ で書いて、情報量を次のように定義する。

$$H[\mathcal{X}] \equiv -\int_{-\infty}^{\infty} p(x) \ln p(x) dx . \quad (1.5)$$

また、別の確率変数 \mathcal{Y} が値 y をとる。密度関数を $p(y)$ と書くことにして、結合確率密度を $p(x, y)$ と書く。相互情報量 $I[\mathcal{X}; \mathcal{Y}]$ および条件付きエントロピー $H[\mathcal{X}|\mathcal{Y}]$ は次のように定義される。

$$I[\mathcal{X}; \mathcal{Y}] \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} p(x, y) \ln \frac{p(x|y)}{p(x)} dx dy , \quad (1.6)$$

$$H[\mathcal{X}|\mathcal{Y}] \equiv -\int_{-\infty}^{\infty} p(y) \int_{-\infty}^{\infty} p(x|y) \ln p(x|y) dx dy . \quad (1.7)$$

ここで $p(x|y)$ は y が与えられた場合の x の条件付確率密度で、ベイズの定理より $p(x, y) = p(x|y)p(y)$ となる。以上の定義により、 $I[\mathcal{X}; \mathcal{Y}] \geq 0$ であり、また次の関係があることがわかる。

$$I[\mathcal{X}; \mathcal{Y}] = H[\mathcal{X}] - H[\mathcal{X}|\mathcal{Y}] . \quad (1.8)$$

測定におけるこれらの量の役割について説明する [17]。物理量の値が x であるとき、測定値 y を得るとする。情報量および条件付きエントロピーは、それぞれ測定前および測定後の物理量の「あいまいさ」を表している。(1.8) 式の右辺をみると、測定前の「あいまいさ」から測定後の「あいまいさ」を引いているので、相互情報量は測定により、どの程度「あいまいさ」を減らすことができたのかを表してしていることになる。測定ノイズを η として、 x と y の関係は次のようになる。

$$y = x + \eta . \quad (1.9)$$

x と η がそれぞれ分散 σ_x^2 および σ_η^2 のガウス分布に従うとすると、相互情報量は次のようになる。

$$I[x; y] = \frac{1}{2} \log \left(1 + \frac{\sigma_x^2}{\sigma_\eta^2} \right). \quad (1.10)$$

物理量 x の分散が大きいほど、そして測定ノイズの分散が小さいほど、測定による相互情報量が大きくなる。このとき、測定前の「あいまいさ」を大きく減らすことができるからである。なお、上式でわかるように、 x と η がガウス分布に従うとき、相互情報量は x および η の平均値には依らない。

1.4 ジャルジンスキー等式

Jarzynski(1997)[18] は、制御を伴わない等温過程に対して次の等式を得た。

$$\langle e^{-\beta W} \rangle e^{-\Delta \mathcal{F}_{\text{sys}}} = 1. \quad (1.11)$$

ここで、 $\langle \dots \rangle$ は初期条件に関する統計平均を表し、 $\beta = 1/k_B T$ である。また、 W は各サンプルで系にする仕事を表す。文献 [18] での導出において、初期状態と終状態が温度 T の熱平衡であるとを要請しているが、操作の途中で熱浴に接している必要はない。

ふたつの平衡状態のヘルムホルツの自由エネルギー差を、最小仕事の原理に基づいて、測定しようとする準静操作をしなければならず、これに長時間を要することになる。一方、(1.11) 式を使うと、操作のプロトコルを固定した有限時間の操作を複数回行うことで、ヘルムホルツの自由エネルギー差を求めることができる [19]。この場合、統計平均を計算する必要があるので、測定回数は増やさなければならない。一分子実験や生体分子の研究において、(1.11) 式は実験的に検証されている [20 – 25]。

力学の時間反転対称性から、物理量の平衡のまわりのゆらぎの遷移確率には、詳細釣りあいという性質が成り立つ [26]。後で記すように、Crooks(1998)[27] は、(1.11) 式の別導出として、離散時間で記述されたマルコフ過程を使った方法を示した。そこでは、平衡のまわりでも、平衡から離れていても、同じランジュバン方程式が成り立つとし、各時間ステップで詳細釣り合いが成立することを仮定した。つまり、(1.11) 式は微視的な力学を見なくても、各時間ステップでの詳細釣り合いが成立する確率過程で導ける。各時間ステップの詳細釣り合いは、そうでない一般の詳細釣り合いが成り立つ条件より緩い条件で成り立つという議論もある [28]。

熱力学における仕事は各サンプルでの仕事の平均である。(1.11) 式にイエンセンの不等式を適用すると最小仕事の定理を得ることができる。

$$\mathcal{W}_{\text{sys}} \equiv \langle W \rangle \geq \Delta \mathcal{F}_{\text{sys}}. \quad (1.12)$$

これは、第二法則を導いたわけではない。(1.11) 式を導く際に、熱力学と矛盾ないように設定された統計力学の枠組みを使っているからである。

1.5 本研究の目的と本論文の構成

上記では、制御を伴う熱力学の歴史と測定における相互情報量について説明した。また、制御を伴わない等温過程で成立するジャルジンスキー等式を紹介した。本研究の目的は、比較的簡単な、しかしながら、シラードエンジンより現実に近いモデルでプラントの熱力学量を数値的に調べ、その性質を明らかにすることにある。さらにジャルジンスキー等式が制御された過程でどのように修正されるか理論的に調べることにある。

第2章では、外電場を操作することにより、熱浴に接した電荷を持つブラウン粒子を運搬するモデルについて考える。一定時間に一定距離、ブラウン粒子(プラント)を運搬したあとに外電場を切り、平衡状態を達成させるので、プラントにとってみれば等温サイクルになる。測定した物理量の値、または、その推定値に外電場が比例するとし、その比例係数をゲインと呼ぶ。プラントにした熱力学的な仕事の他に、制御パラメータを伴う二つの項を付け加えた評価関数を定義して、それを最小にする最適ゲインを用いて外電場を制御する。最適制御で仕事は負になるのか、最小値は存在するのか、制御パラメータの値にどう依存するのかを数値的に調べる。

第3章では、第2章で得られた数値的な結果をヒントにして、線形の離散時間ランジュバン方程式で記述される古典系に対して、線形フィードバックした入力を複数回加えることを一般的に考える。Crooks(1998)[27]によるジャルジンスキー等式の導出を応用すれば、プラントのヘルムホルツの自由エネルギー変化とプラントにする仕事に関わる等式を得られる。イエンセンの不等式を適用すると、この等式は不等式に変形することができる。この不等式は最適ゲインによる入力を加えた場合のみでなく、任意のゲインに対して成立する。(1.1)式の右辺は、過程途中の詳細に依らない一定値なので仕事の下限といってよいが、第3章で求められる不等式では、これにあたる項が過程途中の詳細に依るので、最小限界ということにする。

第4章では、レーザピンセットによる一分子の操作実験を想定して、調和ポテンシャルによるブラウン粒子の運搬するモデルを数値的に検討する。調和ポテンシャルはデバイスにより生成され、デバイスに外力を加えることで、プラント(粒子とデバイス)を一定時間に一定距離を移動させる。第2章と同様の線形フィードバックにより、プラントにした熱力学的な仕事が最小になる外力を加える。実際に得られる仕事量と第3章で理論的に求めた仕事の最小限界を、操作時間、熱浴の温度、摩擦係数、測定の時間間隔などのパラメータを変えて比較する。

第5章に、まとめと今後の展望を記す。

第2章 外電場によるブラウン粒子の輸送

本章では、外電場を加えて、荷電したブラウン粒子を運搬する過程を線形ランジュバン方程式で記述し、粒子にした仕事の平均を最小にする線形フィードバックを考える。粒子の位置と速度が測定ノイズを伴って測定され、その測定値からそれぞれの真の値をカルマンフィルタによって推定する。外電場はそれぞれの推定値に比例するとし、その係数をゲインと呼ぶ。粒子にした仕事の他に制御パラメータを含む二つの項を加えた評価関数を考え、それを最小にする最適ゲインを計算する。加えた項の一つにより外電場が大きくなることが押さえられ、もう一方は終端条件の代わりにする。最適ゲインによる外電場を加えたときの粒子にした仕事を数値的に計算する。特に、制御パラメータに依らない、つまりプラントの過程に固有の性質がないのかを調べる。なお、本章は文献 [29] で発表した内容に基づく。

2.1 モデルと定式化

帯電したブラウン粒子を外電場の操作により一定距離 L を、一定時間 t_f で一次元的に移動させることを考える。ここで外電場 $E(t)$ は時間的に変化し、ブラウン粒子の電荷を q で表す (図 2.1)。

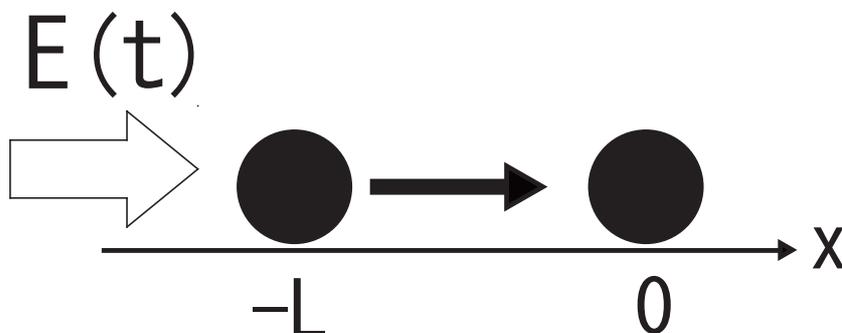


図 2.1: 初期に $x = -L$ にいたブラウン粒子 (●) を $x = 0$ まで運ぶ。

ブラウン粒子の質量を m とし、時刻 t における粒子の位置 $x(t)$ の時間発展は次のランジュバン方程式で記述される。

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -m\gamma \dot{x} + qE(t) + m\xi(t) . \quad (2.1)$$

上式において x の時間微分を \dot{x} で表し、 $\gamma (> 0)$ と $\xi(t)$ はそれぞれ単位質量あたりの摩擦係数および熱揺らぎである。非線形性を含まないランジュバン方程式は、平衡のまわりでのみ有効と考えられる。熱揺らぎは白色ガウス過程で、任意の時間で統計平均がゼロであるとする。温度 T の等温の熱浴に接していて、揺動散逸定理 [30, 31] が成り立つとすると、 $\xi(t)$ の時間相関は次式で与えられることになる。

$$\langle \xi(t)\xi(t+\tau) \rangle = \frac{2\gamma k_B T}{m} \delta(\tau) . \quad (2.2)$$

ここで $\delta(t)$ はデルタ関数である。§1.2 でも定義したように k_B はそれぞれボルツマン定数である。つぎに状態ベクトル $\mathbf{x} \equiv (x, \dot{x})^T$ を導入し、(2.1) 式を次のように書き換える。

$$\dot{\mathbf{x}} = A\mathbf{x} + E(t)\mathbf{b} + \boldsymbol{\xi}(t) . \quad (2.3)$$

ここで転置を T で表し、定行列 A と \mathbf{b} および、熱揺らぎ $\boldsymbol{\xi}$ をそれぞれ次のように定義する。

$$A \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -\gamma \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ q/m \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\xi} \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ \xi \end{pmatrix} .$$

時刻 $t = 0$ 以前でブラウン粒子は $E = 0$ のもとで熱平衡状態にあるとし、 $t = 0$ より外電場の操作を開始する。初期状態でブラウン粒子の位置は $x(0) = -L$ とし (図 2.1)、速度の確率分布は温度 T のマックスウェル・ボルツマン分布に従う。そして、 $x(t_f)$ がゼロに近づくように制御する。時刻 $t = t_f$ にブラウン粒子の輸送が終了した時点で系は平衡状態でない。そこで外電場をゼロにして、その後、初期状態と同じ平衡状態に緩和させる。したがって、この過程は等温サイクルになっており、 $\Delta F = 0$ である。

(2.1) 式の両辺に \dot{x} を掛け、 $t = 0$ から $t = t_f$ まで積分すると次のようになる。

$$\left[\frac{1}{2} m \dot{x}^2 \right]_0^{t_f} = \int_0^{t_f} qE(t)\dot{x}(t)dt + \int_0^{t_f} \{-m\gamma \dot{x}^2(t) + m\xi(t)\dot{x}(t)\} dt . \quad (2.4)$$

熱力学第一法則と比較すると、左辺が内部エネルギーの変化を表し、右辺第一項はブラウン粒子にした仕事であり、右辺第二項が熱と解釈できる [32 - 34]。したがって、外電場がブラウン粒子にした力学的な仕事 W の平均は E の汎関数であり、次式で与えられる。

$$\langle W \rangle \equiv \left\langle \int_0^{t_f} qE(t)\dot{x}(t) dt \right\rangle . \quad (2.5)$$

ここで $\langle \dots \rangle$ は初期状態と熱揺らぎ、および測定ノイズに関する統計平均を表す。また、ブラウン粒子のポテンシャルは $\phi = -qEx$ と書いて、サイクルは初めと終わりで変化がない。

$$0 = \int_0^\infty dt \frac{d\phi}{dt} . \quad (2.6)$$

時刻 t_f 以後に外電場が粒子にする仕事はゼロなので次を得る。

$$0 = \left\langle \int_0^\infty dt \frac{\partial \phi}{\partial E} \dot{E} \right\rangle + \left\langle \int_0^{t_f} dt \frac{\partial \phi}{\partial x} \dot{x} \right\rangle . \quad (2.7)$$

右辺第一項は粒子と静電場になされた仕事の平均で、第二項を左辺に移項すれば (2.5) 式となる。つまり、(2.5) 式は上式右辺の第一項とも書き表される。

フィードバック制御をするために、系の状態を測定する必要がある。得られた測定値にノイズが加わるとする。定行列 C を導入し、状態ベクトル x の測定値 y を次式で表す。

$$y(t) = Cx(t) + \eta(t) . \quad (2.8)$$

ここで $\eta(t)$ は測定ノイズを表し、統計平均がゼロの白色ガウス過程であり、熱揺らぎ ξ と無相関であるとする。状態ベクトルのすべての変数が測定できる場合 $C = 1$ (単位行列) である。時刻 t までの測定値より、その時刻の状態ベクトルを推定する。線形レギュレータにより $E(t)$ を決定する。比例係数 d はゲインと呼ばれる。つまり、推定された状態ベクトルを $\hat{x}(t)$ で表すと、 $E(t)$ は次のようになる。

$$E(t) = -d(t)^T \hat{x}(t) . \quad (2.9)$$

ブラウン粒子にする仕事の平均を最小にする。評価関数として次の汎関数を用いる。

$$J[E] = \langle W \rangle + \left\langle \int_0^{t_f} R_1 E(t)^2 dt + R_2 x(t_f)^2 \right\rangle . \quad (2.10)$$

ここで R_1 と R_2 は制御パラメータと呼ばれ、共に正の値とする。これらはプラントの物理量ではない。仕事の平均の他に加えた二つの項はそれぞれ次のような拘束を表している。 R_1 を含む項がないと $E(t)$ はいくらでも大きくできるので、 $E(t)$ の大きさに制限を課すため加えてある。 R_2 を含む項は時刻 $t = t_f$ において、ブラウン粒子の位置と原点の距離を縮めようとするので、終端条件の代わりとなる。制御パラメータに依らないプラントの過程に固有の仕事の平均の最小値があるかどうか検証するために、制御パラメータを変化さながら調べていく。

$C = 1$ 、 $\eta = 0$ の場合、 $y = x$ となり推定の必要がない。この場合で求められた最適ゲインは、推定を含んだ場合の最適ゲインと等しくなることが、標準的な制御理論で知られている [35]。最適ゲインを求める計算は推定の手続きと独立に行える。以降で推定を行わない場合と行う場合に分けて議論する。

2.1.1 測定ノイズがなく推定を必要としない場合

推定を考えないので (2.9) 式は次のようになる。

$$E(t) = -\mathbf{d}(t)^T \mathbf{x}(t) . \quad (2.11)$$

系のダイナミクスを状態変数の共分散行列 $X(t) \equiv \langle \mathbf{x}(t)\mathbf{x}(t)^T \rangle$ を用いて書き直す。共分散行列は対称な半正定値行列である。初期条件を次のように書き直す。

$$X(0) \equiv \begin{pmatrix} L^2 & 0 \\ 0 & k_B T/m \end{pmatrix} . \quad (2.12)$$

A 、 E 、 \mathbf{d} を使って、次を定義する。

$$\begin{aligned} \tilde{A} &\equiv A - \mathbf{b}\mathbf{s}^T/R_1 , \\ \tilde{E} &\equiv E + \mathbf{s}^T \mathbf{x}/R_1 , \\ \tilde{\mathbf{d}}(t) &\equiv \mathbf{d}(t) - \mathbf{s}/R_1 . \end{aligned} \quad (2.13)$$

ここで $\mathbf{s} \equiv (0, q/2)^T$ であり、 $\tilde{E}(t) = -\tilde{\mathbf{d}}(t)^T \mathbf{x}(t)$ となる。 $\xi(t)$ は白色過程なので、(2.3) 式より次式を得る。

$$\begin{aligned} 0 &= \{A - \mathbf{b}\mathbf{d}(t)^T\} X(t) + X(t) \{A - \mathbf{b}\mathbf{d}(t)^T\}^T + \Xi - \dot{X}(t) \\ &= \{\tilde{A} - \mathbf{b}\tilde{\mathbf{d}}(t)^T\} X(t) + X(t) \{\tilde{A} - \mathbf{b}\tilde{\mathbf{d}}(t)^T\}^T + \Xi - \dot{X}(t) . \end{aligned} \quad (2.14)$$

ここで $\langle \xi(t)\xi(t+\tau)^T \rangle = \Xi\delta(\tau)$ となる Ξ を定義した。また、(2.10) 式も次のように書き直せる。

$$R_2 \text{tr} [X(t_f)] + \int_0^{t_f} dt \text{tr} \left[\left\{ R_1 \tilde{\mathbf{d}}(t)\tilde{\mathbf{d}}(t)^T - \frac{\mathbf{s}\mathbf{s}^T}{R_1} \right\} X(t) \right] . \quad (2.15)$$

ここで tr は対角和を表す。(2.14) 式からわかるように、 X は \mathbf{d} に依存しているので、(2.15) 式を \mathbf{d} または $\tilde{\mathbf{d}}$ の汎関数として理解することができる。

(2.15) 式を $\tilde{\mathbf{d}}$ で変分することを考える。(2.14) 式を X について陽に解いて \mathbf{d} で表し、(2.15) 式に入れることができる。その表式は時間順序積の項を含んだ形となり、変分の計算が非常に困難になる。そこで、ラグランジュの未定係数法を使って計算する。未定係数として 2×2 の対称行列 $\mathcal{P}(t)$ を導入する。(2.15) 式を最小にする最適なゲインは次のようになる [36, 37]。

$$\mathbf{d}^*(t)^T = \frac{q}{R_1} \left(\frac{\mathcal{P}_{21}(t)}{m}, \frac{\mathcal{P}_{22}(t)}{m} + \frac{1}{2} \right) . \quad (2.16)$$

また、 $\mathcal{P}(t)$ は次のリカッチ微分方程式を満たしている。

$$0 = \dot{\mathcal{P}}(t) - R_1^{-1} \{ \mathcal{P}(t)\mathbf{b}\mathbf{b}^T\mathcal{P}(t) + \mathbf{s}\mathbf{s}^T \} + \mathcal{P}\tilde{A} + \tilde{A}^T\mathcal{P} . \quad (2.17)$$

この方程式の境界条件は時刻 $t = t_f$ で与えられ、次のようになる。

$$P(t_f) = \begin{pmatrix} R_2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

そのため、(2.17) 式を数値的に解くとき、終端時刻から初期時刻に向かって計算が進んでいく。

(2.17) 式と (2.18) 式より得られた解を (2.16) 式に代入することで J を停留させる d を求めることができる。この d が J を最小にするゲイン、つまり最適ゲインであることは、付録 A に示す。(2.11) 式より、最適な外電場 E^* が求められる。 E^* を加えたとき、ブラウン粒子にした仕事の平均は次の表式で書ける。

$$\langle W \rangle^* = \int_0^{t_f} dt \operatorname{tr} [2s\mathbf{d}(t)^T X(t)]. \quad (2.19)$$

2.1.2 測定ノイズを含み推定を必要とする場合

つぎに $\mathbf{y}(t) \neq \mathbf{x}(t)$ で推定が必要な場合を考えよう。カルマンフィルタ [38] を使って、推定値 $\hat{\mathbf{x}}$ を求める。推定誤差 $\bar{\mathbf{x}}(t)$ は $\mathbf{x}(t) - \hat{\mathbf{x}}(t)$ と定義し、その共分散行列を $\bar{X}(t)$ とする。推定値の共分散行列を $\hat{X}(t)$ とし、 $\langle \hat{\mathbf{x}}(t)\bar{\mathbf{x}}(t)^T \rangle = \mathbf{0}$ であることに注意すると、 $X(t) = \hat{X}(t) + \bar{X}(t)$ が成り立つことがわかる。(2.9) 式を (2.10) 式に代入すると、評価関数は次のようになる。

$$R_2 \operatorname{tr} [\hat{X}(t_f)] + \int_0^{t_f} dt \operatorname{tr} \left[\left\{ R_1 \tilde{\mathbf{d}}(t)\tilde{\mathbf{d}}(t)^T - \frac{\mathbf{s}\mathbf{s}^T}{R_1} \right\} \hat{X}(t) \right]. \quad (2.20)$$

測定ノイズの自己相関が $\langle \boldsymbol{\eta}(t)\boldsymbol{\eta}(t+\tau)^T \rangle = H(t)\delta(\tau)$ となる H を定義すると、カルマンフィルタは次の関係を与える。

$$\dot{\hat{X}}(t) = A\bar{X}(t) + \bar{X}(t)A^T - \bar{X}(t)C^T H^{-1}(t)C\bar{X}(t) + \Xi. \quad (2.21)$$

ここで H の逆行列式 H^{-1} が常に存在しているとした。カルマンフィルタの一般論は付録 B に示す。なお、 C が正方行列でなくて、測定ノイズが存在しない場合の推定は文献 [39] にある。また、上式の初期条件は次式である。

$$\hat{X}(0) = \begin{pmatrix} L^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{X}(0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & k_B T/m \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

(2.9) 式を (2.3) 式に代入すると次式が得られる。

$$\dot{X}(t) = \{A - \mathbf{b}\mathbf{d}(t)^T\} X(t) + X(t) \{A - \mathbf{b}\mathbf{d}(t)^T\}^T + \Xi + \mathbf{b}\mathbf{d}(t)^T \bar{X}(t) + \bar{X}(t)\mathbf{d}(t)\mathbf{b}^T. \quad (2.23)$$

上式から (2.21) 式を引くと次のようになる。

$$0 = \{A - \mathbf{bd}(t)^T\} \hat{X}(t) + \hat{X}(t) \{A - \mathbf{bd}(t)^T\}^T + \bar{X}(t)C^T H^{-1}(t)C\bar{X}(t) - \dot{\hat{X}}(t). \quad (2.24)$$

