

論文内容の要旨

論文題目

非平衡ブラウン粒子系に対する統計力学

A statistical mechanical formulation for many Brownian particles under non-equilibrium conditions

氏名:中村壮伸

平衡系の統計力学は巨視的な量を記述する熱力学とその量のゆらぎを記述する巨視的熱揺動論との整合性の上に成り立っている。熱力学は熱力学関数の存在に、巨視的熱揺動論はアインシュタインのゆらぎの式の成立に集約されている。そこで、非平衡統計力学の整合すべき理論として、これら二つの理論を非平衡定常状態に拡張出来るかどうかを研究する。

非平衡定常状態を実現するモデルとして、本研究では外力条件下で駆動されたブラウン粒子多体系の研究を行う。また、非平衡定常状態を実現するために、各々の粒子には一様な外力(駆動力)と並進対称性を破るために導入された周期ポテンシャルで表される力が加わっているとする。このような系は外力駆動拡散系とばれ、局所平衡を破る非平衡定常状態を実現する系である。

この系では、もし一様な外力(駆動力)がなければ平衡状態が実現される。このとき、保存量である密度が熱力学変数となり、その同時刻相関関数は有限の相関長で減衰する。これにより示量性が保証され熱力学関数が存在することができる。また、密度場に対するゆらぐ流体方程式は線型緩和と詳細釣り合い条件を満たすノイズで特徴付けられる。

ところが、外力による駆動がある場合には、これらの性質が成り立つ保証は何一つなくなる。密度場に対するゆらぐ流体方程式は非線形の発展方程式になるのが一般的である。その場合、密度場の相関関数は単純な指数減衰をしなくなる。この減衰の異常性はロングタイムテールとよばれる。また、外力駆動拡散系では密度場の相関の長距離での漸近形が r^{-d} 型になることも知られている。ここで、 r は二点間の距離であり、 d は空間の次元である。この相関は長距離相関と呼ばれ、拡散係数とノイズ強度の間の第二種揺動散逸定理のやぶれと系の異方性だけからの一般的な帰結である。長距離相関はベキ型であるため特徴的な長さが存在しない。そのため相関長が無限大となり、巨視的な系の示量性を破壊する。これらの相関関数の特徴は非平衡系になる事で生じる動的および静的な異常性であると言う事が出来る。

第2章では、非平衡系の静的異常性と動的異常性の関係を考察する。つまり外力駆動拡散系の現象論的ゆらぐ流体方程式をもとにロングタイムテールと長距離相関の関係を議論する。密度場の発展方程式はロングタイムテールの原因となる非線形性と長距離相関の原因となる揺動散逸定理の破れの両方を仮定する。このモデルで非線形性、破れの大きさが小さいと考えて、密度場に対する波数 k の時間相関関数を計算した。その結果、ロングタイムテールのベキが第二種揺動散逸定理のやぶれの大きさが変わるという事が2次元系に関する繰り込み群を用いた計算で示す事が出来る。

外力駆動拡散系では長距離相関の存在による巨視的な系の示量性を破壊が知られている一方で、近年、外力駆動拡散系の別の例である外力駆動格子気体模型において非平衡定常状態に関する熱力学関数の存在、および、アインシュタインのゆらぎの式の成立が確認されている。これをふまえて、第3章・第4章では、長距離相関の存在と外力駆動拡散系における熱力学関数の存在、アインシュタインのゆらぎの式の成立が共存しうる理論である事を検証すること目的とした研究を行う。

第3章では、微視的に定義されたランジュバン方程式から出発し、第2章で現象論的に与えた粗視化されたスケールでの密度場の現象論的發展方程式を導出する。そして、得られた発展方程式から相関関数を計算し、長距離相関を確認する。

外力駆動ブラウン粒子多体系から粗視化された密度場に対する外力駆動拡散系のゆらぐ流体方程式を導出する。本研究で扱うモデルには平衡系の詳細釣り合い条件のような粗視化の指導原理がない。そのため粗視化の手段として特異摂動法を用いる。微視的モデルから出発した外力駆動拡散系のゆらぐ流体方程式の導出は本研究が初めてである。また、時間空間的なノイズをもつ系に対し特異摂動法の適用方法を実装した研究は本研究が初めてである。

導出は、粒子間相互作用長の異なる二つの場合に付いて行なった。一つは粒子間相互作用の長さが周期ポテンシャルの周期と比べて、十分大きい場合(場合 i)であり、もう一つは十分小さい場合(場合 ii)である。その結果、場合 ii で得られるゆらぐ流体方程式が第 2 章で導入した現象論的發展方程式で第二種揺動散逸定理が成り立つ場合に相当する事がわかった。得られた 2 種類の發展方程式から相関関数を計算すると、場合 i では相関関数の長距離での漸近的振る舞いが r^{-d} 型のベキ相関となる事がわかった。一方、場合 ii はそのような相関の異常性は見られなかった。

第 4 章では、外力駆動格子気体模型の熱力学、巨視的熱揺動論の研究が外力駆動ランジュバン多体系でも通用するかどうかを数値実験により検証する。まず、密度ゆらぎ、応答係数の定義を非平衡定常状態に適切に拡張する事によって、粗視化されたスケールでの密度場の相関関数を測定する。得られた相関関数、応答係数は平衡系の値と大きく異なる。これは分布関数が平衡状態のものと異なっている事を意味する。にもかかわらず、ゆらぎと応答の関係式が成立する事を示唆する結果が得られた。これは外力駆動拡散系であっても適切に定義した相関と応答を用いればアインシュタインのゆらぎの式が存在する事を示唆し、拡張された熱力学関数が存在する事を示唆する。

本研究は外力駆動ブラウン粒子多体系という一つのモデルから出発して長距離相関の解析的導出と非平衡定常状態に拡張されたアインシュタインのゆらぎの式の成立の数値的検証をともに行なった。これが意味する事は、熱力学量が定義されるような漸近的スケールでは非平衡定常状態に拡張されたアインシュタインのゆらぎの式が成り立ち、さらに大きな流体記述が有効なスケールでは長距離相関が観測されるという事を示唆している。

本研究の主な成果は以下の3点である。

1. 外力駆動拡散系のゆらぐ流体方程式の解析によって、保存量に対する時間相関のべき減衰の指数が、長距離相関の強さに依存して変わることを2次元系で示した(第2章)。
2. 非平衡定常状態にある外力駆動拡散系のゆらぐ流体方程式を微視的モデルからの粗視化によって得る事に成功した(第3章)。
3. 同じ外力駆動ブラウン粒子系のモデルで長距離相関(第3章)、非平衡定常状態に拡張されたアインシュタインのゆらぎの式(第4章)両立することを、解析計算、数値実験によるデータから示唆する事が出来た。

本研究が提出した外力駆動拡散系に対するゆらぐ流体方程式は微視的な発展方程式から系統的に導出された巨視的な変数に対する発展方程式であるため、今後の非平衡統計力学の研究を行う際に典型的なモデルとして役立つ事が期待される。