

令和 3 年 6 月 2 日現在

機関番号：13901

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2020

課題番号：17K14355

研究課題名(和文)熱流に誘起された非平衡力の解明

研究課題名(英文)Analysis of nonequilibrium forces induced by heat flow

研究代表者

伊丹 将人(Masato, Itami)

名古屋大学・理学研究科・学振特別研究員(PD)

研究者番号：00779184

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：熱流に誘起された力の解明を目指し、主にソレー効果と断熱ピストン問題を対象として研究を行った。まずは、平衡系においてゆらぐ物理量が従う時間発展方程式の一般形を時間スケールの分離に基づいて導出する方法を整理した。次に、ソレー効果でも断熱ピストン問題と同じ向きの力が存在することを明らかにした。最後に、断熱ピストン問題においてランダムな運動をする物体の長時間での統計的な振る舞いに着目し、物体の長時間でのダイナミクスを記述する有効な運動方程式を導出した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究により、非平衡系において物体の長時間での振る舞いを記述できる運動方程式や、熱流に誘起されて生じる非平衡力を理解するための礎を築くことができたと考えている。熱流に誘起された力は、生命の起源の濃度問題と関連し得ることが指摘されており、生体系の理解にもつながる可能性がある。また、熱流を利用して分子を好きな場所に運ぶことができるようになれば、薬物輸送システムの開発に大きく貢献できる可能性がある。

研究成果の概要(英文)：Aiming at understanding forces induced by heat flow, I mainly focus on the Soret effect and the adiabatic piston problem. First, nonlinear multiplicative Langevin equations for a complete set of slow variables in equilibrium systems were generally derived on the basis of the separation of time scales. Next, we found that a force in the same direction as the adiabatic piston problem appears in a simple case of the Soret effect. Finally, in the adiabatic piston problem, I focused on the statistical properties in the long-time limit of a randomly moving piston, and derived effective Langevin equations that describe the long-time dynamics.

研究分野：統計物理学

キーワード：非平衡ゆらぎ 大偏差理論 断熱ピストン問題 ソレー効果

1. 研究開始当初の背景

ゆらぎ定理[D.J. Evans, E.D.G. Cohen, G.P. Morriss, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2401 (1993)]の発見により、非平衡統計力学の定式化に関する理解は格段に深まった。現在では、グリーン・久保公式や川崎の非線形応答公式など、非平衡統計力学でよく知られている関係式の大部分は広義のゆらぎ定理から容易に導けることが理解されている[G.E. Crooks, *Phys. Rev. E* **61**, 2361 (2000)]。また、周期境界条件を課した単純な系では、ゆらぎ定理を用いることで少ない仮定から流体方程式を明快に導出できるようになった[S. Sasa, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 100602 (2014)]。つまり、非平衡現象を解析する際の有用な道具である線形応答理論や流体方程式は、ゆらぎ定理を通して微視的な視点から理解できるようになった。ゆらぎ定理は任意の非平衡度で成り立つ関係式なので、既存の理論の理解を深める以上の役割を果たすと期待されているが、今のところ線形応答理論を超えて新しい知見をもたらしてはいない。例えば、線形輸送係数の非対角項は非平衡クロス効果を生じさせるものであり、様々な系で重要な役割を果たすが、一般論からは係数の符号さえ分からず、依然として理解が進んでいない。また、非平衡度に関して二次の項が主要となるような現象の解析は少なく、線形応答理論を超えた枠組みが必要となるようなモデルも確立していない状況である。

2. 研究の目的

ゆらぎ定理を活用し、線形応答理論だけでは解析することが困難な次の2つの現象を解析することで、線形応答理論を超えた真に新しい知見を得ることを目的とする。

(1) 温度勾配の下で分子が輸送される現象のことをソレー効果という[A. Wurger, *Rep. Prog. Phys.* **73**, 126601 (2010)]。単成分流体を入れた容器の中に、その流体を構成する粒子よりも質量の重い粒子を1つだけ入れて温度勾配を加えると、重い粒子は低温側に動く。これが最も基本的なソレー効果である。この系は、重い粒子の代わりに自由に動ける重い仕切り壁を入れると、断熱ピストン問題のモデルになる。そして、ソレー効果と断熱ピストン問題では重い物質の動く方向が異なり、両者の本質的な違いはどこにあるのかという問題は未解決である。一般に、熱流に誘起された運動は非平衡クロス効果によって生じるものであり、物質が低温側に動くのか高温側に動くのかは線形応答理論の一般論からは分からない。単純であるのにも関わらず、物質の形状を変えることで低温側への運動も高温側への運動も観測できる2つのモデルの解析を通して、非平衡クロス効果の物理的機構を解明する。