この初期条件は (2.22) 式の第一式で与えられる。最適ゲインを求めるには、(2.24) 式の拘束条件の下で (2.20) 式を変分すればよい。その結果は推定しない場合の (2.16) 式と一致する。 E^* を加えたとき、ブラウン粒子にした仕事の平均は次の表式で書ける。

$$\langle W \rangle^* = \int_0^{t_f} dt \operatorname{tr} [2\mathbf{s}d(t)^T \hat{X}(t)]. \quad (2.25)$$

2.2 数値計算の結果

数値計算で用いたパラメータは、 $m = 1.0$ 、 $\gamma = 1.0$ 、 $k_B T = 10.0$ 、 $L = 10.0$ 、 $t_f = 10.0$ である。微分方程式を解くときの刻み幅 Δt は 0.01 を用いた。乱数の発生はメルセンヌツイスター [40] を用い、ボックスミュラー法 [41] により正規乱数に変換した。統計平均は 10000 個のサンプルから計算した。制御パラメータ R_1 と R_2 の値を変えたときの影響を調べよう。(2.10) 式で示したように、 R_1 は E の大きさに制限を加える項の係数である。また、 R_2 はブラウン粒子が原点に近づくための項の係数である。以後、最適制御下での量に * をつけて表す。最適制御下での外電場の大きさの時間平均 $\langle \bar{E}^2 \rangle^*$ を次のように定義する。

$$\langle \bar{E}^2 \rangle^* \equiv \frac{1}{t_f} \int_0^{t_f} dt \langle E(t)^2 \rangle^*. \quad (2.26)$$

次のように (A) と (B) の二つの場合に分けて結果を示す。

(A): 測定ノイズがなく推定を必要としない場合 (図 2.2)

(B): 測定ノイズを含み推定を必要とする場合 (図 2.3 と図 2.4)

図 2.3 では x と \dot{x} の両方の測定値を得た場合の結果を示し、図 2.4 では x の測定値は得られるが、 \dot{x} の測定値が得られない場合の結果を示す。

時刻 $t = t_f$ でブラウン粒子が原点に到達しているかを調べるために、 R_1 と R_2 の値を変化させて、 $\langle x(t_f) \rangle^*$ と $\langle x(t_f)^2 \rangle^*$ の変化を調べた (図 2.2a、b、図 2.3a、b、図 2.4a、b)。いずれの場合も R_1 を固定したとき R_2 が大きいほど、 $t = t_f$ で小さな分散でブラウン粒子が原点に近づく傾向が示されている。(2.10) 式をみると R_2 が大きい場合、 $\langle x(t_f)^2 \rangle^*$ が少しでも大きくなると、評価関数は大きく増加してしまう。したがって、このとき $\langle x(t_f)^2 \rangle^*$ がより小さくなるように制御していると考えると、これらの結果は理解できる。また、 R_2 を固定して R_1 を小さくしても、 $t = t_f$ で小さな分散でブラウン粒子が原点に近づいていき、終端条件がほぼ満たされる。(2.10) 式において R_1 が小さい場合、 E の大きさを増加させても、評価関数の増加は小さいので、 E の大きさの制限が弱くなる (図 2.2c)。その結果、終端条件を満たし易くなると考えられる。

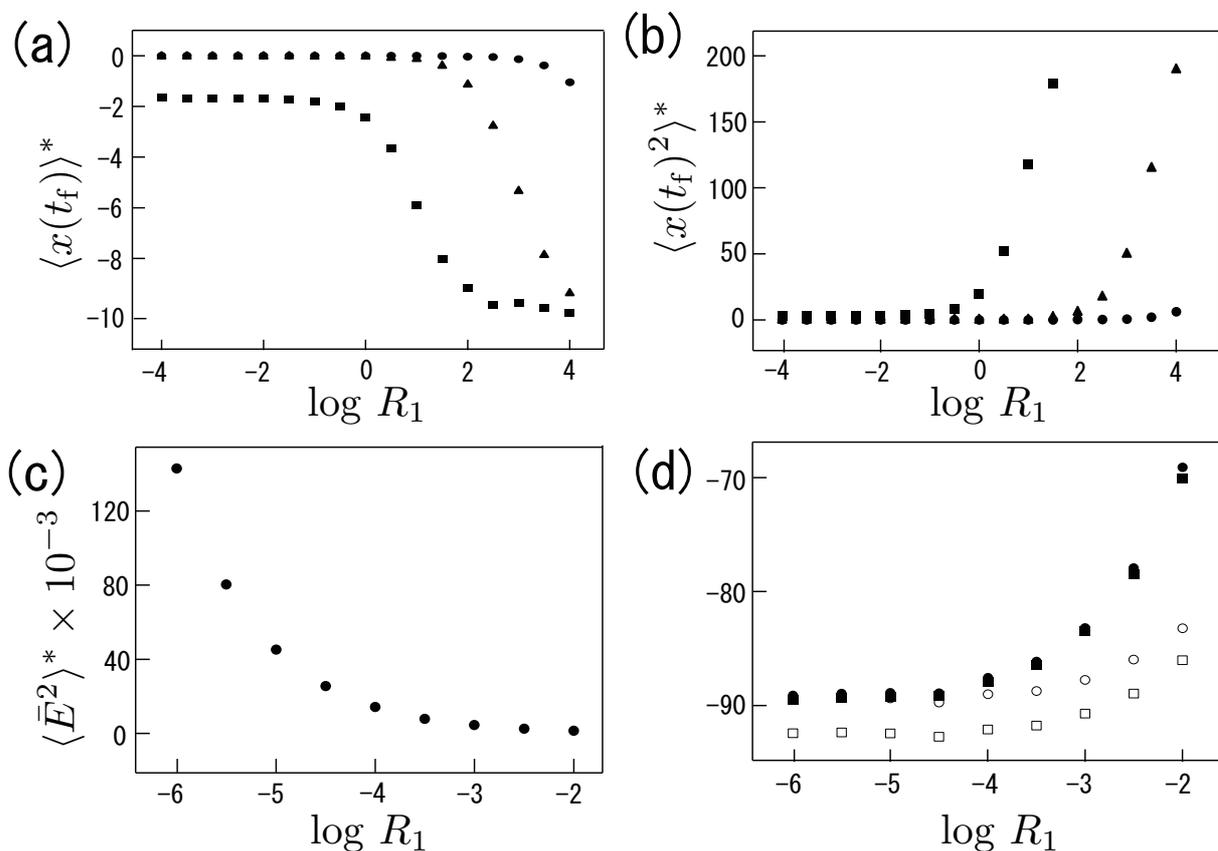


図 2.2: (A) の場合の数値計算結果を示す。(a) と (b) ではそれぞれ、 $\log_{10} R_1$ に対して $\langle x(t_f) \rangle^*$ と $\langle x(t_f)^2 \rangle^*$ をプロットしている。 \bullet 、 \blacktriangle 、 \blacksquare はそれぞれ $R_2 = 10^4$ 、 $R_2 = 10^2$ 、 $R_2 = 1$ での結果を表す。(c) で $R_2 = 10^4$ のときの $\langle \bar{E}^2 \rangle^*$ と $\log_{10} R_1$ の関係を示す。示していないが、 $R_2 = 1$ と $R_2 = 10^2$ に対する結果は $R_2 = 10^4$ の場合とほぼ一致している。(d) で、 $\log_{10} R_1$ に対して、 $\langle W \rangle^*$ の値 (\circ 、 \bullet) と J^* の値 (\square 、 \blacksquare) をプロットしている。塗りつぶしたプロットと白抜きのプロットはそれぞれ $R_2 = 10^4$ と $R_2 = 1$ を表す。示していないが $R_2 = 10^2$ での結果は、 $R_2 = 10^4$ での結果とほぼ一致する。 $R_1 = 10^{-6}$ と $R_2 = 10^4$ のとき、 $\langle W \rangle^*$ の標準偏差の値は 1.85 であった。

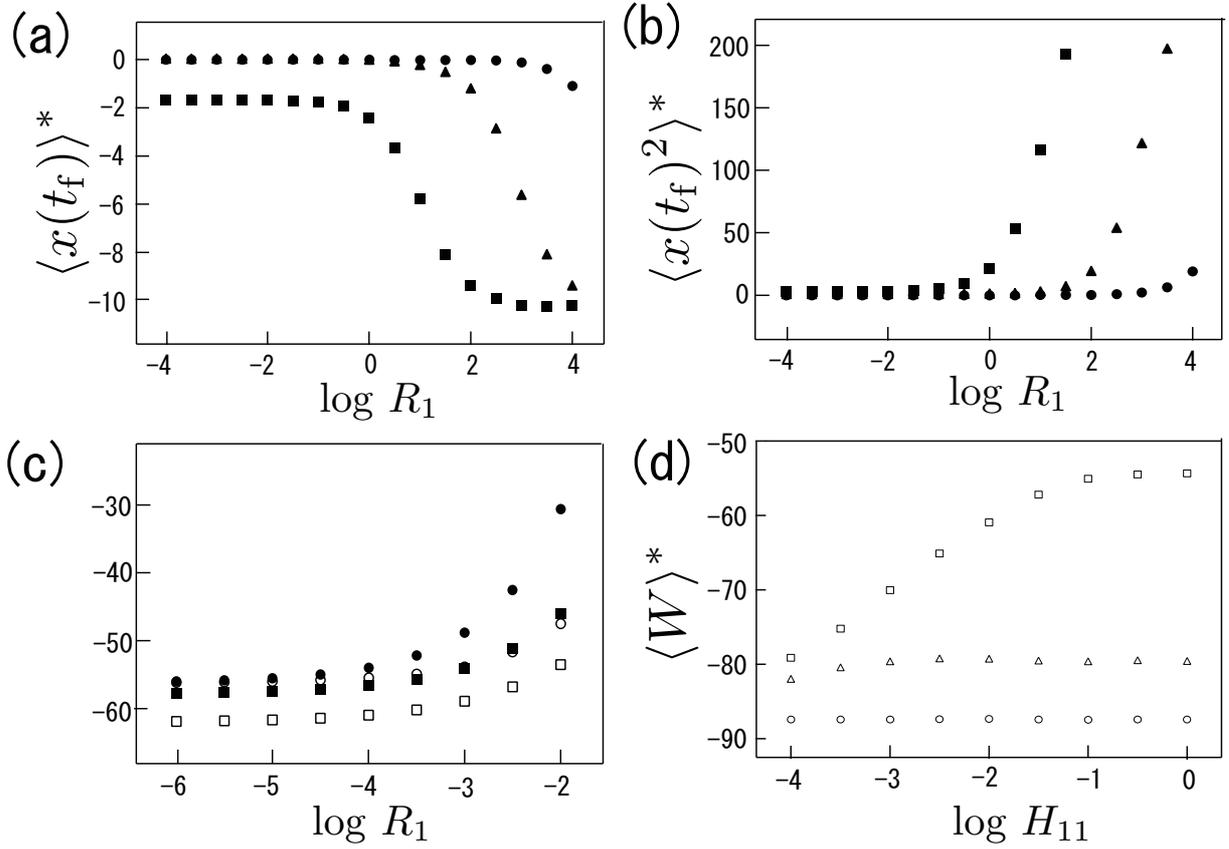


図 2.3: (B) の場合で $C = 1$ のときの数値計算結果を示す。 $H_{12} = H_{21} = 0$ とした。(d) 以外では、 $H_{11} = 10^{-2}$ および $H_{22} = 1$ とした。(a) と (b) ではそれぞれ、 $\log_{10} R_1$ に対して $\langle x(t_f) \rangle^*$ と $\langle x(t_f)^2 \rangle^*$ をプロットした。 \bullet 、 \blacktriangle 、 \blacksquare のプロットはそれぞれ $R_2 = 10^4$ 、 $R_2 = 10^2$ 、 $R_2 = 1$ を表す。(c) で、 $\langle W \rangle^*$ の値 (\circ 、 \bullet) と J^* の値 (\square 、 \blacksquare) を $\log_{10} R_1$ に対してプロットしている。塗りつぶしたプロットと白抜きプロットはそれぞれ $R_2 = 10^4$ と $R_2 = 1$ に対する結果を表す。示していないが、 $R_2 = 10^2$ のときの結果は、 $R_2 = 10^4$ のときの結果とほぼ一致する。(d) で、 $R_1 = 10^{-6}$ と $R_2 = 10^4$ での $\langle W \rangle^*$ と測定ノイズの大きさ H_{11} の関係を示した。 \circ 、 \triangle 、 \square のプロットはそれぞれ $H_{22} = 10^{-4}$ 、 $H_{22} = 10^{-2}$ 、 $H_{22} = 1$ での結果を表す。

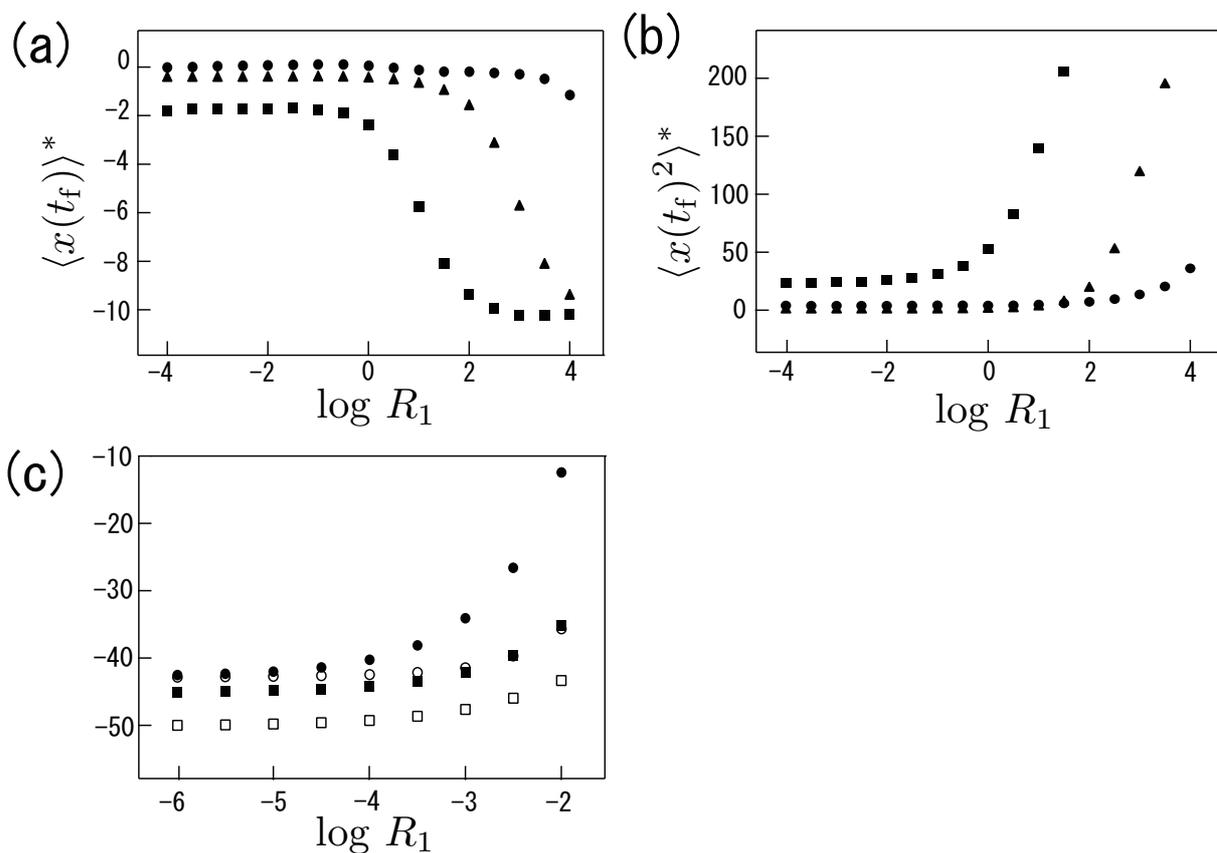


図 2.4: (B) の場合で $C_{11} = 1$ でそれ以外の C の成分がゼロのときの数値計算結果を示す。 $H_{11} = 10^{-2}$ であり、それ以外の H の成分は存在しないとする。(a) と (b) ではそれぞれ、 $\log_{10} R_1$ に対して $\langle x(t_f) \rangle^*$ と $\langle x(t_f)^2 \rangle^*$ をプロットした。 \bullet 、 \blacktriangle 、 \blacksquare のプロットはそれぞれ $R_2 = 10^4$ 、 $R_2 = 10^2$ 、 $R_2 = 1$ に対する結果を表す。(c) で $\log_{10} R_1$ に対して、 $\langle W \rangle^*$ の値 (\circ 、 \bullet) と J^* の値 (\square 、 \blacksquare) をプロットしている。塗りつぶしたプロットと白抜きプロットはそれぞれ $R_2 = 10^4$ と $R_2 = 1$ の結果を表す。示していないが、 $R_2 = 10^2$ の結果は、 $R_2 = 10^4$ の結果とほぼ一致する。

つぎに R_1 と R_2 の値を変化させると、仕事の平均は滑らかに変化する (図 2.2d、図 2.3c、図 2.4c)。終端条件をほぼ満たしている範囲において、仕事の平均の値が R_2 の変化に依らずほぼ一定である。 $R_2 = 10^4$ とすると図 2.2 から図 2.4 のいずれでもこの状態になる。

図 2.2d、図 2.3c、図 2.4c のいずれの場合においても $R_2 = 10^4$ で R_1 を小さくしていくと、 $\langle W \rangle^*$ は滑らかに減少していき、 $R_1 \leq 10^{-4}$ 付近からプラトーになる。このときの $\langle W \rangle^*$ の値が、このモデルでブラウン粒子にした仕事の平均の最小値であると考えられる。いずれの場合でも R_1 を小さく、 R_2 を大きくしていくと J^* と $\langle W \rangle^*$ の差は縮まっていく (図 2.2d、図 2.3c、図 2.4c)。これは (2.10) 式の右辺第二項と第三項が共にゼロに近づいていくためと考えられる。それぞれの仕事の平均の最小値の値を比較すると、(B) の場合より (A) の方が、また、ブラウン粒子の位置を測定しない場合 (図 2.4) より測定した方 (図 2.3) が $\langle W \rangle^*$ を小さくすることができる。より正確な測定をするほど、平均的に少ない仕事で操作が可能であるとわかる。最小値はいずれの場合も負の値である。

測定ノイズの大きさを変化させることで、測定の正確さを変化させ、仕事の平均の最小値を調べた (図 2.3d)。 $H_{12} = H_{21} = 0$ として、位置と速度のそれぞれの測定ノイズの相関がないとしている。位置の測定ノイズの大きさ H_{11} と速度の測定ノイズの大きさ H_{22} をそれぞれ減少させると、 $\langle W \rangle^*$ の最小値は共に減少している。 H_{11} より H_{22} の変化に $\langle W \rangle^*$ の最小値がより敏感に変化している。より少ない仕事の平均で操作ができるためには、ブラウン粒子の位置より速度の測定の正確さが重要であるとわかる。

2.3 まとめと考察

図 2.2d、図 2.3c、図 2.4c において R_2 を固定して R_1 を減少させると、 E の大きさが増加しているにもかかわらず、 $\langle W \rangle^*$ はプラトーになる。(2.5) 式よりブラウン粒子にした仕事が E と \dot{x} の積を含んでいることを考えると、このことは予想外に感じられる。そこで二つのサンプルにおける $\langle E(t)^2 \rangle^*$ および $\langle \dot{x}(t)^2 \rangle^*$ の時間発展を図 2.5 に示す。 R_1 が小さくなるほど、 $t = t_f$ の前のより短い区間でブラウン粒子を止めるために、外電場の大きさは増加する (図 2.5a、c)。特に、 R_1 の小さい図 2.5a では、 $t = t_f$ 直前に外電場が急激に増加していることに注意する。外電場が増加している区間でブラウン粒子の速度もゼロに近づく (図 2.5b、d)。 R_1 の小さい図 2.5b で、その変化は著しい。このことが E が増加しても、 E と \dot{x} の積は変化しなくなる原因と考えられる。図 2.5b で、 $t = t_f$ 直前を除き $\langle \dot{x}^2 \rangle^*$ は $(L/t_f)^2$ とほぼ等しくなる。ところが図 2.5d で $\langle \dot{x}^2 \rangle^*$ は $(L/t_f)^2$ より大きくなっている。 R_1 が大きいとき、ブラウン粒子の運動が等速度から大きく離れないように効率的に制御することができないことを表している。

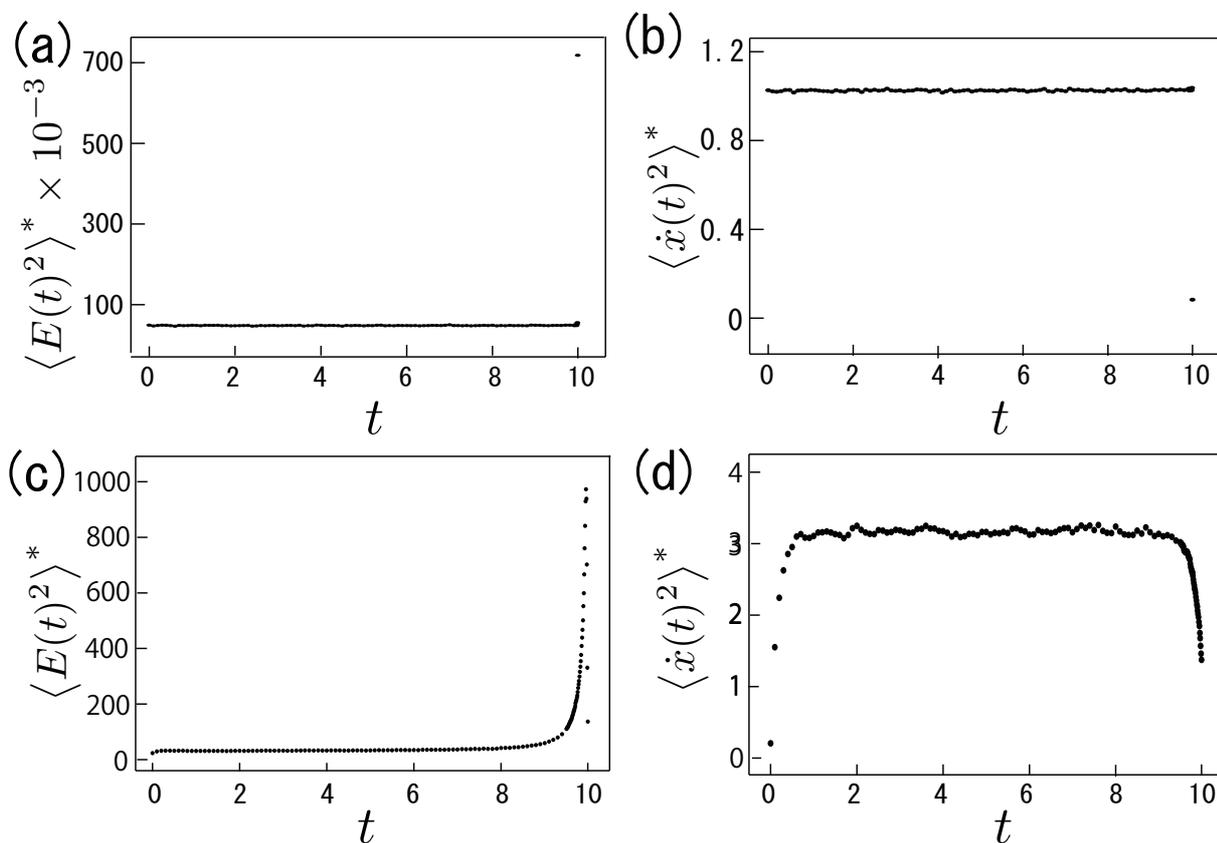


図 2.5: (A) の場合で、 $\langle E(t)^2 \rangle^*$ と $\langle \dot{x}(t)^2 \rangle^*$ の時間発展を示す。 $R_2 = 10^4$ とした。(a) と (b) では、 $R_1 = 10^{-6}$ 、(c) と (d) では、 $R_1 = 10^{-4}$ とした。(a) と (c) では、 $\langle E(t)^2 \rangle^*$ の、(b) と (d) では、 $\langle \dot{x}(t)^2 \rangle^*$ の時間発展を示す。

