

## 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

「ゆらぎと構造の協奏」が関わる題材に対して、非平衡ゆらぎの理論の立場からその理解を得ることを研究計画に掲げていた。以下で今年度の成果について述べる。

第一の成果は、非平衡系の協同現象として古くから知られている集団同期現象の解析についてである。70年代に蔵本によって提案された大域結合位相模型は40年に渡って研究されてきた。特に、集団同期に対する秩序変数を決める自己無矛盾方程式を、時間変化を含む形に拡張しようとする研究は、80年代の蔵本=西川、90年代のStrogatzやCrawfold、00年代のOtt-Antonsenらの研究を経て、10年代の千葉による数学としての完成に至った。集団同期現象は、個々の振動子のゆらぎと系全体が示す同期という時間構造が共存する現象である。そして、70年代に蔵本によって強調されたように、集団同期現象は「熱力学」や「平衡統計力学」と切り離された世界で生じるのでそれまでのゆらぎを扱う方法では解析ができないとされてきた。実際、以上の研究成果は力学系の分岐理論の発展として見ることができる。つまり、集団同期現象は、ゆらぎと構造の協奏の例ではあるが、「非平衡ゆらぎの熱力学体系」とは全く接点がないように見えた。

今年度、この状況が一変した。「非平衡ゆらぎの熱力学体系」にもとづいて、集団同期の秩序変数の従う時間発展方程式を導出することができるようになったのである。その導出方法はこれまでの方法と全く異なり、計算手数が大幅に単純化されている。さらに言えば、リーマン面への解析接続を使う高度なスペクトル理論など一切必要なく、初等的な計算だけで時間発展方程式を導出することができる。

その核心が「拡張された熱力学に対する恒等式」にある。理論的構造を分かりやすくするために、Crawfoldが解析したのと同じ状況、つまり、ノイズ付き蔵本模型を解析し、その後でノイズレス極限をとる場合を説明する。その場合には、秩序変数が個々の振動子に及ぼす影響が時間依存パラメータとして書かれているため、秩序変数のダイナミクスを非平衡定常系への操作として捉えることができる。そこでは、その操作に伴う熱力学構造のひとつとして、波多野=佐々関係式がある。臨界点の近くでは秩序変数がゆっくり運動するため、操作が準静的に近いことに対応する。波多野=佐々関係式を準静的極限から展開すると、0次の熱力学に相当する式が蔵本による自己無矛盾方程式になり、1次の揺動散逸関係に相当する式がCrawfoldによる秩序変数の時間発展方程式になる。以上の結果は論文として投稿された(1)。さらに、この方法はノイズがない場合にも拡張され、千葉の結果を再導出することになった。これは論文準備中である。ゆらぎの理論の立場では、波多野=佐々関係式の決定論的力学系への拡張に対応しており、全てを理解してから眺めると去年の成果である流体方程式のハミルトン粒子系からの導出に使われた関係式(2)も同じ構造をしていた。

第2の成果は、時間依存するランダム場で受動的に駆動されるブラウン粒子の統計的性質についてである。近年、込み入った環境における粒子の運動は、細胞内運動をはじめとして焦点があたりつつある。このとき、粒子の変位に関する統計量がまず基本にあり、異常拡散

の指数などが議論されてきた。この問題に対し、全く新しい視点を導入した。

まず、非平衡ゆらぎの理論の立場からみると、ブラウン粒子の軌道は一本の鎖であり、軌道のアンサンブルは1本鎖の統計力学としてみるができる。1本鎖の統計力学は熱力学転移を示すことが可能である。具体的に、時間依存するランダム場は、2次元空間に凍結したランダム場に置き換わるので、ランダム場中の1本鎖の統計力学になる。特に、ランダム場がガウス場の場合、この系は「レプリカ対称性の破れ」を示すことが知られている。その場合をブラウン粒子の軌道にひき戻すと、時間依存するランダム場は、Kardar-Parisi-Zhang方程式に従うことが分かる。従って、KPZ方程式に従う場で駆動されるブラウン粒子は、「時空アンサンブルにおけるレプリカ対称性の破れ」という性質を持つのである。この性質はこれまでに報告されたことがない新規なものである。

この現象を実験で観測するのは、二つの独立な粒子の軌道の重なりを測定すればよい。レプリカ対称性の破れが生じない通常の場合には、軌道は独立であり自明な重なりしかない。しかしながら、レプリカ対称性の破れが生じると、軌道の凝縮現象が生じ、非自明な重なりが見える。実際、数値実験を行って、その見え方を丁寧に議論した。以上の結果は論文として投稿された(3)。

第3の成果は、熱力学系に外部から力学的操作を施した際に生じる輸送流についてである。系が空間的に隔離された二つの環境の間をつないでいるとき、この系に力学的操作を施すと、二つの環境の間でエネルギーや物質を輸送することができる。このように力学的操作だけで輸送（ポンピング）できることは当たり前の事実として受け入れられているが、一方で、平衡熱力学の関係式の中には輸送流は含まれていない。平衡条件下では空間の並進対称性が保たれているので、エネルギーや熱の移動はコストを伴わない。そのため熱力学関係式の中に輸送流が陽に現れないのである。もし温度差を付けるなどして環境の対称性を破ってやると、輸送はコスト（より厳密にはエントロピー生成）を伴うようになる。非平衡定常系に拡張された熱力学関係式には輸送流が陽に含まれると期待できる。

この視点のもと非平衡定常系に拡張された熱力学関係式を見直し、非平衡定常系への操作的仕事と平衡系に誘起される輸送流（ポンピング）を結ぶ等式を導いた。これにより、平衡系に誘起されるポンピング量は、平衡状態と非平衡状態の両方について同じ力学的操作を行い、その際に要する仕事量がどの程度ずれるかを計測することで予想可能になることがわかった。実際フラッシングラチェットを用いた数値実験をおこなったところ、仕事計測による見積もり結果が観測されるポンピング量と一致することも見る事ができた。また、平衡系に力学的操作で誘起できるポンピング量は、カノニカル分布と非平衡定常分布による Fisher 情報量行列を使って表現できることも示した。この結果は、非平衡研究と情報論を結ぶ新規な視点を提案しており、今後の発展が期待できる。以上の結果は論文(4)として出版された。

#### 参考文献:

- (1) S. -i. Sasa, ArXiv:1501.00055
- (2) S-i. Sasa, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 100602 (2014).
- (3) M. Ueda and S-i. Sasa, ArXiv:1411.1816
- (4) N.Nakagawa, *Phys. Rev. E* **90**, 022108 (2014)