

A01-001 非平衡ゆらぎの熱力学体系

京都大学大学院理学研究科 佐々真一

茨城大学理学部 中川尚子

計画研究調書に以下のように記載した。「熱力学的性質が温度と密度だけで特徴づけられる系（単純流体）が示す流れは、もともと身近にある非平衡系であり、非平衡統計力学の進展に伴って、その微視的記述による理解が蓄積されてきた。しかしながら、最近20年の発展は、単純流体の非平衡ゆらぎの理解に反映されていない。これに本質的な困難があるわけではなく、技術的な煩雑さのために整理が不十分なだけだと考えている。本研究課題を遂行する上で、その煩雑さを制御することは必須であり、まずはそれを簡潔に整理する必要がある。その過程で、局所平衡にもとづく標準的な記述を現代的視点から見直すこともあろう。「エントロピー生成を用いた非平衡分布関数の表現」や「拡張された相加性」などこの10年で得られた成果を踏まえて、単純流体に対する非平衡ゆらぎの法則をまとめる。」

今年度、この問題について、大きく前進したのが第一の成果である。具体的には、非平衡ゆらぎの議論に入る前に、決定論的流体方程式を分子レベルのハミルトン方程式の記述にもとづいて導出することを目標に掲げた。この目標を達成するだけでも全く簡単ではない。1世紀の長期に渡って議論されてきた問題だからである。本報告書では、この問題に焦点をあてて説明する。

対象とする系が希薄気体なら、ハミルトン系からボルツマン方程式を導出することができる。そして、ボルツマン方程式から流体方程式を導出する方法は、チャップマン=エンスコッグの方法として知られている。これは、理論物理の意味で系統的な（特異）摂動展開法であり、流体方程式の導出について不明瞭な点はない[1]。しかしながら、このアプローチは、対象が希薄気体に限定されている。それ以外の系に対して適用しようとする、正当化できない近似を含むことになる。

希薄気体に限定せずに流体方程式を導出する先駆的な試みとして、Irvin-Kirkwoodの結果をあげることができる[2]。そこでは、粒子が全ての時刻で局所平衡分布に従うと仮定して、流体方程式を導出した。この仮定のもとでは、オイラー方程式になることが分かっている。これは一般的な結果であるが、実際の流体は散逸的現象を示すので、現実とは合致していない。これは仮定が誤っており、局所平衡分布が成り立っていないことを意味している。

そこで、時間に依存する非平衡分布を仮説として導入することで流体方程式を議論するアプローチがある[3]。この場合、仮説的な非平衡分布の正当化は簡単ではない。外部に環境（浴）を想定しており、原論文では必ずしも明晰な議論ではないが、近年の研究により、この仮説的な非平衡分布は線形応答領域でしか正しくないことが知られている[4]。

以上のように、これまでの理論では、乱流を含む非線形現象を記述する流体方程式を導くことはできない。しかしながら、ハミルトン粒子系における流体記述の物理的描像は簡単であり、古くから知られている。つまり、質量、運動量、エネルギーの5つの保存量に対する密度場の空間変調が粒子スケールに比べてずっと長いとき、粒子の分布は局所平衡分布で特徴づけられるであろう。もし、この局所平衡分布が時間とともに伝搬するなら、Liouville方

程式の解は、局所平衡分布に近いと考えられる。例えば、乱流は強く非線形な動力学で記述されるが、その状態における粒子分布は依然として局所平衡に近い。したがって、スケール分離をあらわす小さい摂動展開パラメータを導入することで摂動論を構成できる可能性がある。

実際、局所平衡伝搬を仮定して、Liouville 方程式から非圧縮 Navier-Stokes 方程式を導く摂動論が構築された[5]。この理論は、初期条件を指定することなく Liouville 方程式の解を構成しようとするので、局所平衡伝搬を含むいくつかの仮定を正当化するのは困難である。また、計算は非常に煩雑である。明晰な結果を得るためには、特別なクラスの初期条件に焦点をあてるのが必要である。

そのような知恵が、最近20年の非平衡統計力学の成果でもある。例えば、熱力学第2法則のハミルトン粒子系からの導出は未だに難しい問題があるが、初期分布としてカノニカル分布をとってよいなら、Jarzynski 等式を経由して極めて簡単に導出できる[6]。全く同様に、初期条件を局所ギブス分布にとることにより、流体方程式を極めて簡単に導出することができる。そして、その鍵となるのが「ゆらぎの定理」と類似の形をしている恒等式である。具体的には、その恒等式を利用することで、密度場に対する厳密な時間発展方程式を導出する。その後で、摂動パラメータを導入し、摂動展開を行う。簡単でストレートな計算で、Navier-Stokes 方程式を導出することができる。

この結果は、論文としてまとめられ、Phys. Rev. Lett. から出版されることが決まっている[7]。

さらに今年度は、計画研究調書に「測定できないほどまれな事象に左右される現象を実験で制御測定する方法を提案できれば、まれな事象についての法則の意義を明らかにできる。」と書いたことに関連して、新しいレアイベントサンプリングの方法を提案した。基本的なアイデアは、レアイベントが典型的イベントとなるように系を変更していくことである。これはまだ実験で実装できるようにはなっていないが、数値実験のレベルでは実際にその変更方法を実装することに成功した。この結果は、論文としてまとめられ、Phys. Rev. Lett. から出版されることが決まっている [8]。

最後に、計画研究調書に書いた「形のある粒子の非平衡ダイナミクス」に関連して、単純なタンパク模型について揺動散逸関係の破れなどを解析した[9]。

参考文献:

- (1) H. Grad, Phys. Fluids **6**, 147 (1963).
- (2) J. H. Irving and J. G. Kirkwood, J. Chem. Phys. **18**, 817 (1950).
- (3) D. N. Zubarev, *Nonequilibrium Statistical Thermodynamics* (Consultants Bureau, New York, 1974).
- (4) C. Maes and K. Netocny, J. Math. Phys. **51**, 015219 (2010).
- (5) R. Esposito and R. Marra, J. Stat. Phys. **74**, 981 (1994).
- (6) C. Jarzynski, Phys. Rev. Lett. **78**, 2690 (1997).
- (7) S. Sasa to appear in Phys. Rev. Lett. (2014).
- (8) T. Nemoto and S. Sasa, to appear in Phys. Rev. Lett. (2014).
- (9) J. G. Hagmann, N. Nakagawa, M. Peyrard, Phys. Rev. E **89**, 012705 (2014).