この章で得られた数値計算の結果を数式でまとめる。次式の極限で終端条件を満たす。

$$\lim_{R_1 \rightarrow 0} \lim_{R_2 \rightarrow \infty} \langle x(t_f)^2 \rangle = 0. \quad (2.27)$$

最適制御下の仕事の平均と評価関数は共に R_1 と R_2 に対し増加関数である。

$$\frac{\partial \langle W \rangle^*}{\partial R_1} > 0, \quad \frac{\partial \langle W \rangle^*}{\partial R_2} > 0, \quad \frac{\partial J^*}{\partial R_1} > 0, \quad \frac{\partial J^*}{\partial R_2} > 0. \quad (2.28)$$

次式の極限で最適制御下の仕事の平均と評価関数は共に同じ負の値に収束する。

$$\lim_{R_1 \rightarrow 0} \lim_{R_2 \rightarrow \infty} \langle W \rangle^* = \lim_{R_1 \rightarrow 0} \lim_{R_2 \rightarrow \infty} J^*. \quad (2.29)$$

測定する変数の数が多い、または、測定ノイズが小さいほど、極限值は減少していく。

この章に示した、標準的な線形フィードバックの手法で、仕事の平均を最小にする制御を行ったところ、(2.10) 式の評価関数には制御パラメータというプラントの過程に固有とは言えない変数を導入することになった。(2.29) 式での極限は、入力制限をなくし、終端条件を厳しくするという極限であり、プラントの過程に固有な性質を見る極限といえる。(2.29) 式は、この極限で仕事の平均が最小値に収束していくことを示している。この値はプラントの過程に固有な仕事の平均の最小値といってよからう。もし、最小仕事の拡張があるなら、それはここで考えた極限での過程に対しても成立してほしい。そこで、仕事の平均が有限であるということは、最小仕事の原理に拡張がありうることを示している。

図 2.2d、図 2.3c、図 2.4c で示した仕事の平均の最小値はいずれも負の値であった。これは熱力学第二法則に反しているようにみえるが、§1.2 に記したように、プラントの熱力学量だけに注目しているためである。Sagawa and Ueda(2008)[42] は量子系に対し、一回の測定によるフィードバック制御を行ったとき、次の不等式が成り立つことを示した。

$$\langle W \rangle \geq \Delta F - k_B T I_{QC}. \quad (2.30)$$

I_{QC} は量子系において定義される量で、非負の値をもつ。古典系において I_{QC} に相当する量は (1.5) 式で定義した相互情報量である。(2.30) 式の I_{QC} を相互情報量で置き換え、 $\Delta F = 0$ である本章のサイクルで、不等式が成り立つかを調べてみる。付録 B で示すようにカルマンフィルタを用いる際、 x からマルコフ過程を分離する。この分離した変数と測定値 y の間の相互情報量は次式で与えられる。

$$I_2 = \frac{1}{2} \int_0^{t_f} dt \operatorname{tr}[\bar{X}(t) C^T H^{-1} C]. \quad (2.31)$$

なお、(2.21) 式からわかるように、(2.31) 式の値は制御パラメータに依存しない。

(A) の場合、(1.6)式の相互情報量の定義より $I_2 = -\infty$ となり、(2.30) 式が成立していることがわかる。図 2.3d で考えた場合、つまり測定ノイズを伴い $C = 1$ の場合で、 I_2 を計算した (図 2.6)。ブラウン粒子の位置と速度のそれぞれの測定ノイズの大きさが小さくなるほど、 $k_B T I_2$ も増加することがわかる。 $k_B T I_2$ の変化は図 2.3d の $\langle W \rangle^*$ の変化に比べて大きい。図 2.6 で調べた範囲では、 $H_{11} = H_{22} = 1$ のとき $k_B T I_2$ の値が最も小さいが、それでも $k_B T I_2 > 100$ であった。このとき、 $\langle W \rangle^* = -55$ 程度 (図 2.3d) なので、 $\langle W \rangle^* \geq -k_B T I$ が成り立つ。このことから図 2.3d と図 2.6 で調べた範囲では、 $\langle W \rangle^* \geq -k_B T I$ が成立している。図 2.4c の場合、つまり (B) で $H_{11} = 10^{-2}$ 、他の H の成分が存在しない場合、 $-k_B T I_2 = -640$ となる。このとき $\langle W \rangle^*$ はおよそ -60 であるので、(2.30) 式が成立している。図 2.2 から図 2.4 のいずれの場合においても、確かに不等式は満たされているが、両辺の値から考えると、等式より離れすぎていることがわかる。

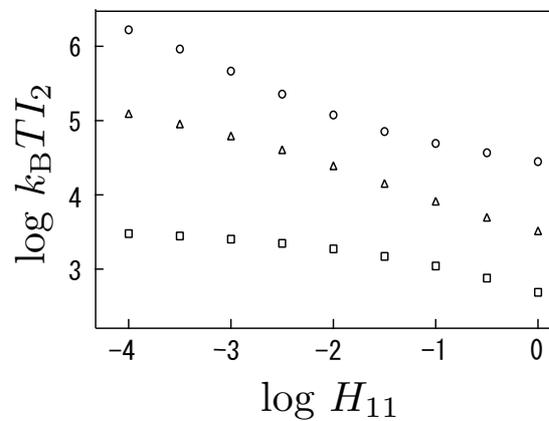


図 2.6: (2.31) 式を用いて計算された、 $\log_{10}(k_B T I_2)$ と $\log_{10} H_{11}$ の関係を示す。(B) の場合で $C = 1$ であり、 $H_{12} = H_{21} = 0$ とした。 $R_1 = 10^{-6}$ および $R_2 = 10^{-4}$ を使った。 \circ 、 \triangle 、 \square のプロットはそれぞれ $H_{22} = 10^{-4}$ 、 $H_{22} = 10^{-2}$ 、 $H_{22} = 1$ での結果を表す。

第3章 線形フィードバック系の熱力学の一般論

前章の数値的な結果を得たとき、(2.31) 式に相当する不等式が、前章のモデルのような多数回の測定による古典系の線形フィードバック系において、成立しているのかどうか明らかでなかった。本章では、これを明らかにしていく。なお、本章の内容は文献 [43] で発表した。

3.1 問題の背景

Sagawa and Ueda(2010)[44] は、温度 T の熱浴に接した古典系の確率過程を、1回の測定よりフィードバック制御したとき、次の等式が成り立つことを示した。

$$\langle e^{-\beta(W-\Delta F)-\mathcal{I}} \rangle = 1. \quad (3.1)$$

x を状態変数、 y を測定値として、 \mathcal{I} は次のように定義される。

$$\mathcal{I} = \ln \frac{p(x|y)}{p(x)}. \quad (3.2)$$

(1.6) 式より、 \mathcal{I} の平均は相互情報量 I となる。(3.1) 式にイェンセンの不等式を適用すると、次のように変形できる。

$$\langle W \rangle \geq \Delta F - k_B T I. \quad (3.3)$$

上式は (2.30) 式の古典極限に一致し、古典系においても仕事の平均の最小限界を下げるができる。多数回の測定に拡張しようとする、一般には (1.11) 式からの補正項が (3.1) 式のようにまとまらない [36, 45]。けれども、以下に示すように、線形フィードバック系に限れば分離定理が使えるので、この問題を解決することができる。

3.2 線形フィードバック系

温度 T の熱浴に接したプラントについて考える。系の状態は n 次元のマクロな変数で記述できるとし、時刻 k での状態を n 次元の縦ベクトル x_k で表す。時間は離散化しているとし、 $k = 0, 1, \dots, N$

とする。ただし $N \geq 2$ である。系の状態は熱揺らぎにより確率的に変化し、測定ノイズを伴って系の状態を測定できるものとする。時刻 k で系にする入力 \mathbf{u}_k は時刻 k までに測定した測定値より決定する。したがって、 $n \times n$ の行列 A_k と B_k を用いて、系の時間発展を次のような離散時間の線形ランジュバン方程式で記述する。

$$\mathbf{x}_{k+1} = A_k \mathbf{x}_k + B_k \mathbf{u}_k + \mathbf{w}_k . \quad (3.4)$$

ここで $k = 0, 1, \dots, N-1$ であり、 \mathbf{w}_k は熱揺らぎを表し平均がゼロである。異なる時間の \mathbf{w}_k は互いに独立であり、 $\mathbf{w}_0, \dots, \mathbf{w}_{N-1}$ を $\mathbf{w}_{[0, N-1]}$ と書くことにする。 \mathbf{w}_k の確率密度と共分散行列をそれぞれ $P_k^{(w)}$ と W_k で表す。実際の例では A_k と B_k および W_k は k に依らないことが多い。 \mathbf{u}_k から \mathbf{u}_{k+1} への変化を時刻 $k+1$ で行い、 k から $k+1$ の間で \mathbf{u}_k の値は一定とする。また、この \mathbf{u}_k が変わらない間に状態は \mathbf{x}_k から \mathbf{x}_{k+1} へ変化する。系のエネルギーは状態ベクトルと入力の関数で、時刻 k で $\mathcal{E}(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k)$ と書ける。時刻 k の直前のエネルギーは $\mathcal{E}(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_{k-1})$ である。入力が過去の状態に依存しているので、(3.4) 式で表される時間発展は非マルコフ過程である。

時刻 k における系の状態の測定値を m 次元の縦ベクトル \mathbf{y}_k で表す。ここで $k = 0, 1, \dots, N-1$ である。測定するときに測定ノイズ \mathbf{v}_k を伴うとする。

$$\mathbf{y}_k = C_k \mathbf{x}_k + \mathbf{v}_k . \quad (3.5)$$

ここで C_k は $m \times n$ の行列である。異なる k に対する \mathbf{v}_k は互いに独立とし、その確率分布と共分散行列をそれぞれ $P_k^{(v)}$ と V_k で表す。 V_k は正定値行列で、 \mathbf{v}_k の平均はゼロに限らない。

時刻 $k = 0$ の入力 \mathbf{u}_0 を固定し、 $k = 1, \dots, N-1$ の \mathbf{u}_k は $\mathbf{y}_{[1, k]}$ の値より決定することになる。 \mathbf{u}_N は $\mathbf{y}_{[1, N-1]}$ に依らずに決める。具体的にどう決めるかは後述する。時刻 $k = 1$ 以前で系は \mathbf{u}_0 の下での熱平衡状態であるとする。 \mathbf{x}_0 の確率分布は次のように与えられる。

$$P_0(\mathbf{x}_0) = \exp \{ -\beta E(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) \} / Z(T, \mathbf{u}_0) . \quad (3.6)$$

ここで $Z(T, \mathbf{u}_0)$ は平衡状態での分配関数である。このフィードバック系で、確率の要因は $\mathbf{w}_{[0, N-1]}$ と $\mathbf{v}_{[1, N-1]}$ および \mathbf{x}_0 にある。変数 Ω の統計平均は次で計算できる。

$$\langle \Omega \rangle = \int d\mathbf{x}_0 P_0(\mathbf{x}_0) \left\{ \prod_{k=0}^{N-1} \int d\mathbf{w}_k P_k^{(w)}(\mathbf{w}_k) \right\} \left\{ \prod_{k=1}^{N-1} \int d\mathbf{v}_k P_k^{(v)}(\mathbf{v}_k) \right\} \Omega . \quad (3.7)$$

カルマンフィルタを用いて、測定値 $\mathbf{y}_{[1, k]}$ から、状態ベクトルの推定値 $\hat{\mathbf{x}}_k$ を得る。時刻 $k = 1, 2, \dots, N-1$ で、入力 \mathbf{u}_k は推定値 $\hat{\mathbf{x}}_k$ に比例するとする。

$$\mathbf{u}_k = -K_k \hat{\mathbf{x}}_k . \quad (3.8)$$

ここで $K_{[1,N-1]} \equiv K_1, \dots, K_{N-1}$ とし、これをゲインと呼ぶ。評価関数を最小にするように、ゲインを決める。ここでは、次のような二次形式の評価関数を考える。

$$\sum_{k=1}^{N-1} \langle \mathbf{x}_{k+1}^T Q_{k+1} \mathbf{x}_{k+1} + \mathbf{u}_k^T R_k \mathbf{u}_k \rangle . \quad (3.9)$$

但し、 $Q_{[2,N]}$ と $R_{[2,N-1]}$ は $n \times n$ の対称行列である。

3.3 分離定理

状態変数を二つの変数に分離することを考える [35, 46]。

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_k^{(1)} + \mathbf{x}_k^{(2)} . \quad (3.10)$$

時刻 $k = 0, 1, \dots, N-1$ での、それぞれの変数の時間発展を次のようにすると、(3.4) 式と矛盾しない。

$$\mathbf{x}_{k+1}^{(1)} = A_k \mathbf{x}_k^{(1)} + B_k \mathbf{u}_k , \quad (3.11)$$

$$\mathbf{x}_{k+1}^{(2)} = A_k \mathbf{x}_k^{(2)} + \mathbf{w}_k . \quad (3.12)$$

初期条件 $\mathbf{x}_0^{(1)}$ は確定的に与える。 \mathbf{u}_0 も確定的なので、(3.11) 式より $\mathbf{x}_1^{(1)}$ は確定的に決まる。一方、 $\mathbf{x}_0^{(2)}$ の確率分布 $P_0^{(2)}$ は次のように計算できる。

$$P_0^{(2)}(\mathbf{x}_0^{(2)}) = P_0(\mathbf{x}_0^{(1)} + \mathbf{x}_0^{(2)}) . \quad (3.13)$$

$\mathbf{x}_k^{(2)}$ が与えられたときの $\mathbf{x}_{k+1}^{(2)}$ の条件付き確率分布を $P_{k+1|k}^{(2)}$ で表すと、次の関係式を得る。

$$P_{k+1|k}^{(2)}(\mathbf{x}_{k+1}^{(2)} | \mathbf{x}_k^{(2)}) = P_k^{(w)}(\mathbf{x}_{k+1}^{(2)} - A_k \mathbf{x}_k^{(2)}) . \quad (3.14)$$

確率過程 $\mathbf{x}_{[0,k]}^{(2)} \equiv \mathbf{x}_0^{(2)}, \dots, \mathbf{x}_k^{(2)}$ の確率分布を $P_{[0,k]}^{(2)}$ で表す。この確率過程は、 \mathbf{w}_k に時間相関がないので、マルコフ過程である。

$$P_{[0,N]}^{(2)}(\mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)}) = P_0^{(2)}(\mathbf{x}_0^{(2)}) \prod_{k=0}^{N-1} P_{k+1|k}^{(2)}(\mathbf{x}_{k+1}^{(2)} | \mathbf{x}_k^{(2)}) . \quad (3.15)$$

また、この確率分布は入力に依存しない。

時刻 $k = 2$ から $N-1$ で、入力 \mathbf{u}_{k-1} は $\mathbf{y}_{[1,k-1]}$ より決まり、 $\mathbf{x}_k^{(1)}$ が決定される。したがって、時刻 $k = 2, \dots, N-1$ で、 $\mathbf{y}_{[1,k-1]}$ から次の部分を取り出すことができる。

$$\mathbf{y}_k^{(2)} \equiv \mathbf{y}_k - C_k \mathbf{x}_k^{(1)} = C_k \mathbf{x}_k^{(2)} + \mathbf{v}_k . \quad (3.16)$$

$\mathbf{y}_{[1,k]}$ から $\mathbf{y}_{[1,k]}^{(2)}$ を決定することができる。混乱がない場合、表記の簡略のために条件付き確率密度を全て $P(\dots|\dots)$ で表す。縦棒の後ろで条件を、前で確率変数を表す。また、条件がなければ $P(\dots)$ とする。 $\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)}$ が与えられたときの、 $\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ の条件付き確率分布は次のようになる。

$$P\left(\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}|\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) = \prod_{k=1}^{N-1} P_k^{(v)}\left(\mathbf{y}_k^{(2)} - C_k \mathbf{x}_k^{(2)}\right). \quad (3.17)$$

(3.15) 式の左辺は次のように書き直せる。

$$P\left(\mathbf{x}_0^{(2)}, \mathbf{x}_N^{(2)}|\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) P\left(\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)}\right). \quad (3.18)$$

(3.12) 式と (3.16) 式で、 $\{\mathbf{w}_0, \mathbf{w}_{N-1}, \mathbf{v}_{[1,N-1]}, \mathbf{x}_0^{(2)}\}$ がそれぞれ独立である。 $\mathbf{x}_0^{(2)}$ と $\mathbf{x}_N^{(2)}$ の結合確率分布は、 $\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)}$ が与えられたとすると、 $\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ に独立なので、上式ははじめの因子は次のように書き直せる。

$$P\left(\mathbf{x}_0^{(2)}, \mathbf{x}_N^{(2)}|\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)}, \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) P\left(\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)}\right). \quad (3.19)$$

(3.15) 式と (3.17) 式のそれぞれの左辺を掛け合わせると、次のようになる。

$$P\left(\mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)}, \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right). \quad (3.20)$$

以後、次のように簡略した積分の表記を用いる。

$$\int d\mathbf{x}_{[j,k]}^{(2)} \equiv \int d\mathbf{x}_j^{(2)} \cdots \int d\mathbf{x}_k^{(2)}, \quad (3.21)$$

$$\int d\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)} \equiv \int d\mathbf{y}_1^{(2)} \cdots \int d\mathbf{y}_{N-1}^{(2)}. \quad (3.22)$$

(3.21) 式は $j \leq k$ とし、 $^{(2)}$ がつかない変数についても用いる。

次のような恒等式を考える。

$$1 = \int d\mathbf{x}_{[1,N]}^{(2)} \prod_{k=1}^N \delta\left(\mathbf{x}_k^{(2)} - A_{k-1} \mathbf{x}_{k-1}^{(2)} - \mathbf{w}_{k-1}\right) \left\{ \prod_{k=1}^{N-1} \int d\mathbf{y}_k^{(2)} \delta\left(\mathbf{y}_k^{(2)} - C_k \mathbf{x}_k^{(1)} - \mathbf{v}_k\right) \right\}. \quad (3.23)$$

上式の右辺を (3.7) 式の右辺の Ω の直前に代入すると次式を得る。

$$\langle \Omega \rangle = \int d\mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)} \int d\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)} P\left(\mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)}, \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) \Omega. \quad (3.24)$$

ここで (3.20) 式は (3.15) 式と (3.17) 式のそれぞれの右辺の積に等しいことを用いた。

測定値 $y_{[1,k]}$ が得られたとき、 $x_k^{(2)}$ と $x_{k+1}^{(2)}$ の推定値を、それぞれ $\hat{x}_k^{(2)}$ と $\tilde{x}_{k+1}^{(2)}$ と表す。 $\tilde{x}_1^{(2)}$ は $\langle x_1^{(2)} \rangle$ と等しいとする。時刻 $k = 1, \dots, N-1$ で離散時間のカルマンフィルタ [17] より次式が得られる。

$$\hat{x}_k^{(2)} = \tilde{x}_k^{(2)} + \mathcal{P}_k C_k^T H_k^{-1} \left(y_k^{(2)} - C_k \tilde{x}_k^{(2)} - \langle \eta_k \rangle \right), \quad (3.25)$$

$$\tilde{x}_{k+1}^{(2)} = A_k \hat{x}_k^{(2)}. \quad (3.26)$$

ここで \mathcal{P}_k は次のように定義した。

$$\mathcal{P}_k = (M_k^{-1} + C_k^T V_k^{-1} C_k)^{-1}. \quad (3.27)$$

ここで M_1 は $x_1^{(2)}$ の共分散行列であり、 x_1 の共分散行列に一致する。時刻 $k = 1, \dots, N-2$ で、 M_k の時間発展は次のようになる。

$$M_{k+1} \equiv A_k \mathcal{P}_k A_k^T + W_k. \quad (3.28)$$

時刻 k で x_k の推定値は $\hat{x}_k \equiv x_k^{(1)} + \hat{x}_k^{(2)}$ で与えられる。推定誤差を $\bar{x}_k \equiv x_k - \hat{x}_k$ と定義し、これは $\bar{x}_k^{(2)} \equiv x_k^{(2)} - \hat{x}_k^{(2)}$ と等しくなる。また、次の関係も導かれる。

$$0 = \langle \hat{x}_k^{(2)} \bar{x}_k^{(2)T} \rangle = \langle \hat{x}_k \bar{x}_k^T \rangle. \quad (3.29)$$

推定値の共分散行列 $\hat{X}_k \equiv \langle \hat{x}_k \hat{x}_k^T \rangle$ は次式を満たす。

$$\hat{X}_{k+1} = (A_k - B_k K_k) \hat{X}_k (A_k - B_k K_k)^T + M_{k+1} - \mathcal{P}_{k+1}. \quad (3.30)$$

(3.9) 式で与えられる評価関数を考える。(3.29) 式を用いると (3.9) 式は $\sum_{k=2}^N \text{tr} Q_k \bar{X}$ と次式の和に変形できる。

$$\tilde{J}(K_{[1,N-1]}) \equiv \sum_{k=1}^{N-1} \text{Tr} \left(Q_{k+1} \hat{X}_{k+1} + K_k^T R_k K_k \hat{X}_k \right). \quad (3.31)$$

ここで $\bar{X} \equiv \langle \bar{x} \bar{x}^T \rangle$ である。 $\bar{X}_k = \langle \bar{x}_k^{(2)} \bar{x}_k^{(2)T} \rangle$ は $K_{[1,N-1]}$ に依らず \mathcal{P}_k で与えられるので、最適ゲインは (3.30) 式の拘束の下で、(3.31) 式を最小にする $K_{[1,N-1]}$ となる。この変分問題を解くためにラグランジュ係数 $\Lambda_{[2,N]}$ を導入する。時刻 $k = N$ で $\Lambda_N = Q_N$ となり、 $k = 2, \dots, N-1$ で時間発展は次のようになる。これより最適ゲインは次のように与えられる。

$$K_k = R_k^{-1} B_k^T (\Lambda_{k+1}^{-1} + B_k R_k^{-1} B_k^T)^{-1} A_k. \quad (3.32)$$

