

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 6 月 3 日現在

機関番号：14301

研究種目：新学術領域研究(研究領域提案型)

研究期間：2013～2017

課題番号：25103002

研究課題名(和文)非平衡ゆらぎの熱力学的体系

研究課題名(英文)Thermodynamic framework of non-equilibrium fluctuations

研究代表者

佐々 真一(Sasa, Shin-ichi)

京都大学・理学研究科・教授

研究者番号：30235238

交付決定額(研究期間全体):(直接経費) 26,700,000円

研究成果の概要(和文): 第一に、熱力学を非平衡状態に拡張することにより、熱伝導下の気液転移において過冷却気体が安定化するという新しい現象を予言した。第二に、流体方程式などマクロなダイナミクスをミクロなゆらぎの世界から導出するなど、ミクロダイナミクスとマクロダイナミクスをつなぐ方法論を開拓した。第三に、熱力学の考えにもとづいて時系列解析を考察し、時系列におけるレプリカ対称性の破れという現象を定式化し、レアイベントサンプリングの新しい方法を提案した。第四に、熱力学的形式にもとづいて時間平均ゆらぎの異常性が生じることを示した。最後に、ネーター不変量としてのエントロピーを定式化し、エントロピーの新しい側面を見出した。

研究成果の概要(英文): First, by extending the thermodynamics to non-equilibrium states, we predicted that super-cooled gas stabilizes in gas-liquid transition under heat conduction as a new phenomenon which cannot be described by any conventional theory. Second, we pioneered a methodology to connect micro dynamics and macro dynamics, such as deriving Navier-Stokes equations from the world of microscopic fluctuations. Thirdly, we analyzed time series analysis based on thermodynamics concept, formulated the phenomenon of replica symmetry breaking in the time series, and proposed a new method of rare event sampling. Fourth, it was revealed that singularities of time average fluctuation occur universally based on a thermodynamic framework. Finally, we formulated the entropy as a Noether invariant and found a new aspect of entropy.

研究分野：統計物理学

キーワード：熱力学 ゆらぎ 非平衡 エントロピー

1. 研究開始当初の背景

1993年に非平衡定常状態におけるエントロピー生成のまれなゆらぎを特徴づける関数(大偏差関数)の対称性が見出された(Evans et al, PRL, 1993)。これは「ゆらぎの定理」と呼ばれ、微視的力学の時間反転対称性(微視的可逆性)からの帰結であることが明らかになった。微視的可逆性は、平衡条件下におけるゆらぎの時間変化の対称性(詳細つりあい条件)を経て、線形輸送係数の対称性(相反性)を導いた。同様に、非平衡条件下においても、「ゆらぎの定理」を経て、物理現象の理解に有用な普遍法則を期待するのは自然であろう。実際、非平衡ゆらぎの普遍的性質を探索する研究が活発化し、例えば、非平衡仕事に関する恒等式(Jarzynski, PRL, 1997)、大偏差関数に関する新しい性質(Derrida et al, PRL, 2001)、揺動散逸関係の破れについての法則(Harada, Sasa, PRL, 2005)、非平衡分布関数のエネルギー論的量による表現(Komatsu, Nakagawa, PRL, 2008)などが見出されてきた。

しかしながら、これらの発見がマクロな非平衡現象の新しい理解や予言を与える段階には至っていなかった。それには、二つの理由があった。第一の理由は、マクロな非平衡現象の多くは「流れ」と「局所平衡量」にもとづく記述で十分であり、非平衡ゆらぎの新たな法則を必要としないように見えることだった。第二の理由は、測定しにくいまれな事象についての法則の使い方が分からないことだった。

2. 研究の目的

このような背景を踏まえ、局所平衡量にもとづく記述が有効でない現象に対してこそ非平衡ゆらぎの普遍法則が有用になる可能性がある。また、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考えた。この2点を軸にして、非平衡ゆらぎの新たな普遍法則を開拓することを研究の目的とした。この際、「局所非平衡ゆらぎが関わる新奇な現象」を積極的に探索することを鍵にした。非平衡現象は多様にあり、既に長い研究の歴史を積み重ねていることを踏まえて、既知の機構で捉えられるかどうかを真摯に検討し、より深いレベルの新奇性を目指すことにした。