(2) 低粘度のシリコンオイルの液滴を2つ用意して押し合わせることを考える。2つの液滴の温度が等しいと液滴は一体化するが、温度差をある値以上にすると液滴間に隙間ができるという現象が報告されている[P. Dell'Aversana, G.P. Neitzel, *Physics today* **51**, 38 (1998)]。具体的には、直径3mmの銅製の棒の先にシリコンオイルをつけ、片方の棒を加熱して47Kの温度差をつけると、棒の先端の液滴を押し合わせても一体化しないことが知られている。この現象は温度差によって液滴間に異常な反発力が発生していることを示唆している。さらに、2つの液滴の温度を入れ替えても同じ現象が起きることが予想されるため、これは非平衡度の二次の寄与が主要となる現象であると考えられる。したがって、線形応答理論では解析できないと予想される。熱流に誘起された反発力を非平衡統計力学の知見から理解する。

3. 研究の方法

前述した(1)と(2)の現象をそれぞれ以下の方針で解析する。

(1) まずは、ゆらぎ定理を用いて熱流に誘起された力の線形応答公式を導出する。この線形応答公式をソレー効果と断熱ピストン問題の状況のもとで評価することによって、熱流に誘起されて物質に生じる力を分類する。次に数値実験を行い、物体の運動に関わる物理量を測定することによって、ソレー効果と断熱ピストン問題で何故動く方向が逆であるのかを明らかにする。

(2) できるだけ単純なモデルを作り、数値実験によって現象が再現されるかどうかを確かめる。次に、非平衡度について任意の次数で成り立つゆらぎ定理を用いてモデルを解析し、現象の理解に役立つ関係式を模索する。これにより、線形応答領域を超えて成り立つゆらぎ定理の新たな価値を見出す。

4. 研究成果

上記の方針で研究を進めていくなかで、熱流に誘起された力の表式を決定するのは予想よりも困難であることが判明したため、主に長時間での振る舞いに着目した研究をおすすめた。具体的な研究成果を以下に記載する。

(1) 非平衡系の問題に取り組む前に、まずは平衡系におけるゆらぎ物理量の運動方程式（ランジュバン方程式）の一般形の導出方法を整理した。時間スケールの分離と大偏差理論に基づいて、微視的力学の観点からランジュバン方程式の一般形を再導出した。ランジュバン方程式の経路積分表示において離散化の仕方を変える公式が技術的な鍵となった。この公式を利用して先行研究で用いられていた一見異なる経路積分表式が全て等価であることも示した。本研究は研究課題の採択前から行っていた研究だが、最終的に論文として J. Stat. Phys. に掲載されたのは採択後となった。

(2) ソレー効果に関する数値実験を行い低温側への駆動力を測定することで、ソレー効果は温度が位置に依存した単純な拡散ではないことを確かめた。研究計画に従い、ソレー効果で重い物質を固定した設定において、ゆらぎ定理を援用することで、微視的力学の観点から重い物質に働く力の線形応答公式を導出した。ソレー効果では熱流に誘起された力が2つの要素に分解でき、片方は断熱ピストン問題において仕切り壁を高温側へ駆動力であることが予想される結果を得た。しかし、まだ細部を詰めきれていないので、今後も研究を続けて論文にまとめたい。

(3) ゆらぎ定理で得られる形式的な表式から熱流に誘起された力の具体的な形を求めることは非常に難しいため、断熱ピストン問題において仕切り壁の長時間での振る舞いを記述する有効運動方程式を導出することを目指し、仕切り壁の長時間変位のキュムラントを再現するような有効運動方程式（ランジュバン方程式）が存在するか検証した。具体的には、ブラウン運動する仕切り壁の長時間変位の一次・二次・三次キュムラントを数値実験で測定し、測定結果と長時間変位のキュムラントが一致するようなランジュバン方程式を1つ発見した。発見されたランジュバン方程式は平衡系の一般形と同じ形をとるが、平衡系では禁止される速度に比例する抵抗係数を含み、この抵抗係数が高温側への運動を生み出すことを明らかにした。本研究は論文にまとめ、J. Stat. Mech. に掲載された。

(4) 解析的な観点から(3)の研究を発展させた。確率過程で時間平均量の大偏差関数を求める問題を、量子力学で基底エネルギーを求める問題にマップする手法を利用して、数値実験で得られた結果を解析的に導出することに成功した。この解析により、長時間での振る舞いのみではランジュバン方程式を一意に決定できないことが明らかとなったため、ランジュバン方程式を一意に絞る条件の候補を2つ提案した。本研究は論文にまとめ、Phys. Rev. E に掲載された。