以上のように、線形フィードバック系において、推定の手続きと無関係に最適ゲインを求められ、このことを分離定理と呼ぶ。

図 3.1 の上部に示すように、時刻 $2 \leq k \leq N$ で $y_{[1,k-1]}^{(2)}$ より u_{k-1} が決定され、 $x_k^{(1)}$ は $y_{[1,k-1]}^{(2)}$ の関数になる。この関数を $x_k^{(1)}(y_{[1,k-1]}^{(2)})$ と表す。 $k = 0$ または $k = 1$ になりうる場合も $x_k^{(1)}(y_{[1,k-1]}^{(2)})$ と表すこともあるが、この場合は単に $x_k^{(1)}$ を表すものとする。また、(3.16) 式より $y_{[1,k]}^{(2)}$ が $y_{[1,k]}$ を決めることもわかる。

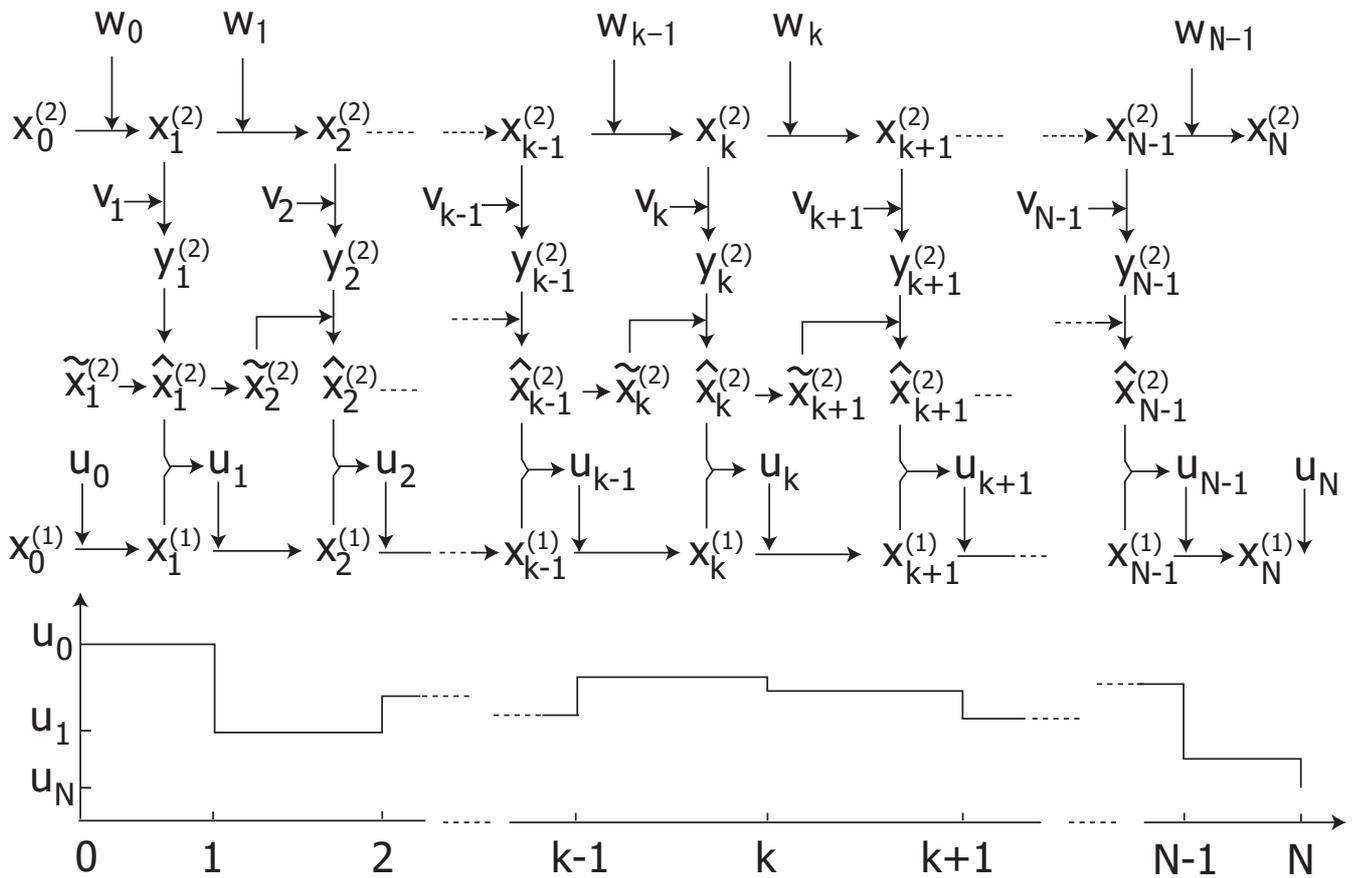


図 3.1: 上段に線形フィードバック系の時間発展を示す。矢印の先にある変数は、根元にある変数により決定される。 $x_0^{(1)}$ 、 u_0 、 $\tilde{x}_1^{(2)}$ 、 u_N は固定している。また、 $x_0^{(1)}$ と u_0 から $x_1^{(1)}$ が計算できる。確率は $w_{[0,N-1]}$ 、 $v_{[1,N-1]}$ 、 $x_0 = x_0^{(1)} + x_0^{(2)}$ により与えられ、それぞれは独立である。下段に入力の変化の概略図を示した。但し、一般に u_k は多成分である。

3.4 詳細つりあいの定理

確率過程の一つのサンプルが得られたとする。このとき過程に加えた入力を用いて、時刻 $k = N - 1, N - 2, \dots, 0$ で、次のように時間反転した過程を定義する。

$$\mathbf{x}_k^* = A_{k+1}\mathbf{x}_{k+1}^* + B_k\mathbf{u}_k^* + \mathbf{w}_k. \quad (3.33)$$

この過程を逆過程と呼び、* をつけて表す。対して、元の過程を順過程とする。線形フィードバック系での一次元ブラウン粒子の例で、時間反転の仕方を考える。時刻 k で粒子の位置と運動量をそれぞれ q_k と p_k で表す。このときの系の状態ベクトルは $\mathbf{x}_k = (q_k, p_k)^T$ となり、これを時間反転すれば $\mathbf{x}_k^* = (q_k, -p_k)^T$ となる。逆過程において状態の測定は行わず、順過程で得られた $\mathbf{y}_{[1,N]}^{(2)}$ より決定した \mathbf{u}_k^* を使う。それは (3.8) 式で示されるように、順過程における物理量の推定値の線形結合で与えられる。その物理量を時間反転した結果 \mathbf{u}_k^* である。(3.4) 式と (3.33) 式の熱揺らぎは互いに独立で、その確率密度はともに $P_k^{(w)}$ に従う。

順過程の時間発展は (3.4) 式で記述され、 \mathbf{x}_k と \mathbf{u}_k を与えられたときの \mathbf{x}_{k+1} の条件付き確率密度を定義することができる。それを $P_{k+1|k}(\mathbf{x}_{k+1}|\mathbf{x}_k; \mathbf{u}_k)$ と表す。逆過程において対応する時間ステップで、時刻 $k+1$ の状態を与えられたときの k の状態の条件付き確率密度を $\overleftarrow{P}_{k|k+1}$ で表す。各ステップで詳細つりあいの定理は次式で記述される。

$$P_{k+1|k}(\mathbf{x}_{k+1}|\mathbf{x}_k; \mathbf{u}_k) e^{-\beta\mathcal{E}(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k)} = \overleftarrow{P}_{k|k+1}(\mathbf{x}_k^*|\mathbf{x}_{k+1}^*; \mathbf{u}_k^*) e^{-\beta\mathcal{E}(\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{u}_k)}. \quad (3.34)$$

順過程における全ての系の吸熱 Q は

$$Q(\mathbf{x}_{[0,N]}, \mathbf{u}_{[0,N-1]}) = \sum_{k=0}^{N-1} \{\mathcal{E}(\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{u}_k) - \mathcal{E}(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k)\}. \quad (3.35)$$

与えられ、プラントにした仕事 W は次式で記述される [27]。

$$W(\mathbf{x}_{[0,N]}, \mathbf{u}_{[0,N]}) = \sum_{k=0}^{N-1} \{\mathcal{E}(\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{u}_{k+1}) - \mathcal{E}(\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{u}_k)\}. \quad (3.36)$$

この平均は (2.7) 式の右辺第一項に符合する。 \mathbf{u}_0 と \mathbf{u}_N が固定されているので、 W は $\mathbf{u}_{[1,N-1]}$ により決定され、 $\mathbf{x}_{[0,N]}$ と $\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ の関数であることがわかる。各ステップの Q と W を足し上げると次のようになる。

$$Q + W = \mathcal{E}(\mathbf{x}_N, \mathbf{u}_N) - \mathcal{E}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0). \quad (3.37)$$

当然ながら、初期状態と終状態の間におけるプラントのエネルギー変化は Q と W の和に等しくなる。時刻 $k = 0$ から $N - 1$ までの (3.34) 式を掛け合わせると次式を得る。

$$e^{\beta Q} \prod_{k=0}^{N-1} P_{k+1|k}(\mathbf{x}_{k+1}|\mathbf{x}_k; \mathbf{u}_k) = \prod_{k=0}^{N-1} \overleftarrow{P}_{k|k+1}(\mathbf{x}_k^*|\mathbf{x}_{k+1}^*; \mathbf{u}_k^*). \quad (3.38)$$

逆過程の初期状態の確率分布を $\overleftarrow{P}_N(\mathbf{x}_N)$ をする。これは順過程の終状態の確率分布と一致しなくてもよい。順過程の \mathbf{u}_N が $\mathbf{y}_{[1,N-1]}$ に関係なく決まることを確認しておく。逆過程の初期状態が \mathbf{u}_N の下で熱平衡系状態にあるとする。温度を T とすると、逆過程の初期分布は次で与えられる。

$$\overleftarrow{P}_N(\mathbf{x}_N) = \exp\{-\beta\mathcal{E}(\mathbf{x}_N, \mathbf{u}_N)\} / Z(T, \mathbf{u}_N) . \quad (3.39)$$

これは $\overleftarrow{P}_N(\mathbf{x}_N^*)$ と一致する。

順過程における初めと終わりの間のヘルムホルツの自由エネルギー差を ΔF とすると、 $Z(T, \mathbf{u}_N) / Z(T, \mathbf{u}_0)$ は $e^{-\beta\Delta F}$ に等しく、 T 、 \mathbf{u}_0 、 \mathbf{u}_N の関数である。(3.38) 式と (3.39) 式を掛け合わせると次式が得られる。

$$e^{\beta(\Delta F - W)} G = \overleftarrow{G} . \quad (3.40)$$

ここで G と \overleftarrow{G} はそれぞれ次のように定義した。

$$G \equiv P_0(\mathbf{x}_0) \left\{ \prod_{k=0}^{N-1} P_{k+1|k}(\mathbf{x}_{k+1} | \mathbf{x}_k; \mathbf{u}_k) \right\} , \quad (3.41)$$

$$\overleftarrow{G} \equiv \overleftarrow{P}_N(\mathbf{x}_N^*) \left\{ \prod_{k=0}^{N-1} \overleftarrow{P}_{k|k+1}(\mathbf{x}_k^* | \mathbf{x}_{k+1}^*; \mathbf{u}_k^*) \right\} . \quad (3.42)$$

フィードバックがなく $\mathbf{u}_{[0,N]}$ が固定されている場合、(3.41) 式は順過程における $\mathbf{x}_{[0,N]}$ の確率密度になる。また、(3.42) 式は逆過程における $\mathbf{x}_{[0,N]}^*$ の確率密度になる。

3.5 プラントにおけるジャルジンスキー等式

フィードバック系において $\mathbf{y}_{[1,k]}^{(2)}$ の値により \mathbf{u}_k が決定される (図 3.1)。条件付き確率密度 $P_{k+1|k}(\mathbf{x}_{k+1} | \mathbf{x}_k; \mathbf{u}_k)$ に \mathbf{x}_k と $\mathbf{y}_{[1,k]}^{(2)}$ の条件付き確率密度を掛けると、 \mathbf{x}_{k+1} と \mathbf{x}_k と $\mathbf{y}_{[1,k]}^{(2)}$ の結合確率密度を得る。

$$P_{k+1|k}(\mathbf{x}_{k+1} | \mathbf{x}_k; \mathbf{u}_k) P(\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_{[1,k]}^{(2)}) = P(\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{x}_k, \mathbf{y}_{[1,k]}^{(2)}) . \quad (3.43)$$

$P_{k+1|k}(\mathbf{x}_{k+1} | \mathbf{x}_k; \mathbf{u}_k)$ は \mathbf{x}_k と $\mathbf{y}_{[1,k]}^{(2)}$ が与えられたときの \mathbf{x}_{k+1} の条件付き確率でもあるので、 $P(\mathbf{x}_{k+1} | \mathbf{x}_k, \mathbf{y}_{[1,k]}^{(2)})$ と直すことができる。(3.41) 式の右辺に次の積が含まれている。

$$P(\mathbf{x}_{k+2} | \mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{y}_{[1,k+1]}^{(2)}) P(\mathbf{x}_{k+1} | \mathbf{x}_k, \mathbf{y}_{[1,k]}^{(2)}) . \quad (3.44)$$

$\mathbf{x}_{k+1}^{(2)}$ と $\mathbf{y}_{[1,k+1]}^{(2)}$ が与えられたとすると、 $\mathbf{x}_{k+2}^{(2)}$ の確率密度は $\mathbf{x}_k^{(2)}$ に独立である。これは (3.12) 式の $w_{[0,k+1]}$ がそれぞれ統計的に独立であることによる。 $\mathbf{y}_{[1,k+1]}^{(2)}$ により $\mathbf{x}_{[k,k+2]}^{(1)}$ が決定されるので、(3.44) 式の第一因子は次のように書き直せる。

$$P\left(\mathbf{x}_{k+2}|\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{y}_{[1,k+1]}^{(2)}\right) = P\left(\mathbf{x}_{k+2}|\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{x}_k, \mathbf{y}_{[1,k+1]}^{(2)}\right). \quad (3.45)$$

一方、残りの条件付き確率密度について一般には

$$P\left(\mathbf{x}_{k+1}|\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_{[1,k]}^{(2)}\right) \neq P\left(\mathbf{x}_{k+1}|\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_{[1,k+1]}^{(2)}\right) \quad (3.46)$$

である。なぜなら、 \mathbf{x}_{k+1} の確率密度は \mathbf{y}_{k+1} の、したがって $\mathbf{y}_{k+1}^{(2)}$ の値を得ているかどうか依存しているためである。このように、測定の影響のため、(3.44) 式を $P(\mathbf{x}_{[k+2]}, \mathbf{x}_{[k+1]}|\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_{[1,k+1]}^{(2)})$ と書き直すことはできない。したがって、フィードバック制御の下において G は $\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ を与えられたときの $\mathbf{x}_{[0,N]}$ の条件付き確率密度に一致しない。

$$G \neq P\left(\mathbf{x}_{[0,N]}|\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right). \quad (3.47)$$

つまり、フィードバック系をつくることにより、順過程はマルコフ性を失うことになる。

逆過程において、測定は行わず、順過程で得られている $\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ より入力を決める。したがって、次の関係がわかる。

$$\overleftarrow{P}_{k|k+1}\left(\mathbf{x}_k^*|\mathbf{x}_{k+1}^*; \mathbf{u}_k^*\right) = \overleftarrow{P}\left(\mathbf{x}_k^*|\mathbf{x}_{k+1}^*, \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right). \quad (3.48)$$

右辺は \mathbf{x}_{k+1}^* と $\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ が与えられたときの \mathbf{x}_k^* の条件付き確率密度である。簡単のため、逆過程での様々な確率密度を \overleftarrow{P} で表している。(3.33) 式より次式が得られる。

$$\overleftarrow{P}\left(\mathbf{x}_{k-1}^*|\mathbf{x}_k^*, \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) = \overleftarrow{P}\left(\mathbf{x}_{k-1}^*|\mathbf{x}_{[k,N]}^*, \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right). \quad (3.49)$$

このように、(3.42) 式は次のように書き直せる。

$$\overleftarrow{G} = \overleftarrow{P}\left(\mathbf{x}_{[0,N]}^*|\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right). \quad (3.50)$$

これは順過程により $\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ が与えられたときの逆過程である $\mathbf{x}_{[0,N]}^*$ の確率密度である。したがって、逆過程の $\mathbf{x}_{[0,N]}^*$ はマルコフ過程になっている。(3.41) 式より、次式が得られる。

$$1 = \int d\mathbf{x}_{[0,N]} \int d\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)} P\left(\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) \overleftarrow{G} \quad (3.51)$$

$$= e^{\beta\Delta F} \int d\mathbf{x}_{[0,N]} \int d\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)} P\left(\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) e^{-\beta W} G. \quad (3.52)$$

(3.36) 式の下で述べたように、 W は $\mathbf{x}_{[0,N]}$ と $\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ の関数である。

$P(\mathbf{x}_{k+1}|\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_{[1,k]}^{(2)})$ は次のように変形できる。

$$\int d\mathbf{x}_{k+1}^{(2)} \delta\left(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_{k+1}^{(1)}(\mathbf{y}_{[1,k]}^{(2)}) - \mathbf{x}_{k+1}^{(2)}\right) P_{k+1|k}^{(2)}\left(\mathbf{x}_{k+1}^{(2)} \mid \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_k^{(1)}(\mathbf{y}_{[1,k-1]}^{(2)})\right). \quad (3.53)$$

また、(3.13) 式、(3.15) 式、(3.41) 式より次式が得られる。

$$G = \left\{ \prod_{k=0}^N \int d\mathbf{x}_k^{(2)} \delta\left(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_k^{(1)}(\mathbf{y}_{[1,k-1]}^{(2)}) - \mathbf{x}_k^{(2)}\right) \right\} P_{[0,N]}^{(2)}\left(\mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)}\right). \quad (3.54)$$

上式は $P_{[0,N]}^{(2)}(\mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)})$ の $\mathbf{x}_k^{(2)}$ を $\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_k^{(1)}(\mathbf{y}_{[1,k-1]}^{(2)})$ で置き換えると G に一致することを意味する。次の等式が成り立つ。

$$P\left(\mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)} \mid \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) = P\left(\mathbf{x}_N^{(2)} \mid \mathbf{x}_{[0,N-1]}^{(2)}, \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) P\left(\mathbf{x}_{[0,N-1]}^{(2)} \mid \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right). \quad (3.55)$$

(3.45) 式の上の議論に注意すると、上式の第一因子は次のように書き直せる。

$$P\left(\mathbf{x}_N^{(2)} \mid \mathbf{x}_{[0,N-1]}^{(2)}, \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) = P\left(\mathbf{x}_N^{(2)} \mid \mathbf{x}_{[0,N-1]}^{(2)}\right). \quad (3.56)$$

上式の右辺の $\mathbf{x}_{[0,N-1]}^{(2)}$ は $\mathbf{x}_{[0,N-1]}^{(2)}$ で書き直せる。(3.55) の右辺の二つ目の条件付き確率を次のように書き直す。

$$\begin{aligned} & P\left(\mathbf{x}_0^{(2)} \mid \mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)}, \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) P\left(\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)} \mid \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) \\ &= P\left(\mathbf{x}_0^{(2)} \mid \mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) P\left(\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)} \mid \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right). \end{aligned} \quad (3.57)$$

\mathcal{I}_2 を次のように定義する。

$$\mathcal{I}_2\left(\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)} \mid \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) \equiv \ln \left\{ P\left(\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)} \mid \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) / P\left(\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) \right\}. \quad (3.58)$$

すると、(3.55) 式は次式と等しくなることがわかる。

$$P\left(\mathbf{x}_N^{(2)} \mid \mathbf{x}_{[0,N-1]}^{(2)}\right) P\left(\mathbf{x}_0^{(2)} \mid \mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) P\left(\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)} \mid \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) e^{\mathcal{I}_2}. \quad (3.59)$$

上式の三つの確率密度の積は次式左辺となるので、(3.55) 式から

$$P_{[0,N]}^{(2)}\left(\mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)}\right) = e^{-\mathcal{I}_2} P\left(\mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)} \mid \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) \quad (3.60)$$

を得る。上式の右辺と同じ確率密度が (3.54) 式に含まれている。(3.60) 式を用いて (3.54) 式を (3.52) 式に代入すると次式が得られる。

$$1 = e^{\beta\Delta F} \int d\mathbf{x}_{[0,N]} \int d\mathbf{y}_{[1,N-1]} \int d\mathbf{x}_{[0,N]} P\left(\mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)}, \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) e^{-\beta W - \mathcal{I}_2} \left\{ \prod_{k=0}^N \delta\left(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_k^{(1)}(\mathbf{y}_{[1,k-1]}^{(2)}) - \mathbf{x}_k^{(2)}\right) \right\} \quad (3.61)$$

$$= e^{\beta\Delta F} \int d\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)} \int d\mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)} P\left(\mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)}, \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) \exp\left\{-\beta W\left(\mathbf{x}_{[0,N]}^{(1)} + \mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)}, \mathbf{u}_{[0,N]}\right) - \mathcal{I}_2\left(\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)} | \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right)\right\}. \quad (3.62)$$

ここで $\mathbf{x}_{[0,N]}^{(1)} + \mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)}$ は、 k を 0 から N まで動かしたときの $\mathbf{x}_k^{(1)}(\mathbf{y}_{[1,k-1]}^{(2)}) + \mathbf{x}_k^{(2)}$ の過程を表している。また、(3.16) 式からわかるように、 $\mathbf{u}_{[1,N-1]}$ は $\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ に依存している。(3.24) 式を用いると次式が得られる。

$$1 = e^{\beta\Delta F} \langle e^{-\beta W - \mathcal{I}_2} \rangle. \quad (3.63)$$

上式にイェンセン不等式を適用すると次のように変形できる。

$$\langle W \rangle \geq \Delta F - k_B T \langle \mathcal{I}_2 \rangle. \quad (3.64)$$

(3.24) 式より $\langle \mathcal{I}_2 \rangle$ は次式で計算できることがわかる。

$$\langle \mathcal{I}_2 \rangle = \int d\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)} \int d\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)} P\left(\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)}, \mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) \mathcal{I}_2\left(\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)} | \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right). \quad (3.65)$$

これは $\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)}$ と $\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ の相互情報量を表している。イェンセン不等式の等号成立条件より、(3.64) 式の等号は含まれている確率変数が全て確定的になるとき成立することがわかる。相互情報量は非負の値をとり、 $\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)}$ と $\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ が確率的に独立のときゼロになる。測定によりプラントの情報を得られると、(3.64) 式で示されたように、得られた情報を使って仕事の平均の最小値を下げるができることがわかる。これらは §2.2 に示した数値計算の結果と符合する。