3. 研究の方法

具体的な現象として、(i) 粒子スケールで非平衡運動が生じる多粒子系の振る舞い、および、(ii) 非平衡ゆらぎが主要な役割を果たす

非平衡相転移に焦点をあてる。(i)は、近年、アクティブ媒質と呼ばれており、その媒質の集団運動やその媒質中における微粒子の輸送とゆらぎの法則を見出す。(ii)では、非平衡条件下で生じる相転移のうち、非平衡条件下にある系に固有でかつ普遍性クラスが確立していない現象を理論的に体系化する。ガラスと非平衡が関わる現象や乱流とマクロ秩序が関わる現象などがその候補になりえる。ただし、これらの現象の研究から普遍的な基本原理に到達するためには、単純流体やブラウン運動などの古典的題材に対して現代的な視点でミクロとマクロをつなぐ必要がある。

4. 研究成果

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、24報の論文が出版され、投稿中論文が5報、投稿準備中の論文が10報程度ある。特に、24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。以下では、研究課題の小項目毎に説明する。

熱力学関係式の拡張 本研究では、熱伝導定常状態を決定する変分原理を提案した。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、過冷却気体が熱伝導下では安定化することを予言した。これが、当初の研究目的で掲げた「局所平衡では捉えることができない新奇な現象」の提案に相当する。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。この結果は、Phys. Rev. Lett. に掲載された。

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、この大きな結果に結びついた。新しい変分原理提案したことにより、そ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。

非平衡ゆらぎのマイクロとマクロ 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、マイ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マイ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、マイクロな記述から流体方程式を導出する方法を提案した。これが研究目的で掲げた「古典的課題に対する現代的定式化」に対応する結果であり、Phys. Rev. Lett. に掲載された。

実際、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、マイ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、アクティブ媒質の一種である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。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に有用な役割を果たしたのは驚きでもあった。そして、この研究が、研究目的で掲げた、局所的な非平衡ゆらぎが重要になる系に対する新しい理論的アプローチを与えている。

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を意味する。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マイクロから導出することが必要である。

本研究では、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。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模型で示した。これも熱力学と非平衡ゆらぎの新しい接点であり、この結果は、Phys. Rev. Lett. に掲載された。

第2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。この結果は、研究目的で掲げた「まれな事象が有効になる現象を制御する」理論の提案であり、Phys. Rev. Lett. に掲載された。

エントロピーの新しい特徴づけ 熱力学の主役はエントロピーである。エントロピーには様々な定義や特徴づけがあるが、操作される系の対称性に付随するネーター不変量としてエントロピーが一意的に特徴づけられることが明らかになった。ブラックホールエントロピーについてはこのような定式化が知られていたが、熱力学エントロピーに対しても同様な定式化がされたことになる。ここで、対称性とは、「熱力学過程と整合する軌道」というクラスの軌道に限定して時間の非一様な変換 $t \rightarrow t + \eta \hbar \beta$ (η は無限小パラメータ) に対する作用の(全微分の不定性を残した)不変性である。古典力学系に対して古典統計力学を前提にして理論を定式化しているにも関わらず、その変換に「作用の次元を持つ普遍定数」が関わることが帰結される。以上の結果は、Phys. Rev. Lett. に掲載された。結果として、非平衡ゆらぎの熱力学体系と密接に関係するが、研究計画当には全く想定していなかった研究結果である。