(5) 温度差をつけた2枚の板に挟まれた流体では、流体の非平衡ゆらぎに起因したカシミールの力が発生することが報告[T. R. Kirkpatrick, J. M. Ortiz de Zárate, J. V. Sengers, Phys. Rev. Lett. **115**, 035901 (2015)]されており、流体ゆらぎの理解が研究の目的の(2)で述べた問題の理解につながる可能性がある。また、ソレー効果の例題でゆらぎ定理から導出した線形応答公式を解析的に評価することが難しかったため、より単純な設定で粘性流体の応力に対する線形応答公式を評価する方法を開発する必要があった。そこで、2枚の平行な板に挟まれた粘性流体を考え、平衡状態で片側の板に働く応力の時空間平均ゆらぎの解析を行った。ゆらぎ流体力学の知見を活かし、大偏差理論のコントラクション原理を利用することによって、応力の境界での時空間平均ゆらぎを解析的に計算し、応力ゆらぎが板間の距離に反比例するという特異性を示すことを明らかにした。この結果は、平衡状態の局所的な物理量のゆらぎでも、境界での時間平均量を考えると系の大きさという大域的な量に依存することを示している。本研究は論文にまとめ、J. Stat. Mech. に掲載された。

本研究課題の研究期間全体を通して、主に単純なソレー効果と断熱ピストン問題に対して解析的な研究と数値的な研究を行い、熱流に誘起されて発生する力に関する理解を深めることができた。特に、長時間での変位に着目することでセミマクロな物体のランジュバン方程式を導くという、新しい視点からの研究を生み出すことができたのが一番の成果である。この研究により、熱伝導下における物体の有効的な運動方程式や熱流誘起力を理解するための礎を築くことができたと考えている。得られた成果をさらに発展させることで、非平衡での有効的な運動方程式を導出し、熱流誘起力の完全な理解へとつなげていきたい。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Seya Atsumasa, Aoyagi Tatsuya, Itami Masato, Nakayama Yohei, Nakagawa Naoko	4. 巻 2020
2. 論文標題 Multiplicative Langevin equation to reproduce long-time properties of nonequilibrium Brownian motion	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment	6. 最初と最後の頁 013201 ~ 013201
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-5468/ab54bc	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Itami Masato, Sasa Shin-ichi	4. 巻 2018
2. 論文標題 Singular behaviour of time-averaged stress fluctuations on surfaces	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment	6. 最初と最後の頁 123210 ~ 123210
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-5468/aaf31c	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Itami Masato, Sasa Shin-ichi	4. 巻 167
2. 論文標題 Universal Form of Stochastic Evolution for Slow Variables in Equilibrium Systems	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Statistical Physics	6. 最初と最後の頁 46 ~ 63
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10955-017-1738-6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Itami Masato, Nakayama Yohei, Nakagawa Naoko, Sasa Shin-ichi	4. 巻 103
2. 論文標題 Effective Langevin equations leading to large deviation function of time-averaged velocity for a nonequilibrium Rayleigh piston	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 022125 ~ 022125
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.103.022125	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計12件(うち招待講演 0件/うち国際学会 4件)

1. 発表者名 Masato Itami
2. 発表標題 Singular behaviour of time-averaged stress fluctuations on surfaces
3. 学会等名 Statistical Physics of Complex Systems (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 伊丹將人
2. 発表標題 断熱ピストン問題における長時間変位のキュムラント母関数
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 伊丹將人
2. 発表標題 時間平均によるマルコフ過程の粗視化
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Masato Itami
2. 発表標題 Singular behavior of time-averaged stress fluctuations on surfaces
3. 学会等名 Advances in Physics of Emergent orders in Fluctuations (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 伊丹将人
2. 発表標題 流体中で固定壁に働く熱誘起力
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masato Itami
2. 発表標題 Singular behaviour of time-averaged stress fluctuations on surfaces
3. 学会等名 第16回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masato Itami
2. 発表標題 Universal form of stochastic evolution for slow variables in equilibrium systems
3. 学会等名 30th Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 伊丹将人
2. 発表標題 ソレー効果と断熱ピストン問題における熱誘起力の差異
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 伊丹將人
2. 発表標題 The difference between the heat-induced forces of the Soret effect and the adiabatic piston
3. 学会等名 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
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 伊丹將人
2. 発表標題 平衡流体における時間平均応力ゆらぎの超均一性II
3. 学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masato Itami
2. 発表標題 Effective Langevin equations leading to large deviation function of time-averaged velocity for a nonequilibrium Rayleigh piston
3. 学会等名 33rd Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 伊丹將人
2. 発表標題 平衡流体における面平均カレントの長距離相関と超均一性
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------