

## A01-001 非平衡ゆらぎの熱力学的体系

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

**はじめに** 本新学術領域が始まった2013年夏以降の4年半の間に、この計画研究班でなされた研究のうち、23報の論文が出版され、投稿中論文が4報、投稿準備中の論文が10報程度ある。特に、23報の出版論文のうちの6報は、「その成果が一般的に興味を持たれること」が採択の重要因子である雑誌 Phys. Rev. Lett. に出版された。出版論文数は多くはないが、得られた結果は当初の想定以上に豊かなものになった。

本計画研究の大きな特徴は、「平衡状態の熱力学は矛盾なく非平衡状態に拡張できるか？」という基本的な問を一貫して考えている点にある。ただし、その問だけを前面に出すのではなく、非平衡ゆらぎの様々な問題を「熱力学的体系」との関係を意識しながら研究した。以下では、研究課題の細目ごとに、課題の成果を基本テーマとの関係も踏まえて説明する。

**熱力学関係式の拡張** 本計画研究では、熱伝導定常状態を決定する変分原理を提案した (1)。この変分原理は、平衡熱力学の自由エネルギー最小原理の拡張に相当する。これは単なる形式的拡張ではない。熱伝導下での気液転移に焦点をあて、まず、この現象が既存の理論では説明できないことを明らかにした。その上で、「熱伝導状態における大域温度」というこれまでにない新しい量を定義することで、熱力学の拡張を行った。この独創的な量を導入した結果、驚くほど綺麗な形式が導かれ、定量的な実験への非自明な予言につながった。さらには、この変分原理の背後にある物理的機構について、様々な階層から議論することが可能になった。例えば、線形応答理論など非平衡ゆらぎの性質との関係がどうなっているのか。あるいは、流体方程式の記述との関係はどうなっているのか。これらの問に答えることで、今後大きく発展する可能性があると考えている。

この重要な結果は、単なる思い付きで得られたものでない。熱力学の拡張と局所平衡記述の関係を詳細まで徹底的に検討して得られた知見があつてのことである。実際、研究期間の前半はそのような地道な研究を継続した (2)。

**非平衡ゆらぎのミクロとマクロ** 熱力学はマクロな現象論であり、その現象論にもとづいて、ミクロな記述とマクロな記述の関係が模索されてきた。平衡熱力学に対して統計力学が建設されたように、非平衡ゆらぎに関わるマクロな現象論とミクロな記述を結ぶ新しい枠組みを建設するのが目標の一つになる。

本計画研究では、マクロな現象論として流体方程式を取り上げ、非平衡ゆらぎを明示的に扱うことにより、ミクロな記述から流体方程式を導出する方法を提案した (3)。この結果は、非平衡ゆらぎと巨視的現象論をつなぐ新しい見方を与える。流体系に限定しても、ミクロとマクロをつなぐ新しい方法論を提供しており、様々な現象を議論する足掛かりになる。提案した方法論は流体系に固有なものではない。例えば、振動子集団の秩序変数の巨視的動力学を導く問題は、蔵本模型のようなもっとも簡単な大域結合系ですら物理の枠組みから簡単に

計算できていなかった。このような系に対しても、非平衡ゆらぎの理論(この場合には、Hatano-Sasa 等式)によってマクロな集団動力学が正確に簡単に導出できるようになった(4)。この結果の真の意義はまだ明確にはなっていない。Hatano-Sasa 等式は、熱力学第2法則の非平衡定常状態間遷移への拡張として提案されたものだが、その等式が巨視的ダイナミクスへの導出に有用な役割を果たす理由は不明である。これは今後の研究を待つしかない。

**時間平均ゆらぎの異常性** 時間平均ゆらぎは平衡条件下であっても異常になる場合がある。例えば、粘性流体中をゆっくり運動する球に加わる抵抗を考える。時間平均応力が球面上で中心極限定理に従うとすると、抵抗係数は半径の2乗に比例する。実際は、抵抗係数は半径に比例する(ストークス則)ので、平衡条件下の時間平均応力ゆらぎが中心極限定理を破ること意味する。その破り方は、「ゆらぎの超均一性」に対応する。この性質を理解するためには、流体方程式を経由せずにストークス則を導くこと、すなわち、時間平均応力ゆらぎの異常性をミクロから導出することが必要である。

本計画研究では、時間平均応力の境界でのゆらぎの性質をバルクの性質から決める形式を提案した。熱力学ゆらぎの統計的性質が熱力学変分原理によって決められるように、時間平均応力のゆらぎの統計的性質を決める変分原理を定式化した。その結果、境界でのゆらぎの異常な性質が変分方程式の非自明な解を通して表現されることになった(5)。この結果は、幅広い系に対して見られる普遍的な性質であり、今後、様々な系で具体的に示すとともに、この理論的構造の意味することを明らかにする。

**時系列解析の新しい方法** 熱力学的体系の考え方は、時系列解析をする際にも有用である。本計画研究では、二つの新しい方法を提案した。第一は、時系列のレプリカ対称性の破れを検出する方法である。レプリカ対称性の破れは乱れた系の平衡統計力学で見出された概念であるが、時系列統計においても生じ得ることを具体的なモデルで示した(6)。これも熱力学と非平衡ゆらぎの新しい接点である。第二は、レアイベントサンプリングである。滅多に生じないが、ひとたび生じると重要な影響をもらすイベントを素早く検出する方法は様々な提案されている。本計画研究では、時系列の熱力学的形式と現実の操作の接点を模索し、操作パラメータを連続的に変更することで有効的にレアイベントを検出する方法を提案した(7)。

#### 参考文献：

- (1) N. Nakagawa and S.-i. Sasa, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 260602 (2017).
- (2) Y. Chiba and N. Nakagawa, *Phys. Rev. E* **94**, 022115 (2016).
- (3) S.-i. Sasa, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 100602 (2014).
- (4) S.-i. Sasa, *New J. Phys.* **17**, 045024 (2015).
- (5) M. Itami and S.-i. Sasa, *J. Stat. Phys.* **161**, 532 (2015).
- (6) M. Ueda and S.-i. Sasa, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 080605 (2015).
- (7) T. Nemoto and S.-i. Sasa, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 090602 (2014).