3.6 まとめと考察

(3.63) 式と (3.64) 式は、ゲインの決め方を固定しておけば、測定ノイズの大きさや過程時間などの過程途中の詳細を変えても成り立つ。この意味で、(3.64) 式の右辺は仕事の平均の最小限界を与える、と解釈できる。この最小限界も過程途中の詳細による点で、(1.1) 式の右辺とは異なる。

(3.63) 式の導出までの要点をまとめる。(3.4) 式の離散時間ランジュバン方程式でプラントの状態の時間発展が記述できるとする。白色過程の測定ノイズを伴ってプラントの状態が測定され、そ

の測定値は (3.5) 式で得られる。状態ベクトル x_k を $x_k^{(1)}$ と $x_k^{(2)}$ に分離し、§3.3 の冒頭で $y_k^{(2)}$ を導入した。時刻 $k \geq 2$ で、(3.8) 式で表される線形レギュレータとカルマンフィルタより $y_{[1,k-1]}^{(2)}$ から $x_k^{(1)}$ を決定する方法が定められる。したがって、§3.3 の末尾に記述したように、 $x_k^{(1)}$ は $x_k^{(1)}(y_{[1,k-1]}^{(2)})$ と関数の形で表すことができる。プラントは熱浴に接しており、(3.34) 式で表される詳細つりあいの定理が成り立つとすると、(3.40) 式が導ける。§3.5 で $x_0^{(2)}$ (または $x_N^{(2)}$) の確率密度は $x_1^{(2)}$ (または $x_{N-1}^{(2)}$) が与えられたとすると、 $y_{[1,N-1]}^{(2)}$ に依存しないことに気をつけ、 $x_k^{(1)}(y_{[1,k-1]}^{(2)})$ を用いて、(3.40) 式を (3.63) 式に書き換えた。

§3.2 で述べたように、(3.4) 式がプラントと熱浴からなる古典ハミルトン系の時間発展と矛盾しないように、(3.8) 式のゲインは制限されるかもしれない。最適ゲインは (3.9) 式で表される二次形式の評価関数を最小にするように、(3.32) 式より計算できる。しかし、(3.63) 式の導出は $x_k^{(1)}(y_{[1,k-1]}^{(2)})$ の関数に依らず、最適ゲインを用いなくともよい。このように、(1.11) 式のジャルジンスキー等式がどのような外場に対しても、それを固定すれば成立しているように、どのようなゲインに対しても、それを固定すれば (3.63) 式は成立する。

状態変数と測定値が共にガウシアンするとき、それらの間の相互情報量の簡単な表式は、連続時間と離散時間の両方の場合で知られている [17, 47]。連続時間での表式は (2.31) 式で用いた。離散時間のフィードバック系における相互情報量は次式で簡単に計算することができる。

$$\langle \mathcal{I}_2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \ln \det (\mathcal{P}_k^{-1} M_k) . \quad (3.66)$$

ここで \det は行列式を表す。(3.27) 式と (3.28) から分かるように、(3.66) 式の右辺は $A_{[1,N-1]}$ 、 $\Xi_{[1,N-2]}$ 、 $C_{[1,N-1]}$ 、 $V_{[1,N-1]}$ と x_1 の共分散で決まるのでゲインに依存しない。このことは最適ゲインでなくても (3.63) 式が成立することと符合する。

次式の両辺は共に (3.60) 式の左辺に等しい。

$$\begin{aligned} & \int d\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)} P(\mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)}, \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}) e^{-\mathcal{I}_2} \\ &= \int d\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)} P(\mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)}, \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}) . \end{aligned} \quad (3.67)$$

フィードバック制御をしない場合について議論するため、 $\mathbf{u}_{[0,N]}^{(1)}$ と $\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ が独立であるとする。すると (3.36) 式からわかるように W も $\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ に依存しなくなる。(3.67) 式より (3.62) 式は次のように変形できる。

$$\begin{aligned} 1 &= e^{\beta \Delta F} \int d\mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)} P_{[0,N]}^{(2)}(\mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)}) \\ & \quad \times \exp\{-\beta W(\mathbf{x}_{[0,N]}^{(1)} + \mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)}, \mathbf{u}_{[0,N]})\} . \end{aligned} \quad (3.68)$$

ここでは、 $\mathbf{x}_{[0,N]}^{(1)}$ が確定的であるので、 $\mathbf{x}_k^{(2)} = \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_k^{(1)}$ より、 $\mathbf{x}_k^{(2)}$ は \mathbf{x}_k の関数である。(3.68) 式は次のように書き直せる。

$$1 = e^{\beta\Delta F} \int d\mathbf{x}_{[0,N]} P(\mathbf{x}_{[0,N]}) \exp\{-\beta W(\mathbf{x}_{[0,N]}, \mathbf{u}_{[0,N]})\}. \quad (3.69)$$

これは (1.11) 式のジャルジンスキー等式に一致する。フィードバック制御をしない場合、 $G = P(\mathbf{x}_{[0,N]})$ となることが要点である。

フィードバック制御の下で一回の測定しかない場合を考えるため、 $N = 2$ とする。定義より次式が得られる。

$$\mathcal{I}_2(\mathbf{x}_1^{(2)}|\mathbf{y}_1^{(2)}) = \ln \left\{ P^{(2)}(\mathbf{x}_1^{(2)}|\mathbf{y}_1^{(2)}) / P^{(2)}(\mathbf{x}_1^{(2)}) \right\}. \quad (3.70)$$

以下の議論で混乱しないために確率密度に (2) をつけておく。 $\mathbf{x}_1^{(1)} \equiv A_0\mathbf{x}_0^{(1)} + B_0\mathbf{u}_0$ と定義すると、これが確定的なので、(3.16) 式より次式を得る。

$$\mathbf{x}_1^{(2)} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1^{(1)}, \quad \mathbf{y}_1^{(2)} = \mathbf{y}_1 - C_1\mathbf{x}_1^{(1)}. \quad (3.71)$$

$\mathbf{x}_1^{(2)}$ は \mathbf{x}_1 の関数であり、また、 $\mathbf{y}_1^{(2)}$ も \mathbf{y}_1 の関数である。したがって、それぞれ $\mathbf{x}_1^{(2)}(\mathbf{x}_1)$ と $\mathbf{y}_1^{(2)}(\mathbf{y}_1)$ と書くことにしよう。それぞれの具体的な関数は (3.71) 式であり、共に逆関数が存在する。 \mathbf{x}_1 の確率密度を $P(\mathbf{x}_1)$ で、 \mathbf{y}_1 が与えられたときの \mathbf{x}_1 の条件付き確率密度を $P(\mathbf{x}_1|\mathbf{y}_1)$ で表すと次の関係が得られる。

$$P(\mathbf{x}_1) = P^{(2)}(\mathbf{x}_1^{(2)}(\mathbf{x}_1)), \quad (3.72)$$

$$P(\mathbf{x}_1|\mathbf{y}_1) = P^{(2)}(\mathbf{x}_1^{(2)}(\mathbf{x}_1)|\mathbf{y}_1^{(2)}(\mathbf{y}_1)). \quad (3.73)$$

(3.63) 式より (3.70) 式を次のように書き直す。

$$\ln \{P(\mathbf{x}_1|\mathbf{y}_1) / P(\mathbf{x}_1)\}. \quad (3.74)$$

上式の平均が \mathbf{x}_1 と \mathbf{y}_1 の間の相互情報量になる。これは予想される通り (3.1) 式と一致する。

二回測定の場合、つまり $N = 3$ の場合を考える。このときでも (3.71) 式は成り立ち、さらに次のような関係がある。

$$\mathbf{x}_2^{(2)} = \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_2^{(1)}(\mathbf{y}_1^{(2)}), \quad (3.75)$$

$$\mathbf{y}_2^{(2)} = \mathbf{y}_2 - C_2\mathbf{x}_2^{(1)}(\mathbf{y}_1^{(2)}). \quad (3.76)$$

(3.16) 式の上で述べたように \mathbf{u}_1 は $\mathbf{y}_1^{(2)}$ の関数であるので $\mathbf{u}_1(\mathbf{y}_1^{(2)})$ と表す。(3.11) 式より次式を得る。

$$\mathbf{x}_2^{(1)}(\mathbf{y}_1^{(2)}) = A_1(A_0\mathbf{x}_0^{(1)} + B_0\mathbf{u}_0) + B_1\mathbf{u}_1(\mathbf{y}_1^{(2)}). \quad (3.77)$$

$\mathbf{y}_1^{(2)}(\mathbf{y}_1)$ を (3.75) 式と (3.76) 式に代入すると、 $\mathbf{x}_2^{(2)}$ が \mathbf{x} と \mathbf{y}_1 の、 $\mathbf{y}_2^{(2)}$ は $\mathbf{y}_{[1,2]}$ の関数であることがわかるので、それぞれ $\mathbf{x}_2^{(2)}(\mathbf{x}_2, \mathbf{y}_1)$ と $\mathbf{y}_2^{(2)}(\mathbf{y}_{[1,2]})$ と表す。 $\mathbf{x}_2^{(2)}$ が \mathbf{y}_1 に依存しているため、 $\mathbf{x}_{[1,2]}$ と $\mathbf{x}_{[1,2]}^{(2)}$ のそれぞれの確率密度の関係を (3.75) 式のように簡単な形で表せない。 P を $\mathbf{y}_{[1,2]}$ が与えられたときの $\mathbf{x}_{[1,2]}$ の、 $P^{(2)}$ を $\mathbf{y}_{[1,2]}^{(2)}$ が与えられたときの $\mathbf{x}_{[1,2]}^{(2)}$ の条件付き確率密度とすると、次の関係がある。

$$P(\mathbf{x}_{[1,2]}|\mathbf{y}_{[1,2]}) = P^{(2)}(\mathbf{x}_1^{(2)}(\mathbf{x}_1), \mathbf{x}_2^{(2)}(\mathbf{x}_2, \mathbf{y}_1)|\mathbf{y}_1^{(2)}(\mathbf{y}_1), \mathbf{y}_2^{(2)}(\mathbf{y}_{[1,2]})) . \quad (3.78)$$

上式が (3.73) 式のように簡単な形に書けないのは、上式の右辺の縦棒の前に測定値が存在するためである。このことは $N \geq 3$ において、

$$\mathcal{I}(\mathbf{x}_{[1,N-1]}|\mathbf{y}_{[1,N-1]}) \equiv \ln\{P(\mathbf{x}_{[1,N-1]}|\mathbf{y}_{[1,N-1]})/P(\mathbf{x}_{[1,N-1]})\} \quad (3.79)$$

で定義される $\mathbf{x}_{[1,N-1]}$ と $\mathbf{y}_{[1,N-1]}$ の間の相互情報量で、(3.63) 式の \mathcal{I}_2 が置き換えられないことを示している。

第4章 調和ポテンシャルによるブラウン粒子の輸送

前章で古典系に数回フィードバック制御をしたとき、プラントにした仕事の最小限界が (3.64) 式の右辺で決まることを示した。第2章で考えたモデルで、この不等式が成り立っていることを §2.2 で数値的に示した。けれども両辺の値は大きく異なり、どういう条件で等式に近づくか興味もたれる。制御が関わらない場合の (1.1) 式では、仕事の下限は過程途中の詳細に依らない。(3.64) 式の最小限界は、そうでないことに注意する。本章では、第2章で考えたのとは別のモデルを使って、どういう場合に (3.64) 式の不等式が等式に近づくか調べる。また、右辺の $\langle I_2 \rangle$ はゲインに依らないことにも注意する。なお、本章の内容は文献 [48] で発表された。

4.1 モデルと定式化

一次元の調和ポテンシャル下にある質量 m のブラウン粒子を考える (図 4.1)。

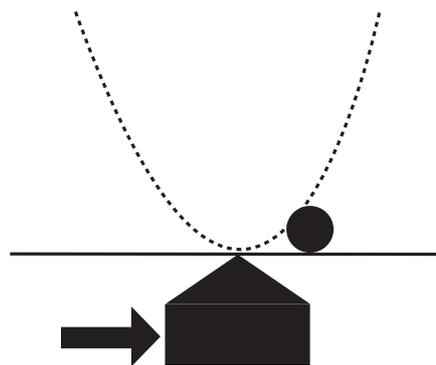


図 4.1: デバイスによって作られる調和ポテンシャル (点線) の下でブラウン粒子 (●) を考える。矢印のようにデバイスに外力を加えることで、ブラウン粒子を輸送する。

調和ポテンシャルは質量 M のデバイスにより生じるとし、デバイスへの外力 $f(t)$ を操作することで、デバイスを移動できる。ブラウン粒子とデバイスをプラント見なす。ブラウン粒子の位置 x とデバイスの位置 a はともに時間 t の関数である。 ω を定数として、調和ポテンシャルを $U(x, a) \equiv m\omega^2(x - a)^2/2$ と書く。デバイスは初期時刻までは固定する。ブラウン粒子は温度 T の熱浴に接しており、初期時刻で熱平衡状態にあるとする。有限時間 t_f で距離 L だけデバイスの位置を移動させた後、また停止させる。デバイスの移動後、時間が経つと粒子は、平行移動しているけれど、初期状態と同じ熱平衡状態になる。したがって、この操作は等温サイクルであり、初期状態と終状態の間のヘルムホルツの自由エネルギーの変化はゼロである。初期時刻でデバイスの位置と速度は、それぞれ $a(0) = -L$ および $\dot{a}(0) = 0$ とする。

単位質量あたりの摩擦係数を $\gamma (> 0)$ とすると、ブラウン粒子の位置の時間発展は次の線形ランジュバン方程式で記述されるとする。

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -m\gamma\dot{x} - \frac{\partial U(x, a)}{\partial x} + m\xi(t). \quad (4.1)$$

ξ は熱揺らぎを表し、平均がゼロの白色ガウス過程である。§2.1 と同様に、この過程では熱平衡状態より離れ過ぎないと考え、揺動散逸定理により、その時間相関が $\langle \xi(t + \tau)\xi(t) \rangle = 2\gamma k_B T \delta(\tau)/m$ を満たすとする。デバイスの質量はブラウン粒子の質量より十分大きく、デバイスと熱浴の相互作用は小さいとする。デバイスに外力 $f(t)$ を加えたとき、デバイスの位置の時間発展は次の方程式で与えられるとする。

$$M \frac{d^2a}{dt^2} = -\frac{\partial U(x, a)}{\partial a} + f(t). \quad (4.2)$$

プラントの状態はブラウン粒子とデバイスのそれぞれの位置と速度の四つの変数で記述されるので、状態ベクトルを $\mathbf{x} \equiv (x, \dot{x}, a, \dot{a})^T$ とできる。測定により状態ベクトルの値を得るとき、測定ノイズ $\boldsymbol{\eta}$ を伴うとする。測定ノイズ $\boldsymbol{\eta}$ は平均ゼロの白色ガウス過程で、熱揺らぎとの相関はないとする。測定ノイズの大きさを表す定行列 H を導入し、この時間相関は次のように表す。

$$\langle \boldsymbol{\eta}(t + \tau)\boldsymbol{\eta}(t)^T \rangle = H\delta(\tau). \quad (4.3)$$

n 個の変数 ($n = 1, 2, 3, 4$) が測定可能であるとき、 $n \times 4$ の定行列 C を用いて、状態ベクトルの測定値 \mathbf{y} は次のようになる。

$$\mathbf{y}(t) \equiv C\mathbf{x}(t) + \boldsymbol{\eta}(t). \quad (4.4)$$

全ての状態変数が測定可能のとき C は 4×4 の単位行列になる。後述の数値計算では、この場合を扱う。

ある時刻での状態ベクトルの値は、その時刻までの測定値から推定できる。ここで t_f^- を t_f の微小時間前の時刻と定義する。後に述べるように、 $0 \leq t \leq t_f^-$ の間でフィードバック制御を行い、時

刻 t_f^- でデバイスの位置が原点に近づくように、推定された状態ベクトル \hat{x} から外力 $f(t)$ を決定する。 $t_f^- < t < t_f$ では、デバイスの速度をゼロにするように、過去の測定値に依らずに外力 $f(t)$ を決める。時刻 t_f の後、十分時間が経つと、プラントは初期状態と同じ熱平衡状態に達する。

ここで $\mathbf{b} = (0, 0, 0, 1)^T$ と $\boldsymbol{\xi} = (0, \xi, 0, 0)^T$ を導入し、 A を次のように定義する。

$$A \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\omega^2 & -\gamma & \omega^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ \omega^2 m/M & 0 & -\omega^2 m/M & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

(4.1) 式と (4.2) 式をまとめて次のように書き直す。

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = A\mathbf{x}(t) + f(t)\mathbf{b} + \boldsymbol{\xi}(t). \quad (4.6)$$

状態ベクトルを $\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2$ となるように分割し、 \mathbf{x}_1 と \mathbf{x}_2 の時間発展はそれぞれ次の式に従う。

$$\dot{\mathbf{x}}_1(t) = A\mathbf{x}_1(t) + f(t)\mathbf{b}, \quad (4.7)$$

$$\dot{\mathbf{x}}_2(t) = A\mathbf{x}_2(t) + \boldsymbol{\xi}(t). \quad (4.8)$$

(4.7) 式と (4.8) 式の和は (4.6) 式になる。測定値も分割し、 \mathbf{y}_2 を次のように定義する。

$$\mathbf{y}_2(t) \equiv \mathbf{y}(t) - C\mathbf{x}_1(t) = C\mathbf{x}_2(t) + \boldsymbol{\eta}(t). \quad (4.9)$$

時刻 $t = 0$ で $\mathbf{x}_1(0)$ の値を任意に決める。時刻 t において、 $f(s)$ ($s < t$) が全て既知であるので、 $\mathbf{x}_1(t)$ の値は (4.7) 式より計算することができる。したがって、時刻 t の測定値 $\mathbf{y}(t)$ から (4.9) 式を用いて、 $\mathbf{y}_2(t)$ の値を得ることができる。カルマンフィルタを用いると、 $\mathbf{y}_2(t)$ の値より \mathbf{x}_2 の推定値 $\hat{\mathbf{x}}_2$ を得ることができる。状態 \mathbf{x} の推定値 $\hat{\mathbf{x}}$ は \mathbf{x}_1 と $\hat{\mathbf{x}}_2$ の和で与えられる。線形フィードバック系において、推定値 $\hat{\mathbf{x}}$ に比例した $f(t)$ を考える。区間 $0 \leq t \leq t_f^-$ で、外力 $f(t)$ は次のように書ける。

$$f(t) = -\mathbf{d}(t)^T \hat{\mathbf{x}}(t). \quad (4.10)$$

ここでゲイン $\mathbf{d}(t)$ は以降で定義する評価関数を最小にするように決定する。

時刻 $t = 0$ から τ までのプラントにした仕事は次式で与えられる。

$$W(\tau) \equiv \int_0^\tau dt f(t) \frac{da}{dt} \quad (4.11)$$

$$= \frac{M}{2} \dot{a}(\tau)^2 + \int_0^\tau dt \frac{\partial U(x, a)}{\partial a} \frac{da}{dt}. \quad (4.12)$$

等温サイクルでプラントにした仕事の平均値が最小になるフィードバック制御を考えたい。区間 $t_f^- \leq t \leq t_f$ でフィードバック制御を行わないので、時刻 t_f^- までにプラントにした仕事 $W^- \equiv W(t_f^-)$

の平均を最小にすることにする。その他、時刻 t_f^- でデバイスの位置を原点に近づけるためと、外力の大きさが大きくなり過ぎないための条件を加えると、評価関数 J を次のように定義する。

$$J = \langle W^- \rangle + R_1 \int_0^{t_f^-} \langle f(t)^2 \rangle dt + R_2 \langle a(t_f^-)^2 \rangle . \quad (4.13)$$

ここで R_1 と R_2 は制御パラメータである。また、 $\langle \dots \rangle$ は初期状態と熱揺らぎ、および測定ノイズに関する統計平均を表す。評価関数が状態ベクトル $x(t)$ と外力 $f(t)$ の二次形式となるので、制御理論で一般的に取り扱われている線形レギュレータ問題と同じ枠組みで定式化することができる。(4.13) 式に (4.10) 式を代入すると、評価関数 J はゲイン d の汎関数であることがわかる。評価関数を最小にするゲインを最適ゲインと呼び、 d^* で、最適ゲインによる外力を加えたときにプラントにした仕事の平均を $\langle W^- \rangle^*$ で表す。

もしブラウン粒子が存在していなければ、時刻 $t = t_f^-$ から t_f までにプラントにした仕事は、 $-M \langle \dot{a}(t_f^-)^2 \rangle^*/2$ で与えられる。その値はブラウン粒子が存在した場合で、(4.11) 式から得られる $W - W^-$ の値と、それほど変わらないはずである。今回の数値計算において、 $-M \langle \dot{a}(t_f^-)^2 \rangle^*/2$ の値は $\langle W^- \rangle^*$ の値より、はるかに小さくなる。実際、§4.2 末に示すパラメータを用いて、それぞれの値を数値計算すると、 $-M \langle \dot{a}(t_f^-)^2 \rangle^*/2 = 0.0395$ および $\langle W^- \rangle^* = -24.8$ となり、前者が桁違いで小さくなる。したがって、以降で $\langle W^- \rangle^*$ の値は $\langle W \rangle^*$ と等しいと考える。

(4.11) 式で定義した仕事は §3.4 での仕事の定義 (3.36) 式に符合することを示す。デバイスにより生成されたポテンシャルを $\phi(a, \mathbf{u})$ とし、 \mathbf{u} はポテンシャルの形を変えるための、時間に依存したパラメータである。簡単な例として、次のようなポテンシャルを考える。

$$\phi = -u_1 a + u_2 (a + L)^2 + u_3 a^3 . \quad (4.14)$$

ここで L より遥かに大きい定数 D を導入し、 $|a| \leq D$ とした。 $t \leq 0$ で、 u_1 と u_3 をともにゼロとし、デバイスを $-L$ に固定するために u_2 を十分大きな定数とする。 $0 < t \leq t_f^-$ で、 u_2 と u_3 がともにゼロとし、(4.10) 式で与えられる $f(t)$ に u_1 を等しくする。 $t_f^- < t$ で、 u_1 と u_2 をともにゼロとし、デバイスを $a(t_f^-) \approx 0$ に固定するために u_3 を十分大きな定数とする。プラントの熱平衡状態が存在するためには、 $D < |a|$ で ϕ は無限大に増加するとする。 $\phi(a(0), \mathbf{u}(0)) = \phi(a(t_f), \mathbf{u}(t_f))$ が成り立つとき、次式が得られる。

$$0 = \int_0^{t_f} dt \frac{\partial \phi}{\partial a} \dot{a}(t) + \int_0^{t_f} dt \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}}(t) . \quad (4.15)$$

右辺第二項は (3.36) 式の定義と一致している。(4.15) 式の右辺第一項を左辺に移項すると、得られた項は (4.11) 式の τ を t_f で置き換えたものと一致する。(3.63) 式より (3.64) 式が導けるので、(3.64) 式の W として (4.11) 式から計算される $W(t_f)$ を使うことができる。これは W^- とほぼ等しい。