5. 主な発表論文等（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計 24 件）

- ① "Liquid-gas transitions in steady heat conduction", Naoko Nakagawa, Shin-ichi Sasa, 2017 年 査読有、
Phys. Rev. Lett. 119, 260602/1-6
DOI:10.1103/PhysRevLett.119.260602
- ② 佐々 真一、「非平衡ゆらぎの理論におけるさまざまな関係式」、パリティー、
Vol. 32、 ISSN:0911-4815、 pp. 12-15、
2017 年 11 月
- ③ 佐々 真一、「時間の対称性がつなぐミクロとマクロ」、数理科学、Vol. 55 Iss. 7、
ISSN:0386-2240、 pp. 54-60、 2017 年 7 月
- ④ "Gaussian white noise as a resource for work extraction", Andreas Dechant, Adrian Baule, and Shin-ichi Sasa,
Phys. Rev. E 95, 032132/1 -032132/12
2017 年 査読有り
DOI:10.1103/PhysRevE.95.032132
- ⑤ "Replica symmetry breaking in trajectory space for the trap model", Masahiko Ueda, Shin-ichi Sasa,
Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical 50 125001/1-14
2017 年 査読有り
DOI: 10.1088/1751-8121/aa5d5e
- ⑥ "Universal Form of Stochastic Evolution for Slow Variables in Equilibrium Systems"
Masato Itami, Shin-ichi Sasa,
J. Stat. Phys. 167 46-63
2017 年 査読有り
DOI: 10.1007/s10955-017-1738-6
- ⑦ "Entropy Production of Nanosystems with Time Scale Separation", Shou-Wen Wang, Kyogo Kawaguchi, Shin-ichi Sasa, and Lei-Han Tang,
Phys. Rev. Lett. 117 070601/1-070601-5
2016 年 査読有り
DOI: 10.1103/PhysRevLett.117.070601
- ⑧ "Focus on stochastic thermodynamics" C Van den Broeck, Shin-ichi Sasa, and U Seifert, New Journal of Physics 18 020401-020403、 2016 年 査読有り
DOI : 10.1088/1367-2630/18/2/020401
- ⑨ "Thermodynamic entropy as a Noether invariant", Shin-ichi Sasa, Yuki Yokokura
Phys. Rev. Lett 116 140601/1-140601/6
2016 年 査読有り
DOI : 10.1103/PhysRevLett.116.140601
- ⑩ "Numerical determination of entropy associated with excess heat in steady-state thermodynamics", Yoshiyuki Chiba, Naoko Nakagawa,
Phys. Rev. E 94, 022115/1-022115/10
2016 年 査読有り
DOI: 10.1103/PhysRevE.94.022115
- ⑪ "Exact equalities and thermodynamic relations for nonequilibrium steady states"
Teruhisa S. Komatsu, Naoko Nakagawa, Shin-ichi Sasa, and Hal Tasaki
J. Stat. Phys 159 1237-1285
2015 年 査読有り
DOI : 10.1007/s10955-015-1221-1
- ⑫ "Nonequilibrium Statistical Mechanics for Adiabatic Piston Problem"
Masato Itami, Shin-ichi Sasa
J. Stat. Phys 158 37-56
2015 年 査読有り
DOI : 10.1007/s10955-014-1115-7
- ⑬ "Replica symmetry breaking in trajectories of a driven Brownian particle"
Masahiko Ueda, Shin-ichi Sasa
Phys. Rev. Lett 115 080605/1-080605/5
2015 年 査読有り
DOI : 10.1103/PhysRevLett.115.080605
- ⑭ "Derivation of Stokes' Law from Kirkwood's formula and the Green-Kubo formula via large deviation theory"
Masato Itami, Shin-ichi Sasa,
J. Stat. Phys 161 532-552
2015 年 査読有り
DOI : 10.1007/s10955-015-1349-z
- ⑮ "Collective dynamics from stochastic thermodynamics", Shin-ichi Sasa,
New J. Phys 17 045024/1-045024/14
2015 年 査読有り
DOI : 10.1088/issn.1367-2630
- ⑯ "Macroscopically measurable force induced by temperature discontinuities at solid-gas interfaces"
Masato Itami, Shin-ichi Sasa

- Phys. Rev. E 89 .052106 /1-052106/6
2014年 査読有り
DOI : 10.1103/PhysRevE.89.052106
- ⑰ "Nonequilibrium Dissipation-free Transport in F1-ATPase and the Thermodynamic Role of Asymmetric Allosterism", Kyogo Kawaguchi, Shin-ichi Sasa, and Takahiro Sagawa, Biophysical Journal 106 5649/1-5649/8
2014年 査読有り
DOI : 10.1016/j.bpj.2014.04.034
- ⑱ "Finite-size effects in a mean-field kinetically constrained model:dynamical glassiness and quantum criticality", Takahiro Nemoto, Vivien Lecomte, Shin-ichi Sasa, and Frédéric van Wijland
J. Stat. Mech P10001/1- P10001/38
2014年 査読有り
DOI : 10.1088/1742-5468/2014/10/P10001
- ⑲ "Derivation of Hydrodynamics from the Hamiltonian Description of Particle Systems", Shin-ichi Sasa
Phys. Rev. Lett 112 100602/1-100602/5
2014年 査読有り
DOI : 10.1103/PhysRevLett.112.100602
- ⑳ "Jamming Transition in Kinetically Constrained Models with Reflection Symmetry", H. Ohta, Shin-ichi Sasa,
J. Stat. Phys 155 827-842
2014年 査読有り
DOI : 10.1007/s10955-014-0978-y
- ㉑ "Computation of large deviation statistics via iterative measurement-and-feedback procedure"
T. Nemoto, Shin-ichi Sasa
Phys. Rev. Lett 112 090602/1-090602/5
2014年 査読有り
DOI : 10.1103/PhysRevLett.112.090602
- ㉒ "Calculation of the 1RSB transition temperature of spin glass models on regular random graphs under the replica symmetric ansatz"
M. Ueda, Shin-ichi Sasa
J. Stat. Mech P02005/1-P02005/21
2014年 査読有り
DOI : 10.1088/1742-5468/2014/02/P02005
- ㉓ 佐々 真一, 「多様な熱力学」 エントロピーの3つの顔、数理科学 Vol. 52 Iss. 4
ISSN: 03862240 pp. 26-31, 2014年 4月
- ㉔ "Possible extended forms of thermodynamic entropy", Shin-ichi Sasa
J. Stat. Mech P01004/1-P01004/15
2014年 査読有り
DOI : 10.1088/1742-5468/2014/01/P01004
- [学会発表] (計 37 件)
- ① 佐々 真一: 熱伝導下気液転移への線形応答理論からのアプローチ、日本物理学会第73回年次大会、2018年
- ② 佐々 真一: ゆらぎの理論と構造の理論、日本物理学会第73回年次大会、2018年
- ③ Shin-ichi Sasa: 熱伝導と気液転移が会うとき 19世紀科学から21世紀科学への展開、第15回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム、2018年
- ④ Shin-ichi Sasa; Naoko Nakagawa: Liquid-gas transitions in steady heat conduction、新学術国際会議 ゆらぎと構造の協奏 2017、2017年、国際会議・招待講演
- ⑤ Shin-ichi Sasa; Naoko Nakagawa: Liquid-gas transitions in steady heat conduction、East Asia Seminars on Statistical Physics、2017年、国際会議・招待講演
- ⑥ 中川 尚子; 佐々 真一: 熱伝導下における気液相転移の大域熱力学 2、日本物理学会 2017 秋季大会、2017年
- ⑦ 佐々 真一; 中川 尚子: 熱伝導下における気液相転移の大域熱力学 3、日本物理学会 2017 秋季大会、2017年
- ⑧ Shin-ichi Sasa: Thermodynamic entropy as a Noether invariant、Frontiers of Quantum and Mesoscopic Thermodynamics 2017、2017年、国際学会・招待講演
- ⑨ 中川 尚子; 佐々 真一: 熱伝導下における気液相転移の大域熱力学、日本物理学会年次大会、2017年
- ⑩ Shin-ichi Sasa: Thermodynamic entropy as a Noether invariant、The Berkeley Stat. Mech. Meeting、2017年、国際会議・招待講演
- ⑪ Shin-ichi Sasa: Thermodynamic entropy as a Noether invariant、9th Dynamics Days Asis Pacific、2016年、基調講演
- ⑫ 中川 尚子; 佐々 真一: 局所平衡に基づ