4.2 計算方法

カルマンフィルタおよび線形レギュレータ問題の手法に従い、最適ゲイン d^* を求める。(4.13) 式を状態ベクトル $\mathbf{x}(t)$ を用いて書き直し、(4.10) 式を代入すると次のようになる。

$$J[\mathbf{d}] = \langle \mathbf{x}(t_f^-)^T G \mathbf{x}(t_f^-) \rangle + \int_0^{t_f^-} dt \langle \mathbf{x}(t)^T (Q + R_1 \mathbf{d} \mathbf{d}^T) \mathbf{x}(t) \rangle. \quad (4.16)$$

ここで G と Q をそれぞれ次のように定義する。

$$G \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M/2 \end{pmatrix}, \quad Q \equiv \frac{m\omega^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

次の微分方程式に従う 4×4 の対称行列 $\mathcal{P}(t)$ を導入する。

$$-\dot{\mathcal{P}}(t) = \mathcal{P}(t)A(t) + A(t)^T \mathcal{P}(t) - \frac{1}{R_1} \mathcal{P}(t) \mathbf{b} \mathbf{b}^T \mathcal{P}(t) + Q. \quad (4.17)$$

$t = t_f^-$ で \mathcal{P} の値は、 $\mathcal{P}_{33}(t_f^-) = R_2$ それ以外の成分はゼロである。最適ゲインは次式で与えられる。

$$\mathbf{d}^*(t) = \frac{1}{R_1} \mathbf{b}^T \mathcal{P}(t). \quad (4.18)$$

x_2 の推定誤差 $x_2 - \hat{x}_2$ と \mathbf{x} の推定誤差 $\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}$ は等しい。推定誤差の共分散行列 \bar{X} を次のように定義する。

$$\begin{aligned} \bar{X} &\equiv \langle (\mathbf{x}_2 - \hat{\mathbf{x}}_2)(\mathbf{x}_2 - \hat{\mathbf{x}}_2)^T \rangle \\ &= \langle (\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}})(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}})^T \rangle. \end{aligned} \quad (4.19)$$

熱揺らぎの時間相関 $\langle \xi(t+\tau)\xi(t)^T \rangle = \Xi \delta(\tau)$ より定行列 Ξ を定義すると、 $\Xi_{22} = 2\gamma k_B/m$ および、それ以外の成分はゼロとなる。共分散行列 \bar{X} の時間発展は次の微分方程式に従う。

$$\dot{\bar{X}}(t) = A\bar{X}(t) + \bar{X}(t)A^T - \bar{X}(t)C^T H^{-1} C \bar{X}(t) + \Xi. \quad (4.20)$$

初期条件は $t = 0$ で次のように与えられる。

$$\bar{X}(0) = \begin{pmatrix} k_B T / (m\omega^2) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k_B T / m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

カルマンフィルタを用いると、 \hat{x}_2 の時間発展は次の微分方程式で表される。

$$\dot{\hat{x}}_2(t) = A\hat{x}_2(t) + \bar{X}(t)C^T H^{-1}\{y_2(t) - C\hat{x}_2(t)\}. \quad (4.22)$$

ここで $\hat{x}_2(0)$ は $\langle x_2(0) \rangle$ と等しいとする。

$0 \leq t \leq t^-$ において、 x_2 と y_2 の軌道を考える。 $P_x^{(2)}$ を x_2 の軌道の確率密度、 $P_{x|y}^{(2)}$ を y_2 の軌道が与えられたときの x_2 の軌道の条件付き確率密度とする。それぞれの軌道間の相互情報量 I_2 は非負であり、次式で与えられる。

$$I_2 = \left\langle \ln \left(\frac{P_{x|y}^{(2)}}{P_x^{(2)}} \right) \right\rangle. \quad (4.23)$$

(2.31) 式にあるように、上式は次のように書き直すことができる。

$$I_2 = \frac{1}{2} \int_0^{t_f^-} dt \operatorname{tr}[\bar{X}(t)C^T H^{-1}C]. \quad (4.24)$$

相互情報量 I_2 の値は A 、 C 、 H 、 Ξ 、 $\bar{X}(0)$ のみで決定され、フィードバック制御の方法に依らない。上式より、相互情報量 I_2 を数値的に計算するとき、平均操作を行う必要がないこともわかる。

数値計算のために時間ステップ Δt で離散化することを考える。文献 [32] によると、(4.12) 式の右辺第二項を計算するとき、 $da/(dt)$ を時刻 t で計算するとき、 $\partial U/\partial a$ は時刻 $t + \Delta t/2$ で計算しなければならない。この項はデバイスがブラウン粒子にした仕事であり、ブラウン粒子とポテンシャル場にした仕事ではない。(4.16) 式の第二項は次のように離散化する。

$$\sum_{j=0}^{N-1} \langle \mathbf{x}(t_j)^T (\tilde{Q} + R_1 dd^T) \mathbf{x}(t_j) \rangle \Delta t. \quad (4.25)$$

ここで $t_j = j\Delta t$ 、 $t_{N-1} = t_f^-$ であり、 \tilde{Q} は次のように定義する。

$$\tilde{Q} \equiv \frac{m\omega^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -\Delta t/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & -\Delta t/2 & 1 & \Delta t \end{pmatrix}. \quad (4.26)$$

以下の数値計算で特に記述がなければ、物理量の値として $k_B T = 4.1$ 、 $\omega^2 = 1$ 、 $\gamma = 1$ 、 $m = 1$ を用いた。質量、長さ、時間の単位として、それぞれ pg、nm、 μs を用いれば、典型的な光ピンセットの実験における値にほぼ対応する。その他、特に記述がない場合、 $M = 10$ 、 $t_f^- = 100$ 、

$\Delta t = 0.01$ 、 $L = 10$ 、 $H_{11} = H_{22} = H_{33} = H_{44} = 1$ を用いた。毎ステップで測定を行い y を得て外力を変化させる。測定間隔の時間幅を δt で表すと、 Δt と等しくなる。測定間隔の時間幅を変化させる場合、 n ステップ毎に測定すると、 $\delta t = n\Delta t$ となる。乱数の発生はメルセンヌツイスター [40] を用い、ボックスミュラー法 [41] により正規乱数に変換した。物理量の平均は 10000 個のサンプルより計算した。

4.3 数値計算の結果

はじめに、時刻 t_f^- でデバイスの位置が目的地である原点に近づいていくかを制御パラメータを変化させて調べる。図 4.2 に示すように R_2 を大きくするにつれて、原点とのデバイスの位置の差の自乗は小さくなり、デバイスが原点に近づいていく。 R_2 が大きくなるにつれて、(4.13) 式の評価関数内での終端条件の項の比重が大きくなることから、この結果を理解することができる。 R_1 を $10^{-3} \leq R_1 \leq 10^{-1}$ の間で変化させても、図 4.2 の結果は変化しない。この R_1 の範囲内で R_1 を小さくすると、ここには示していないが、(4.13) 式より予想されるように、 $f(t)$ の大きさの時間平均が大きくなるのだが、 $\langle W^- \rangle^*$ の値は変化しない。このことは、やはりここには示していないが、 R_2 の変化にも依存しない。これらは §2.2 で示したのと同様の所見である。以降の数値計算で、 $R_1 = 10^{-1}$ 、 $R_2 = 10^4$ の値を用いる。

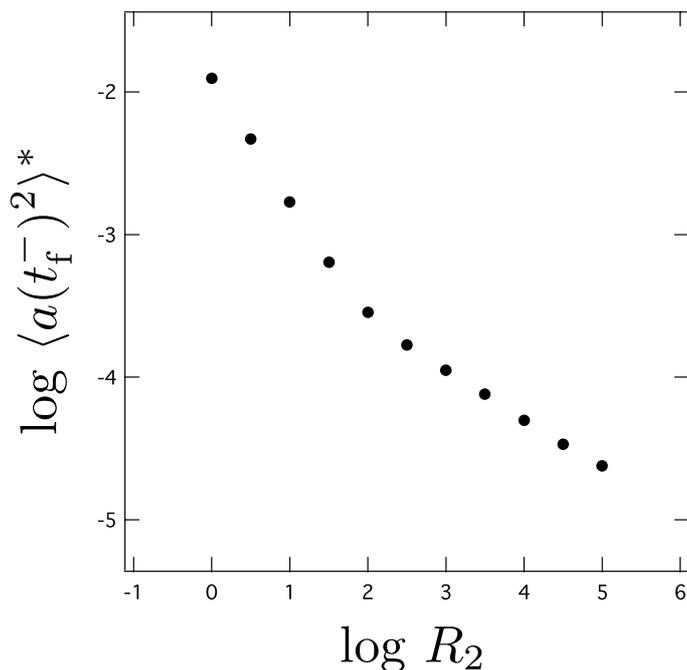


図 4.2: $\log_{10} \langle a(t_f^-)^2 \rangle^*$ と $\log_{10} R_2$ の関係を示す。 $R_1 = 10^{-1}$ とした。

上記のパラメータ値を用いたときの $x(t)$ と $a(t)$ の軌道のサンプルを図 4.3 に示す。ブラウン粒子の位置はデバイスの位置に比べ激しく変化している。これより、デバイスとブラウン粒子の位置の変化の時間スケールと比べると、前者の方が長いとわかる。また、デバイスの軌道が粒子の軌道の振り幅外に出ることはない。したがって、この数値計算上で、この過程が平衡状態より極端に離れてはいないと考えてよからう。その他、デバイスの位置の変化がブラウン粒子の位置ほど熱浴の影響を受けていないこともわかる。これは、デバイスがブラウン粒子より重い ($M \gg m$) ことと、(4.2) 式に熱揺らぎの項を加えていないことによる。時刻 $t = 50$ くらいまでの軌道を見ると、 $x(t)$ が $a(t)$ より大きく離れたとき、プラントにした仕事を小さくするために、ブラウン粒子に近づくようにデバイスが移動している。それ以降は、仕事を小さくすることよりも、時刻 $t = 100$ で原点に近づくことを優先してデバイスが移動しているように見える。時刻 $t = 100$ 直前でデバイスは減速しており、終端時間で原点にほとんど到達していることも、図 4.3 からわかる。

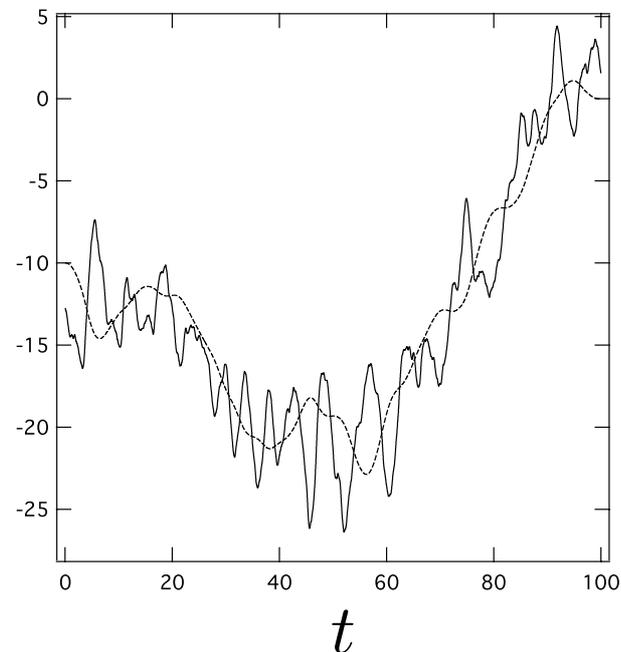


図 4.3: ブラウン粒子とデバイスの位置の軌道のサンプル。実線と点線はそれぞれ $x(t)$ と $a(t)$ を表す。

それぞれの状態変数に対する測定ノイズを大きくすると、 $\langle W^- \rangle^*$ の値が滑らかに増加した (図 4.4a)。プラントにした仕事の平均は $\langle W^- \rangle^*$ にほぼ等しいことを思い出すと、測定ノイズが大きいとき、効率的に外力を変化できなくなり、ブラウン粒子を輸送するために平均的に多くの仕事を必要とする。このモデルにおいて、外力を決定するために、位置の情報が重要であると考えられる。例えば、測定の結果、 $a < x$ とわかったとき、(4.11) 式の値を下げるために、原点に向けて外力を加えればよいと判断することができる。図 4.4a で、速度の測定ノイズに比べて、位置の測定ノイズの大きさの変化に対する $\langle W^- \rangle^*$ の変化がより大きいことから、外力の決定に速度の情報は位置の情報ほど重要でないといえる。

ブラウン粒子の位置と速度の測定ノイズを大きくすると、 I_2 が大きく減少することがわかる (図 4.4b の \circ と Δ)。後者の測定ノイズの変化がより大きく I_2 の減少に影響する。デバイスの位置と速度の測定ノイズを大きくしても I_2 が減少するが、その変化量はわずかである (図 4.4b の \square と $+$)。これはブラウン粒子の速度の揺らぎが大きく、測定前のあいまいさが大きいためである。相互情報量は測定によるあいまいさの減少であるから、測定前の揺らぎが大きい物理量ほど、その測定が I_2 の変化に大きく影響すると考えられる。

この過程は等温サイクルであるので $\Delta F = 0$ である。したがって (3.64) 式は $\langle W^- \rangle^* + k_B T I_2 \geq 0$ 、または $\langle W^- \rangle^* / (k_B T I_2) \geq -1$ と変形できる。ブラウン粒子の速度の測定ノイズが小さくなると、 $\langle W^- \rangle^*$ と $k_B T I_2$ の和と比はともに増加した (図 4.4c と d の Δ)。これは測定のノイズの変化に対して、 $k_B T I_2$ が $\langle W^- \rangle^*$ より大きく変化することに起因している。ブラウン粒子の速度の情報はプラントにした仕事の平均を減少させるのに、あまり寄与しないことを思い出すと、その測定ノイズが小さくなるにつれて、(3.64) 式が等式より離れていくことを理解できる。以下でもここで定義した和と比を使って不等式が等式に近い議論することにする。

デバイスの位置の測定ノイズを変化させても、図 4.4c、d の和と比はほとんど変化しないように見える。これはデバイスの位置の測定の情報は仕事の平均を減少させるために有効であることと、デバイスの位置が大きく揺らいでいない (図 4.4b) ために測定前のあいまいさが少ないことから理解できる。一方、ブラウン粒子の位置の情報は仕事の平均を減少させるために有効であるから、その測定ノイズが小さくなるにつれて、不等式は等式より離れていく (図 4.4c、d)。これはデバイスの位置の場合より測定前のあいまいさが大きいので、 I_2 の変化が大きいからである。デバイスの速度の測定ノイズを変化させても、図 4.4c、d の和と比はデバイスの位置の場合に比べ、ほとんど変化しない。デバイスの速度の情報が仕事の平均を減少させるために有効でないし (図 4.4a)、 I_2 もあまり変化させないからである (図 4.4b)。結局、いずれの測定ノイズを小さくしても、 I_2 の変化が $\langle W^- \rangle^*$ の変化に比べ大きいいため、不等式と等式に近づけることはできないことがわかる。

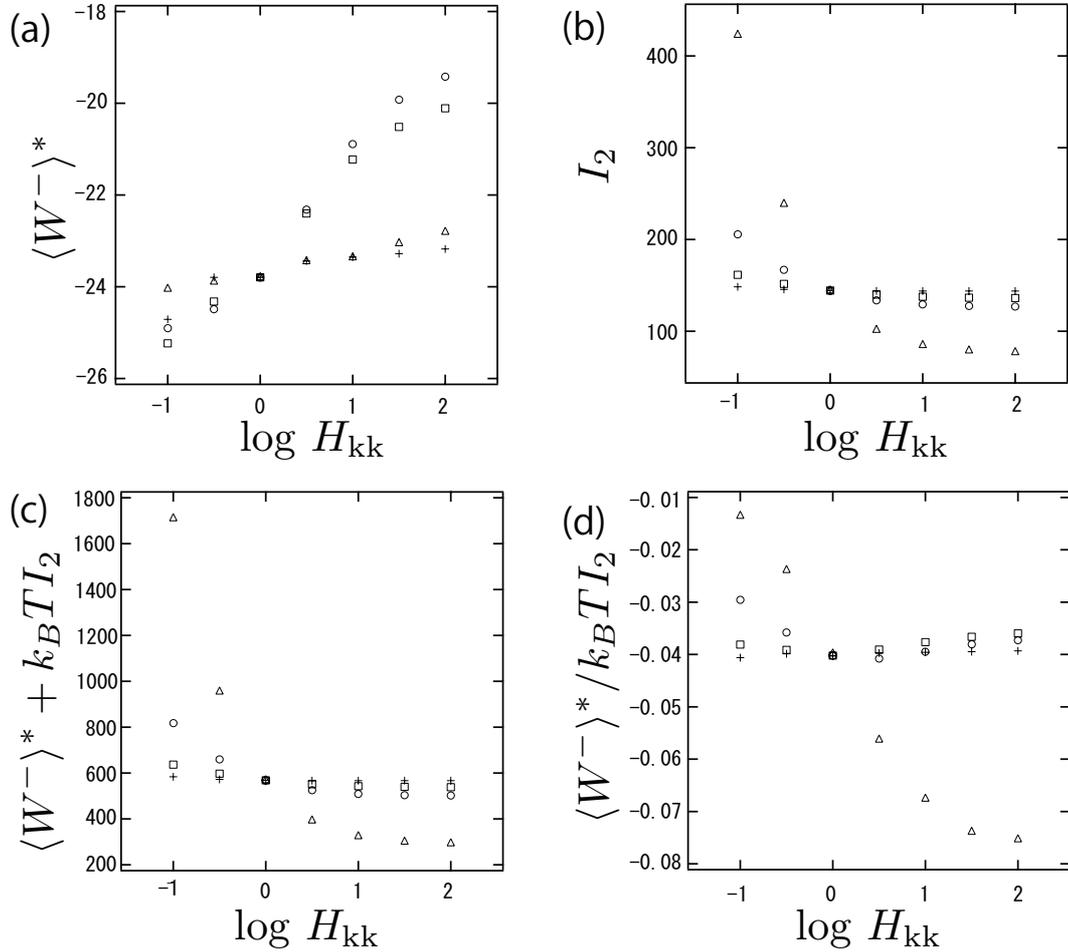


図 4.4: 測定ノイズの大きさを表す H_{kk} をそれぞれ変化させた。ここで k は和をとることはしない。変化させる H_{kk} 以外の H_{jj} は 1 で固定する。(a) で \circ は $\langle W^- \rangle^*$ と $\log_{10} H_{11}$ の関係を示す。 \triangle 、 \square 、 $+$ はそれぞれ $\log_{10} H_{22}$ 、 $\log_{10} H_{33}$ 、 $\log_{10} H_{44}$ と $\langle W^- \rangle^*$ の関係を示す。 $H_{11} = H_{22} = H_{33} = H_{44} = 1$ のとき、四つの点は一致する。このとき、 $\langle W^- \rangle^*$ の標準偏差の値は 2.29 であった。 $\log_{10} H_{11} = 2$ の点で、 $\langle W^- \rangle^*$ の標準偏差の値は 2.28 であった。同様に $\log_{10} H_{22} = 2$ 、 $\log_{10} H_{33} = 2$ と $\log_{10} H_{44} = 2$ の点で、 $\langle W^- \rangle^*$ の標準偏差の値は、それぞれ 2.29、2.23 と 2.22 であった。全ての H_{kk} が 1 のとき、サンプル数を 100000 個にすると、 $\langle W^- \rangle^*$ の値は変わらずに、標準偏差の値が 0.81 になった。(b) で I_2 、(c) で $\langle W^- \rangle^* + k_B T I_2$ 、(d) で $\langle W^- \rangle^* / (k_B T I_2)$ と $\log_{10} H_{kk}$ の関係を示す。

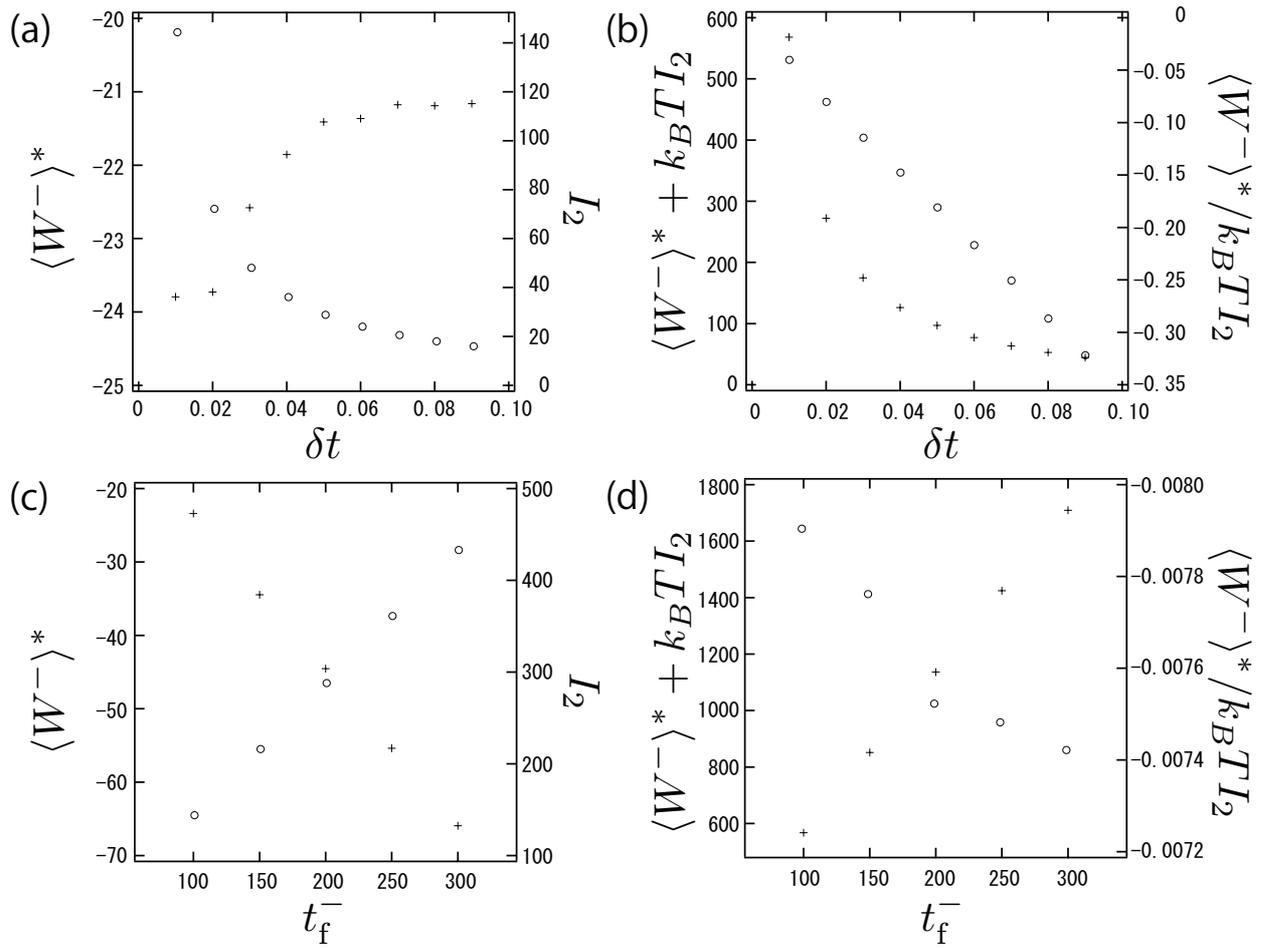


図 4.5: 測定時間間隔 δt を変化させた場合に、(a) で $\langle W^- \rangle^*$ の値 (+) と I_2 の値 (o) がどのように変化するか、(b) で $\langle W^- \rangle^* + k_B T I_2$ の値 (+) と $\langle W^- \rangle^* / (k_B T I_2)$ の値 (o) がどのように変化するかを示す。フィードバック制御した時間 t_f^- を変化させた場合に、(c) で $\langle W^- \rangle^*$ の値 (+) と I_2 の値 (o) がどのように変化するか、(d) で $\langle W^- \rangle^* + k_B T I_2$ の値 (+) と $\langle W^- \rangle^* / (k_B T I_2)$ の値 (o) がどのように変化するかを示す。