- く非平衡定常状態熱力学の構築、日本物理学会秋季大会、2016年
- ⑬ Shin-ichi Sasa : Thermodynamic entropy as a Noether invariant、STATPHYS26、2016年、国際会議
- ⑭ Shin-ichi Sasa : Thermodynamic entropy as a Noether invariant、The 7th KIAS Conference on Statistical Physics、2016年、国際会議・招待講演
- ⑮ 佐々 真一 ; Synergy of Randomness and Symmetry、ゆらぎと構造の協奏 第3回領域研究会、2016年
- ⑯ 佐々 真一 : 秩序創発へのミクロからの挑戦、市民講座「物理と宇宙」第3回、2016年
- ⑰ Shin-ichi Sasa ; Masahiko Ueda : Replica symmetry breaking in trajectories of a driven Brownian particle、第3回統計物理に関する東アジアジョイントセミナー、2015年、国際会議・招待講演
- ⑱ Shin-ichi Sasa : Replica symmetry breaking in trajectories of a driven Brownian particle、日仏会議、2015年、国際会議・招待講演
- ⑳ Shin-ichi Sasa : Large deviation functions and fluctuation relations in non-equilibrium systems、統計物理に関する学校 IV、2015年、国際会議・招待講演
- ㉑ Shin-ichi Sasa : Non-equilibrium statistical mechanics from large deviation theory、統計力学と大偏差レート関数の計算に関する国際会議、2015年、国際会議・招待講演
- ㉒ Shin-ichi Sasa : A fresh look at hydrodynamics from fluctuation formula、International Workshop on Condensed Matter Physics and AdS/CFT、2015年、国際会議・招待講演
- ㉓ Shin-ichi Sasa : A fresh look at hydrodynamics、第113回統計力学に関する国際会議、2015年、国際会議・招待講演
- ㉔ 佐々 真一 : 蔵本模型における秩序変数ダイナミクスの非平衡等式を用いた導出、日本物理学会第70回年次大会、2015年
- ㉕ 中川 尚子 ; 温度差で駆動される壁の速度の揺らぎ、日本物理学会第71回年次大会、2016年
- ㉖ Shin-ichi Sasa : Collective dynamics from non-equilibrium identities、Kyoto Winter School for Statistical Mechanics、2015年、国際会議・招待講演
- ㉗ 佐々 真一 : 小さなシステムのゆらぎ報のダイナミクス、西宮湯川記念科学セミナー、2014年、公開講演
- ㉘ 佐々 真一 : 可逆な力学世界における不可逆性の創発、第8回物性科学領域横断研究会(領域合同研究会)、2014年
- ㉙ 佐々 真一 : 非平衡ゆらぎの異常性と普遍性、日本物理学会第69回年次大会、2014年
- ㉚ 佐々 真一 : ハミルトン粒子系から流体方程式へ、日本物理学会第69回年次大会、2014年、
- ㉛ 佐々 真一 : ゆらぎ ミクロとマクロの架け橋、非平衡物理学の挑戦 物理から生命への架け橋、2014年、シンポジウム
- ㉜ Shin-ichi Sasa : Steady State Thermodynamics、STATPHYS XXV、2013年国際会議・招待講演
- ㉝ Shin-ichi Sasa : Turbulent Crystal and idealized glass、Physics of glassy and granular materials、2013年、国際会議・招待講演
- [その他] ホームページ等
6. 研究組織
- (1) 研究代表者
- 佐々 真一 (SASA, Shin-ichi)
京都大学・大学院理学研究科・教授
研究者番号 : 30235238
- (2) 研究分担者
- 中川 尚子 (NAKAGAWA, Naoko)
茨城大学・理学部・教授
研究者番号 : 60311586