測定の時間間隔 δt を長くすると、 $\langle W^- \rangle^*$ が増加する (図 4.5a)。これは測定の回数が減少し、外力を変化させて、仕事の平均を減少させるための効率的なコントロールができなくなるためである。また、測定回数が減り、有用か無用かを問わず獲得する情報量が少なくなるため、 I_2 は減少する。示していないが δt が長くなり過ぎると、時刻 t_f^- でデバイスが原点に到達しなくなる。 δt を短くすると、 I_2 の増加量に比べ $\langle W^- \rangle^*$ の減少量が少ないため、不等式は等式より離れていく (図 4.5b)。これは仕事の平均の減少に有用でない情報量を多く獲得しているためである。

操作時間 t_f の長さの変化による影響を、 t_f^- の長さを変えることにより調べる。なぜなら両者の差は定数かつ微小で、 Δt 程度とできるからである。図 4.5c で調べた t_f^- の範囲内において、 t_f^- が

増加すると、 $\langle W^- \rangle^*$ は線形に減少しているように見える。また、 I_2 は線形に増加しているように見える。制御がほぼ定常になっており、ゲインが時間にほとんど依存していないからだろう。操作時間が長くなると、外力の変化により仕事を減少させる機会が増加するために仕事の平均が減少する。また、測定回数も操作時間に比例して多くなるので、測定により得られる情報量も増加する。仕事の平均や相互情報量が操作時間に比例しているのは、これらの量の相加性によると考えられる。そのため t_f^- の増加とともに図 4.5d の和は増加している。また、図 4.5b に比べればわずかな変化量だが、比は減少している。比の結果だけみれば、 t_f^- を長くすることで、不等式を等式に近づけることができるといえる。

熱浴の温度の影響について調べる。但し、それぞれの測定ノイズが熱浴の温度にあまり依らないとして、依存性を無視する。図 4.6a に示すように、高温になるほど、 $\langle W^- \rangle^*$ が減少し、 I_2 は増加した。高温の熱浴と接すれば、ブラウン粒子は大きくゆらぐので、熱浴からより多くの仕事を取り出すことが可能になる。一方で、ブラウン粒子の大きな揺らぎにより、測定前のあいまいさの減少も増加する。熱浴の温度が高温になると、不等式は等式から離れることもわかった。この場合も I_2 の変化が $\langle W^- \rangle^*$ の変化より大きいので、図 4.6b の和も比も、温度が高くなるにつれて、不等式は等号より離れていく (図 4.6b)。

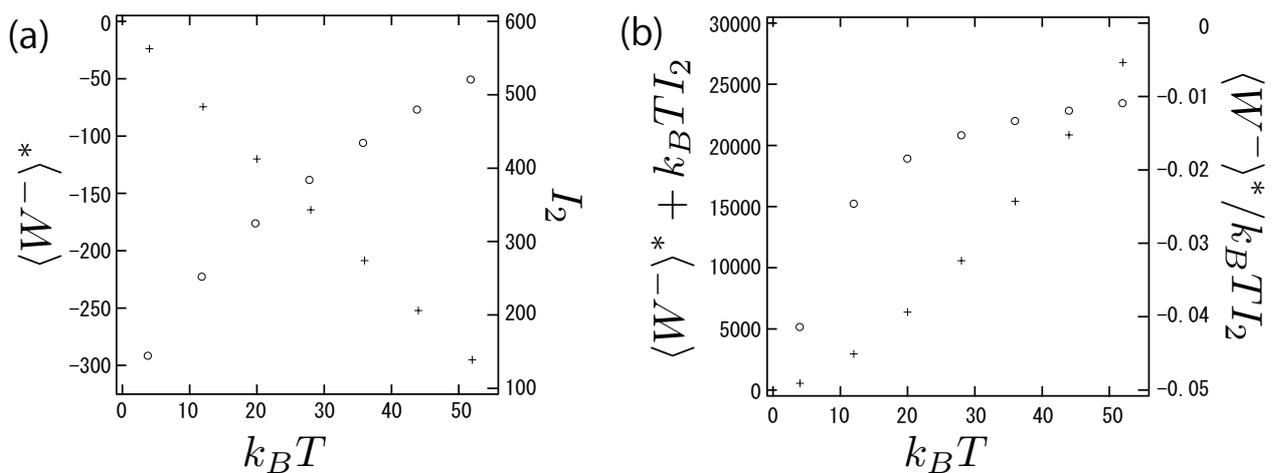


図 4.6: 熱浴の温度 $k_B T$ を変化させた場合に、(a) で $\langle W^- \rangle^*$ の値 (+) と I_2 の値 (o) がどのように変化するのか、(b) で $\langle W^- \rangle^* + k_B T I_2$ の値 (+) と $\langle W^- \rangle^* / (k_B T I_2)$ の値 (o) がどのように変化するのかを示す。

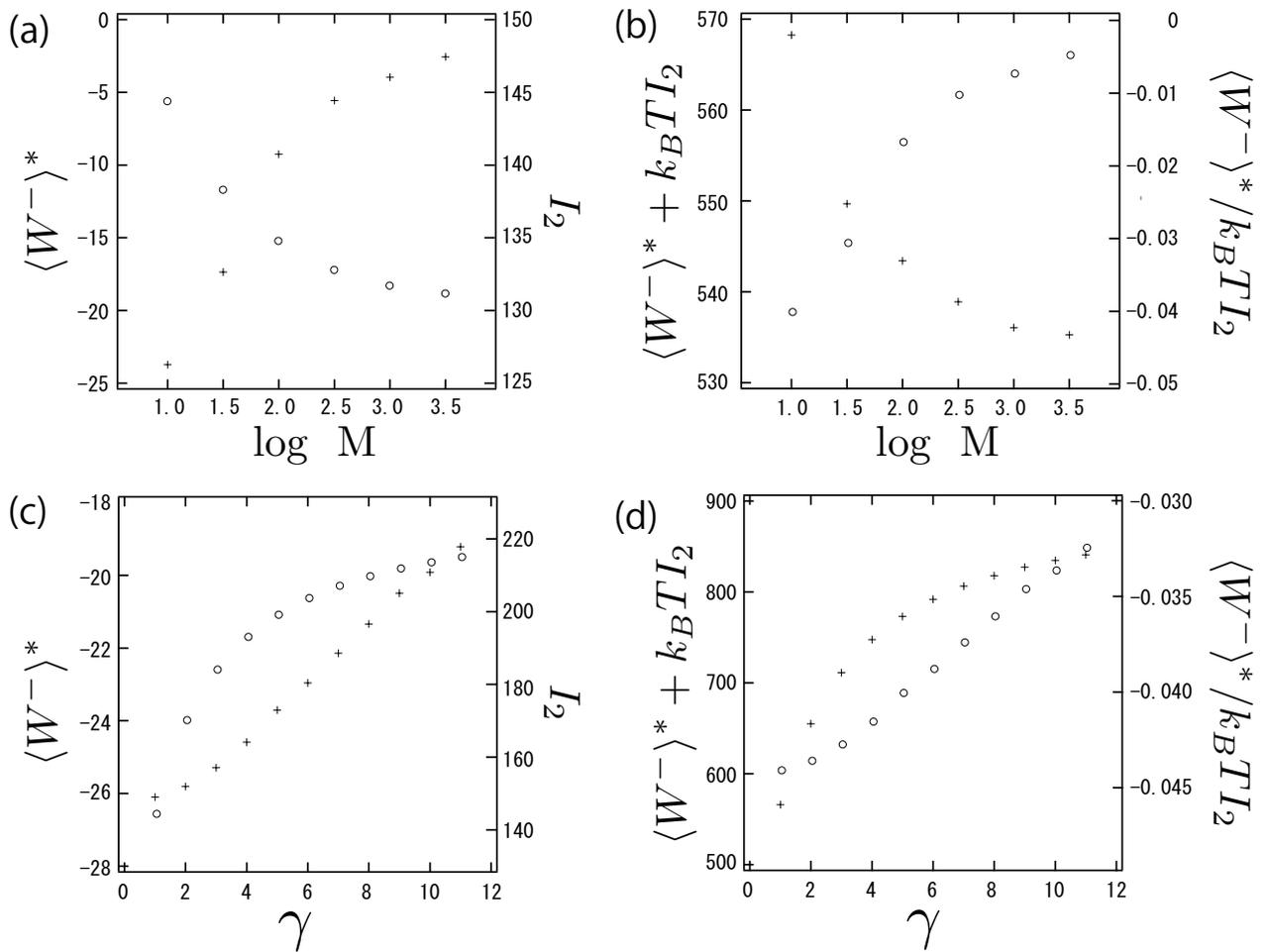


図 4.7: $\log_{10}M$ を変化させた場合に、(a) で $\langle W^- \rangle^*$ の値 (+) と I_2 の値 (○) がどのように変化するか、(b) で $\langle W^- \rangle^* + k_B T I_2$ の値 (+) と $\langle W^- \rangle^* / (k_B T I_2)$ の値 (○) がどのように変化するかを示す。 γ を変化させた場合に、(c) で $\langle W^- \rangle^*$ の値 (+) と I_2 の値 (○) がどのように変化するか、(d) で $\langle W^- \rangle^* + k_B T I_2$ の値 (+) と $\langle W^- \rangle^* / (k_B T I_2)$ の値 (○) がどのように変化するかを示す。 $\gamma = 11$ のとき、 $\langle W^- \rangle^*$ の標準偏差の値は 2.38 であった。

デバイスの質量または摩擦係数が増加すると、効率的な制御ができなくなり、 $\langle W^- \rangle^*$ は増加する (図 4.7a、c)。デバイスの質量を増加させると状態変数の揺らぎが小さくなり、測定前のあいまいさが減少するので、 I_2 は減少する (図 4.7a)。デバイスの質量を減少させたとき、図 4.7b の和は増加する。これは図 4.5、図 4.6、図 4.7d の場合に比べ、 $k_B T I_2$ の変化が大きいためである。また、図 4.7b の比は減少していく。なぜなら、典型値の大きさと変化分の大きさの割合は、 I_2 においてのほうが $\langle W^- \rangle^*$ においてより小さいからである。したがって、デバイスの質量を減少させたとき、比だけみれば不等式が等式に近づいていくように見える。摩擦係数を増加させると熱揺らぎも大きくなるので、測定前のあいまいさが増加し、 I_2 も増加する (図 4.7c)。摩擦係数を減少させると、

図 4.7d の和と比はともに減少し、不等式は等式に近づく。これは揺動散逸定理から同時におこる熱揺らぎの減少により I_2 が減少するにもかかわらず、効率的な制御が可能になることで、仕事の平均も減少させることができるためである。

この章で調べたパラメータによる $\langle W^- \rangle^*$ の変化と、不等式が等式に近づくかどうかを表 4.1 にまとめる。第二列は $\langle W^- \rangle^*$ を減少させるために、各パラメータをどのように変化させればよいかを示していて、↑が増加、↓が減少を表す。第三列と第四列はそれぞれ (3.64) 式が等式に近づくかどうかの指標として計算した和 $\langle W^- \rangle^* + k_B T I_2$ と比 $\langle W^- \rangle^* / (k_B T I_2)$ の増減を示す。→は、顕著な変化がないことを示す。どちらとも減少は等式への接近を意味する。

表 4.1

パラメータ	変化	和	比
H_{11}	↓	↑	↑
H_{22}	↓	↑	↑
H_{33}	↓	→	→
H_{44}	↓	→	→
δt	↓	↑	↑
t_f	↑	↑	↓
T	↑	↑	↑
M	↓	↑	↓
γ	↓	↓	↓

4.4 まとめと考察

プラントにした仕事の平均が減少するように、測定の時間間隔 δt 、または熱浴の温度 T のどちらかを変化させると、同時に (3.64) 式の最小限界がさらに減少するため、不等式は等式よりさらに離れてしまう。これらの場合に、今回考えた線形フィードバック制御によって、獲得した情報量の増加量のすべてを $\langle W^- \rangle^*$ の減少に使うことができないでいることがわかる。デバイスの位置の情報のように、仕事の平均を減少させるのに有用な情報を獲得すれば、不等式が等式から離れないように $\langle W^- \rangle^*$ を減少させることができる。仕事の平均を減少させるための効果は四つ状態変数でそれぞれ異なり、また、測定前のあいまいさの違いにより獲得する情報量の大きさにも違いがある。

過程の時間を長くすると、プラントにした仕事の平均は線形に減少していく。また、 $\langle W^- \rangle^* / k_B T I_2$ の比でみると、不等式は等式に近づいていく。通常の熱力学では、仕事の平均とヘルムホルツ自由エネルギーの変化分との差と、経過時間の中に相補性が指摘されている [49]。プラントの熱力学においても、同様の相補性がみられると面白いだろうが、図 4.5d の比でみた近づきかたがごく僅かで、明確な結論を得るには、さらなる研究が必要である。

今回の調べた中で唯一、摩擦係数の変化は不等式を等式に近づけることと、プラントにした仕事の平均を減少させることを両立しうる。摩擦係数を小さくしていくと、ブラウン粒子と熱浴の相互作用が小さくなり、確率過程が確定的になることに起因していると考えられる。したがって、(3.64) 式の等号が揺らぎを無視したときに成立することと、上記の所見は符合する。

第5章 まとめと展望

本論文では、第2章で §1.2 で紹介したシラードエンジンより現実に近いモデルを使って、プラントの過程に固有の熱力学的関係を数値的に調べた。そのことを踏まえて、第3章で複数回測定による古典系の線形フィードバック系に一般的に成立する等式と不等式を導いた。第4章で、この不等式の両辺の値がどういう条件で近づくかを、現実に近い別のモデルで数値的に検討し、通常の熱力学での対応する問題との違いを議論した。

第2章の内容が、本研究の出発点であった。そこで考えた過程は、荷電ブラウン粒子を外から電場をかけて移動させるサイクルで、 $\Delta F = 0$ である。当時、プラントの熱力学的量の関係は、Sagawa and Ueda (2008)[42] が量子系の一観測の場合に導いた (2.30) 式の不等式が知られていたが、古典系での複数回観測の場合にどのような不等式になるか、わかっていなかった。第2章で考えた問題では、最小にすべき評価関数に、 R_1 と R_2 という、二つの制御パラメータが含まれている。 R_1 を小さくすれば、入力を大きくすることができるので、効率的に制御を行えて、仕事の平均を下げられると考えられる。 R_2 を大きくすれば、終端条件が正確に満たされるようになる。これらの極限で、仕事の平均の最小値が有限に留まるか自明ではないように当初思えた。数値計算の結果は肯定的で、仕事の平均の最小限界を与える熱力学的関係の存在が示唆された。

(2.30) 式の I_{QC} を I_2 に置き換えた式が実際に成立するのではないかという期待から、第3章の研究を始めた。結果として、ジャルジンスキー等式の拡張となる (3.63) 式および、第二法則の拡張となる (3.64) 式を得た。直後に同様の研究 [50 – 53] がなされたが、分離定理を使った研究は本研究以外ない。この結果を得ていれば、測定ノイズがある場合の第2章の結果、つまり仕事の平均の最小値の存在は当然であった。第2章の数値的結果に適用すると、期待されたように (3.64) 式は成り立つものの、数値的には等号成立からは遠い結果となった。これは第4章の研究の方向性を決めることになった。(3.64) 式の等号成立は、過程が確定的な場合である。なお、(1.1) 式の等号成立は、過程が準静的な場合であり、この極限でも確定的な過程となる。(3.63) 式を数値的に確かめることは、統計揺らぎが大きすぎたためできなかった。

過程途中の詳細、例えば過程に要する時間や測定ノイズの大きさが変わっても、ゲインの決め方をひとつ決めれば、その決め方に依らず、(3.64) 式は満たさなければならない。しかし、その右辺は、通常の熱力学における最小仕事の原理 (1.1) 式の右辺とは異なり、過程途中の詳細に依るので、数学的な意味での下限とは呼べない。この関係を、定性的に表す概念図を図 5.1 に示す。なお、(2.31) 式や (4.24) 式にあるように、相互情報量はゲインに依らないので、等号が成立するよ

うに線形フィードバック制御をすることはできない。

制御がある場合も、通常の熱力学と同様に、仕事の平均を減少させようとする、等式に近づくかどうかは興味深い。そこで、第4章では、調和ポテンシャルを使ったブラウン粒子の移動を、仕事の平均を最小にするよう制御するサイクル過程を考え、種々の条件のもとで、不等式が等式に近づくかどうかを検討した。仕事の平均を下げる因子は、同時に相互情報量を上げる傾向があり、不等式は等式に近づかないことが多い。明らかな例外は、摩擦係数で、これを小さくすると、仕事の平均を小さくすると、不等式は等式に近づく。この場合、熱揺らぎも小さくなるので、確定的な過程に近づく、不等式が等式に近づく、と解釈できる。これは(3.64)式の等号成立条件を考えると理解しやすい。しかしながら、測定ノイズの大きさを小さくしたからといって、不等式が等式に近づくとは限らない。物理量によっては、それが正確に測定できてたとしても、仕事の平均を減少させるのに有効な情報を得られるとは限らないのである。初期分布が確定的で、熱揺らぎと測定ノイズがない場合に、(3.64)式の等号が成立するが、(1.10)式からもわかるように、測定ノイズだけをゼロにすると、右辺が負の無限大になることと関連するかもしれない。

通常の熱力学では、過程に要する時間を長くすると、仕事がヘルムホルツ自由エネルギーの変化分与えられる下限に近づいていく。しかし、第4章で考えたモデルでは、過程の時間を長くすると、ほぼそれに比例して、仕事の平均が減少する。過程の時間が長くなれば、仕事を取り出す機会は増加するからである。一方、相互情報量は比例して増大し、その程度が大きいので、不等式が等式に明らかに近づくとは言えない。しかし、§4.4に言及したように、比でみた場合は、近づく可能性があり、これが相補性として確認できれば興味深い。

第4章でみた範囲では、(3.64)式の両辺は隔たりが大きく、その意味で右辺は、 $\langle W \rangle$ のゆるい最小限界を与えるに過ぎない。もっときつい最小限界を与える不等式があれば興味深い。第4章では、二種類以上のパラメータの値を同時に変化させて、不等式が等式に近づくかは検討しなかった。この点も今後の検討課題となろう。また、すでに述べたように、古典系の線形フィードバック制御では、相互情報量を変化させるような制御の設計はできないので、不等式を等式に近づけるように制御することはできなかった。非線形の場合や、量子系の場合も、同様の結果になるであろうか。その場合、本研究で得られたパラメータ依存性がどのように変わるかは、今後の大きな課題だろうと思われる。また、実際のプラントでは、測定から遅れて操作が行われるであろう。このことも考慮して研究する方向性もあると思われる。制御の詳細にまで踏み込んだ、熱力学と制御の関わり合いの研究は、始まったばかりのように思える。

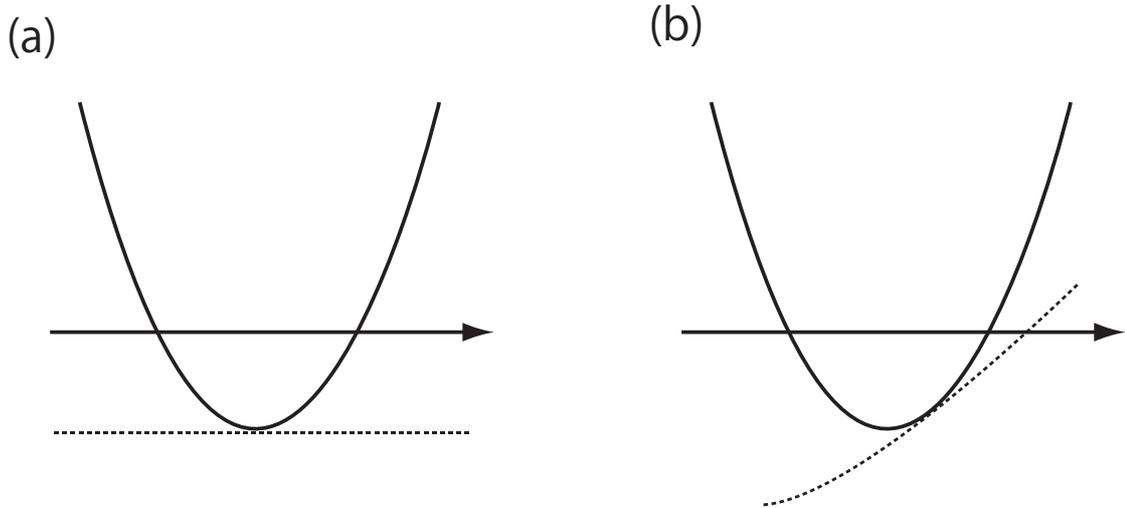


図 5.1: 横軸は過程途中の詳細を表し、実際は多数のパラメータで数量化されるので、多次元である。グラフの概形は正確でない。実線は $\langle W \rangle$ を表す。(a) 点線は ΔF で、図は通常熱力学における (1.1) 式の最小仕事の原理を表す。 ΔF は過程途中の詳細、例えば過程の時間に依らない。 $\langle W \rangle$ を減少させると不等式は等式に近づく。(b) 点線は $\Delta F - k_B T I_2$ で、図は (3.64) 式の制御下における最小仕事の原理の拡張を表す。 $\Delta F - k_B T I_2$ は過程途中の詳細に依るので、 $\langle W \rangle$ を減少させても不等式が等式に近づくとは限らない。ゲインの決め方を変えれば、両曲線の概形が変わるが、 $\langle W \rangle \geq \Delta F - k_B T I_2$ であることは変わらない。第 4 章で採用したゲインの決め方では、 $\langle W \rangle$ を全体としてできるだけ押し下げていることになる。

付録A J の最小値

(2.14) 式の右辺から \dot{X} を除いた部分を $\mathcal{F}(X(t), \tilde{\mathbf{d}}, t)$ と置き、汎関数 $\tilde{J}[X, \tilde{\mathbf{d}}, \mathcal{P}, \Lambda]$ を (2.15) 式と次式の和で定義する。

$$\text{tr}[\Lambda (X_i - X(0))] + \int_0^{t_f} dt \text{tr} \left[\mathcal{P}(t) \left\{ \mathcal{F}(X(t), \tilde{\mathbf{d}}(t), t) - \dot{X}(t) \right\} \right]. \quad (\text{A.1})$$

ここで Λ は 2×2 の対称行列の時間の関数であり、 X_i を (2.12) 式の右辺で定義する。(A.1) 式の一次変分は

$$\delta \tilde{J} = \{X_i - X(0)\}_{ij} \delta \Lambda_{ij} + \int_0^{t_f} dt \left\{ \frac{\delta \tilde{J}}{\delta X_{ij}} \delta X_{ij} + \frac{\delta \tilde{J}}{\delta \mathcal{P}_{ij}} \delta \mathcal{P}_{ij} + \frac{\delta \tilde{J}}{\delta \tilde{d}_i} \delta \tilde{d}_i \right\} \quad (\text{A.2})$$

となる。表記を簡略にするため、 δX 、 $\delta \mathcal{P}$ 、 $\delta \tilde{\mathbf{d}}$ の t を省略し、繰り返される添字に対しては和をとる。(2.14) 式の右辺が $\delta \tilde{J}/\delta \mathcal{P}$ を与える。 $\delta \tilde{J}/\delta X$ と $\delta \tilde{J}/\delta \tilde{\mathbf{d}}$ はそれぞれ

$$\begin{aligned} \frac{\delta \tilde{J}}{\delta X} &= R_1 \tilde{\mathbf{d}} \tilde{\mathbf{d}}^T - R_1^{-1} \mathbf{s} \mathbf{s}^T + \mathcal{P} (\tilde{\mathbf{A}} - \mathbf{b} \tilde{\mathbf{d}}^T) + (\tilde{\mathbf{A}} - \mathbf{b} \tilde{\mathbf{d}}^T)^T \mathcal{P} + \dot{\mathcal{P}} \\ &\quad + (\mathcal{P}(0) - \Lambda) \delta(t) + (\mathcal{P}_f - \mathcal{P}(t_f)) \delta(t - t_f) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

および

$$\frac{\delta \tilde{J}}{\delta \tilde{\mathbf{d}}} = 2 \left(R_1 \tilde{\mathbf{d}}^T - \mathbf{b}^T \mathcal{P} \right) X \quad (\text{A.4})$$

となる。ここで \mathcal{P}_f は (2.18) 式の右辺で与えられる。任意の X に対して (A.4) 式をゼロにすることで

$$\tilde{\mathbf{d}}(t) = P(t) \mathbf{b} / R_1 \quad (\text{A.5})$$

を得る。上式と (2.13) 式の最後の式から、(2.16) が得られる。(A.3) 式右辺の最後の項を除いた部分に (A.5) 式を代入すると、(2.17) 式の右辺が得られ、最後の二項をゼロにすると (2.18) 式が得られる。このように、 $\delta \tilde{J} = 0$ により、(2.12) 式と (2.14) 式および (2.16)–(2.18) 式が得られる。

簡単のため、 $X(t)$ と $X(t')$ をそれぞれ X と X' と書く。 \tilde{J} の二次変分は次のように計算できる。

$$\begin{aligned} -\delta \Lambda_{ij} \delta X_{ij}(0) + \frac{1}{2} \int_0^{t_f} dt \int_0^{t_f} dt' \left\{ 2 \frac{\delta^2 \tilde{J}}{\delta X_{ij} \delta \mathcal{P}'_{kl}} \delta X_{ij} \delta \mathcal{P}'_{kl} + 2 \frac{\delta^2 \tilde{J}}{\delta X_{ij} \delta \tilde{d}'_k} \delta X_{ij} \delta \tilde{d}'_k \right. \\ \left. + \frac{\delta^2 \tilde{J}}{\delta \tilde{d}_i \delta \tilde{d}'_j} \delta \tilde{d}_i \delta \tilde{d}'_j + 2 \frac{\delta^2 \tilde{J}}{\delta \tilde{d}_i \delta \mathcal{P}'_{jk}} \delta \tilde{d}_i \delta \mathcal{P}'_{jk} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

ここで

$$\delta^2 \tilde{J} / (\tilde{\mathbf{d}}(t) \tilde{\mathbf{d}}(t')) = 2R_1 X \delta(t - t') , \quad (\text{A.7})$$

$$\delta^2 \tilde{J} / (\tilde{d}_i(t) \tilde{P}_{jk}(t')) = -2b_j X_{ik} \delta(t - t') \quad (\text{A.8})$$

と

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2 \tilde{J}}{\delta X_{ij}(t) \delta P_{kl}(t')} &= 2 \left(\tilde{A} - \mathbf{b} \tilde{\mathbf{d}}^T \right)_{lj} \delta_{ki} \delta(t - t') \\ &\quad - \delta_{ik} \delta_{jl} \left\{ \frac{\partial}{\partial t'} \delta(t' - t) + \delta(t - t_f) \delta(t' - t_f) - \delta(t) \delta(t') \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

および

$$\frac{\delta^2 \tilde{J}}{\delta X_{ij}(t) \delta \tilde{d}_k(t')} = \left(R_1 \tilde{\mathbf{d}}^T - \mathbf{b}^T P \right)_i \delta_{jk} \delta(t - t') \quad (\text{A.10})$$

が得られる。(2.14) 式より

$$\text{tr} \left[\frac{\partial \delta X}{\partial t} \delta P \right] = \text{tr} \left[2 \left(\tilde{A} - \mathbf{b} \tilde{\mathbf{d}}^T \right) \delta X \delta P - 2\mathbf{b} \delta \tilde{\mathbf{d}}^T X \delta P \right] \quad (\text{A.11})$$

を得ることから、(A.7)–(A.10) 式を (A.6) 式に代入する。 $\delta \tilde{J} = 0$ のとき、次式を得る。

$$\delta^2 \tilde{J} = R_1 \int_0^{t_f} dt \text{tr} \left[\delta \tilde{\mathbf{d}}(t)^T X(t) \delta \tilde{\mathbf{d}}(t) \right] . \quad (\text{A.12})$$

$X(t)$ は半正定値行列であり、(2.12) 式と (2.14) 式より、少なくとも初期時刻からしばらくの間で、正定値行列である。したがって、 $\delta \tilde{J} = 0$ のとき、 $\delta^2 \tilde{J} > 0$ であることがわかる。 $R_1 > 0$ としたので、 $\delta \tilde{J} = 0$ を満たす $\tilde{\mathbf{d}}$ は \tilde{J} を、さらに J も最小にする。

付録B カルマンフィルタ

連続時間で記述される場合のカルマンフィルタの一般論を説明する。まず、入力のない方程式の場合を考えて準備し、その後で入力のある場合に拡張する。

B.1 入力のない場合

系の状態 $x(t)$ の時間発展が次式で書けるとする。

$$\dot{x}(t) = A(t)x(t) + \xi(t). \quad (\text{B.1})$$

ここで $A(t)$ を時間の関数とし、 $\xi(t)$ は白色ガウス過程とする。時刻 $t = 0$ で $\langle x(0) \rangle$ の値は与えられているとする。系の状態の測定値は

$$y = C(t)x(t) + \eta(t) \quad (\text{B.2})$$

で与えられるとする。 $C(t)$ を時間の関数とし、 $\eta(t)$ は白色ガウス過程で、 $\xi(t)$ と独立であるとする。 $\xi(t)$ と $\eta(t)$ はそれぞれ次式を満たす。

$$\langle \xi(t)\xi(t+\tau) \rangle = \Xi(t)\delta(\tau), \quad \langle \eta(t)\eta(t+\tau) \rangle = H(t)\delta(\tau). \quad (\text{B.3})$$

ここで $\Xi(t)$ と $H(t)$ は共に時間の関数とする。

$0 \leq \tau \leq t$ の測定値 $y(\tau)$ から $x(t)$ の推定値 $\hat{x}(t)$ を求めることを考えよう。 $y_{[0,t]}$ は y の時刻ゼロから t までの軌道を表し、その確率密度を $P(y_{[0,t]})$ と書く。推定誤差を $\bar{x}(t) \equiv x(t) - \hat{x}(t)$ と定義する。カルマンフィルタでは、次式の汎関数積分で与えられる $\bar{x}(t)$ の分散が最小になるように $\hat{x}(t)$ を決める。

$$\langle \{x(t) - \hat{x}(t)\}^2 \rangle \equiv \int \mathcal{D}x_{[0,t]} \int \mathcal{D}y_{[0,t]} P(x_{[0,t]}, y_{[0,t]}) \{x(t) - \hat{x}(t)\}^2 \quad (\text{B.4})$$

$$= \int \mathcal{D}y_{[0,t]} \langle \{x(t) - \hat{x}(t)\}^2 \rangle_{y_{[0,t]}} P(y_{[0,t]}). \quad (\text{B.5})$$

ここで $P(x_{[0,t]}, y_{[0,t]})$ は $x_{[0,t]}$ と $y_{[0,t]}$ の結合確率密度を表す。上式で用いた $\langle \cdots \rangle_{y_{[0,t]}}$ は $y_{[0,t]}$ が与えられたときの統計平均であり

$$\langle \cdots \rangle_{y_{[0,t]}} \equiv \int \mathcal{D}x_{[0,t]} P(x, t | y_{[0,t]}) \quad (\text{B.6})$$

と定義する。ここで $P(x, t | \mathbf{y}_{[0, t]})$ は $\mathbf{y}_{[0, t]}$ が与えられたときの $x(t)$ の確率密度である。(B.5) 式を最小にする $\hat{x}(t)$ は $\langle \{x(t) - \hat{x}(t)\}^2 \rangle_{\mathbf{y}_{[0, t]}}$ も最小にするので、

$$\hat{x}(t) = \langle x(t) \rangle_{\mathbf{y}_{[0, t]}} \quad (\text{B.7})$$

となり、この関係を不偏性と呼ぶ。 $\hat{x}(t)$ を

$$\dot{\hat{x}} = F(t)\hat{x}(t) + G(t)\mathbf{y}(t) \quad (\text{B.8})$$

の形で求めることにする [54]。(B.1) 式と (B.8) 式の差から

$$\dot{\hat{x}}(t) = \{A(t) - F(t) - G(t)C(t)\}x(t) + F(t)\bar{x} + \xi(t) - G(t)\eta(t) \quad (\text{B.9})$$

を得る。不偏性より

$$F(t) = A(t) - G(t)C(t) \quad (\text{B.10})$$

となる。このとき推定誤差の共分散行列 $\bar{X}(t) \equiv \langle \bar{x}(t)\bar{x}(t)^T \rangle$ の時間発展は

$$\begin{aligned} \dot{\bar{X}} &= \{A(t) - G(t)C(t)\}\bar{X} + \bar{X}\{A(t) - G(t)C(t)\}^T + \Xi(t) \\ &\quad + G(t)H(t)G(t)^T \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

$$\equiv \tilde{\mathcal{F}}(G(t), \bar{X}, t) \quad (\text{B.12})$$

となる。上式の拘束条件の下で $\text{tr}\bar{X}(t)$ を最小にすればよい。ラグランジュ係数 $\lambda(t)$ を導入して、次の汎関数を考える。

$$\mathcal{J}[G, \bar{X}, \lambda] = \text{tr}\bar{X}(t) + \int_0^t d\tau \text{tr}[(\dot{\bar{X}} - \tilde{\mathcal{F}})\lambda] \quad (\text{B.13})$$

上式を G で変分すると、 $\tau \in [0, t]$ に対して、

$$0 = -\lambda\bar{X}C^T - \lambda^T\bar{X}C + \lambda GH + \lambda^T GH \quad (\text{B.14})$$

を得る。 H^{-1} が存在するなら

$$G(\tau) = \bar{X}(\tau)C(\tau)^T H^{-1}(\tau) \quad (\text{B.15})$$

と終端時刻 t に依らず決まる。 $\bar{X}(0) = \langle X(0) \rangle$ は既知である。(B.11) 式より、

$$\dot{\bar{X}}(t) = A(t)\bar{X}(t) + \bar{X}(t)A(t)^T - \bar{X}(t)C(t)^T H(t)^{-1}C(t)\bar{X}(t) + \Xi(t) \quad (\text{B.16})$$

を解いて \bar{X} を求め、(B.15) 式に代入する。得られた G より推定値 $\hat{x}(t)$ の時間発展が次のように表される。

$$\dot{\hat{x}}(t) = \{A(t) - G(t)C(t)\}\hat{x}(t) + G(t)\mathbf{y}(t). \quad (\text{B.17})$$

上式より測定値 $\mathbf{y}_{[0, t]}$ が得られれば、推定値 $\hat{x}(t)$ を計算できることが分かる。このことをカルマンフィルタと呼ぶ。

B.2 入力のある場合

(2.3) 式と (4.6) 式のように状態変数 $x(t)$ の時間発展に入力 $u(t)$ が加わる場合を考えよう。 $x(t)$ の時間発展が

$$\dot{x}(t) = A(t)x(t) + B(t)u(t) + \xi(t) \quad (\text{B.18})$$

で記述できるとする。§3.3 で議論したように状態変数を

$$x(t) = x_1(t) + x_2(t) \quad (\text{B.19})$$

と分離する。それぞれの変数の時間発展は

$$\dot{x}_1 = A(t)x_1 + B(t)u(t) \quad (\text{B.20})$$

$$\dot{x}_2 = A(t)x_2 + \xi(t) \quad (\text{B.21})$$

とする。(B.21) 式は (B.1) 式と同じ形になるので、入力がない場合の結果を用いることができる。 $y(t)$ から次の部分を取り出して、入力がない場合の結果の $y(t)$ に対応させる。

$$y_2(t) = C(t)x_2(t) + \eta(t) = y(t) - C(t)x_1. \quad (\text{B.22})$$

$x_2(t)$ の推定値を $\hat{x}_2(t)$ とし、推定誤差を $\bar{x}_2(t) \equiv x_2(t) - \hat{x}_2(t)$ と定義する。(B.16) 式より、 $\bar{x}_2(t)$ の共分散行列 $\bar{X}_2(t)$ の時間発展は

$$\dot{\bar{X}}_2(t) = A(t)\bar{X}_2(t) + \bar{X}_2(t)A(t)^T - \bar{X}_2(t)C(t)^T H(t)^{-1} C(t)\bar{X}_2(t) + \Xi(t) \quad (\text{B.23})$$

となる。 $\bar{X}_2(0) = \langle X(0) \rangle - X_1(0)$ は既知である。(B.15) 式以下と同様、上式で求めた \bar{X}_2 を

$$G(t) = \bar{X}_2(t)C^T H^{-1} \quad (\text{B.24})$$

に代入し

$$\dot{\hat{x}}_2(t) = \{A(t) - G(t)C(t)\}\hat{x}_2(t) + G(t)y_2(t) \quad (\text{B.25})$$

を得る。したがって、 $y_{2[0,t]}$ が得られれば、推定値 $\hat{x}_2(t)$ を計算できる。

時刻 t では、入力 $u_{[0,t]}$ が既知である。このとき (B.20) 式より、 $x_1(t)$ は確定的である。 $x(t)$ の推定値は $\hat{x}(t) = x_1(t) + \hat{x}_2(t)$ となる。 $x(t)$ の推定誤差を $\bar{x}(t) = x(t) - \hat{x}(t)$ とする。 $\bar{x}(t)$ の共分散行列 \bar{X} は

$$\bar{X}(t) = \langle \{(x(t) - \hat{x}(t))\{(x(t) - \hat{x}(t))\}^T \rangle = \langle \{(x_2(t) - \hat{x}_2(t))\{(x_2(t) - \hat{x}_2(t))\}^T \rangle = \bar{X}_2(t) \quad (\text{B.26})$$

となる。したがって、(B.23) 式と (B.24) 式の $\bar{X}_2(t)$ は $\bar{X}(t)$ で置き換えられる。 $\hat{x}(t)$ の時間発展は

$$\dot{\hat{x}}(t) = A(t)x(t) + B(t)u(t) + G(t)\{y_2(t) - C\hat{x}_2(t)\} \quad (\text{B.27})$$

となる。(B.22) 式より、上式の右辺の最後の項は $G(t)\{y(t) - C\hat{x}(t)\}$ で置き換えられるので、(B.27) 式は次のように書き直せる。

$$\dot{\hat{x}}(t) = A(t)x(t) + B(t)u(t) + G(t)\{y(t) - C\hat{x}(t)\} \quad (\text{B.28})$$

入力がある場合でも、測定値 $y_{[0,t]}$ が得られれば、推定値 $\hat{x}(t)$ を計算できることが分かる。

謝辞

本論文を進めるにあたり、お忙しい中時間を割いて御指導くださった慶應義塾大学の藤谷洋平先生に感謝致します。学位論文をまとめるにあたり、お忙しい中、ご指導とご意見を頂きました慶應義塾大学の高野宏先生、内山孝憲先生、山本直樹先生および東京農工大学の村山能宏先生に深く感謝しております。京都大学の沙川貴大博士には制御を伴った熱力学について貴重な議論をして頂きました。慶應義塾大学の足立修一先生と大森浩充先生に制御理論についての貴重なアドバイスを頂きました。理論研究室の方々には、コロキウムを通して研究についてコメントを頂き、また、様々な分野の研究発表を聞くことにより、幅広い物理学の知見を広めることができました。研究活動を進めるにあたり慶應義塾先端科学技術研究センターに経済的に支援して頂きました。最後に私を暖かく見守ってくれた両親に感謝致します。

参考文献

- [1] 田崎晴明: 「熱力学」 (培風館、2000).
- [2] A. F. Rex: Maxwell's deamon 2nd ed. (IOP Publishing, Bristol, 2003), Chap.1.
- [3] L. Szilard: Z. Phys. **53** (1929) 840 [in German].
- [4] T. Sagawa and M. Ueda: Phys. Rev. Lett. **102** (2009) 090602.
- [5] L. Brillouin: J. Appl. Phys. **22** (1951) 334.
- [6] L. Brillouin: Science and Information Theory (Academic Press, New York, 1956).
- [7] R. Landauer: IBM J. **5** (1961) 183.
- [8] C. H. Bennet: IBM J. **17** (1973) 525.
- [9] R. P. Feynman: Lectures on Physics Vol. II (Addison-Wesley, Reading, 1963).
- [10] T. Hondou and F. Takagi: J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 2974.
- [11] T. Hondou and K. Sekimoto: Phys. Rev. E **62** (2000) 602.
- [12] A. Rapoport and M. Knoller: Behav. Sci. **9** (1964) 301.
- [13] N. Fuchikami, H. Iwata and S. Ishioka: J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999) 3751.
- [14] J. M. Horowitz and S. Vaikuntanathan: Phys. Rev. E **82** (2010) 061120.
- [15] T. Sagawa: Prog. Theor. Phys. **127** (2012) 1.
- [16] C. E. Shannon and W. Weaver: The Mathematical Theory of Communication (Univ. of Illinois Press, Urbana, 1949).
- [17] 有本卓: 「カルマンフィルタ」 (産業図書、1977).
- [18] C. Jarzynski: Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 2690.
- [19] C. Jarzynski: Phys. Rev. E **56** (1997) 5018.

- [20] C. Bustamante, J. Liphardt, and F. Ritort: *Phys. Today* **58** (2005) 43.
- [21] G. M. Wang, E. M. Sevick, E. Mattag, D. J. Searles, and D. J. Evans: *Phys. Rev. Lett.* **89** (2002) 050601.
- [22] D. M. Carberry, J. C. Reid, G. M. Wang, E. M. Sevick, D. J. Searles, and D. J. Evans: *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004) 140601.
- [23] E. H. Trepagnier, C. Jarzynski, F. Ritort, G. E. Crooks, C. J. Bustamante, and J. Liphardt: *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **101** (2004) 15038.
- [24] S. Schuler, T. Speck, C. Tietz, J. Wrachtrup, and U. Seifert: *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 180602.
- [25] V. Blickle, T. Speck, L. Helden, U. Seifert, and C. Bechinger: *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006) 070603.
- [26] N. G. van Kampen: *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (Elsevier, Amsterdam, 2007), Sect. V-6.
- [27] G. E. Crooks: *J. Stat. Phys.* **90** (1998) 1481.
- [28] U. Seifert: *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 040602.
- [29] H. Suzuki and Y. Fujitani: *J. Phys. Soc. Jpn.* **79** (2009) 074007.
- [30] R. Kubo, M. Toda and N. Hashitsume: *Statistical Physics II* 2nd ed. (Springer, Berlin, 1991), Chap.2.
- [31] C. Gardiner: *Stochastic Methods* (Springer, Berlin, 2009).
- [32] K. Sekimoto: *J. Phys. Soc. Jpn.* **66** (1997) 1234.
- [33] K. Sekimoto and S. Sasa: *J. Phys. Soc. Jpn.* **66** (1997) 3326.
- [34] K. Sekimoto: *Stochastic Energetics* (Springer, Berlin, 2010).
- [35] 榎木義一、添田喬、中溝高好：「確率システム制御の基礎」(日新出版社、1987).
- [36] M. Schulz: *Control Theory in Physics and Other Fields of Science* (Springer, Berlin, 2006), Chap. 2.
- [37] J. S. Meditch: *Stochastic Optimal Linear Estimation and Control* (McGraw-Hill, New York, 1969).
- [38] R. E. Kalman and R. S. Bucy: *Trans. ASME* **83D** (1961) 95.

- [39] 大住晃: 「確率システム入門」 (朝倉書店、2002), 6.8 節.
- [40] M. Matsumoto and T. Nishimura: ACM Trans. Model. Comput. Simul. **8** (1997) 3.
- [41] G. E. P. Box and M. E. Muller: Annals Math. Stat. **29** (1958) 610.
- [42] T. Sagawa and M. Ueda: Phys. Rev. Lett. **100** (2008) 080403.
- [43] Y. Fujitani and H. Suzuki: J. Phys. Soc. Jpn **79** (2010) 104003.
- [44] T. Sagawa and M. Ueda: Phys. Rev. Lett. **104** (2010) 090602.
- [45] S. K. Mitter: IEEE Control Syst. Mag. **16** (1996) 67.
- [46] W. M. Wonham: SIAM J. Control **6** (1968) 312.
- [47] S. Omatu, Y. Tomita, and T. Soeda: IEEE Trans. Inf. Theory **22** (1976) 593.
- [48] H. Suzuki and Y. Fujitani: J. Phys. Soc. Jpn. **81** (2012) 084003.
- [49] T. Hatano and S. Sasa: Phys. Rev. Lett. **86** (2001) 3463.
- [50] D. Abreu and U. Seifert: Europhys. Lett. **94** (2011) 10001.
- [51] T. Sagawa and M. Ueda: Phys. Rev. E **85** (2012) 021104.
- [52] J. M. Horowitz and J. M. R. Parrondo: Europhys. Lett. **95** (2011) 10005.
- [53] J. M. Horowitz and J. M. R. Parrondo: New J. Phys. **13** (2011) 123019.
- [54] V. Krishnan: Nonlinear Filtering and Smoothing (Wiley, New York, 1984), Sect. 9.4.