

科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）研究成果報告書

平成 25 年 5 月 20 日現在

機関番号：14301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2011 ～ 2012

課題番号：23654130

研究課題名（和文）非平衡系における新しい操作的変分原理の構築とその応用

研究課題名（英文） The construction of an operational variation principle in non-equilibrium systems and its application

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

研究成果の概要（和文）：

ある時間間隔で時間平均された物理量は、平均時間を十分大きくとるとほぼ確定的な値をとる。その確定値からずれる事象はまれにしか生じない。その頻度が平均時間に関して指数関数的に減衰していくレートがまれな程度を特徴づける。本研究によって、そのレートをゆらぎの測定をせずに実験によって求める一般的な公式を提案した。この公式が直接的に役立つ例は簡単な場合に限られているので、次の発展のために数理構造の理解を深めた。

研究成果の概要（英文）：

Quantities averaged during a time interval almost surely take the most probable value when the time interval is sufficiently large. Events with the large deviation from this most probable value rarely occur. The frequency of rare events is exponentially small with respect to the time interval, and the extent of rare nature is characterized by the exponential factor. We have proposed a novel formula by which the extent of rare nature can be obtained by laboratory experiments without measuring fluctuation. Since the formula is practically useful only for simple systems for the moment, we have also attempted to obtain a deep understanding of mathematical structure behind the formula.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
交付決定額	2,200,000	660,000	2,860,000

研究分野：物理学

科研費の分科・細目：数理物理・物性基礎

キーワード：ゆらぎ、統計、非平衡

1. 研究開始当初の背景

空間平均された熱力学変数のゆらぎは、その環境において有効な熱力学変分原理に関わる熱力学関数によって特徴づけられる。[Einstein, 1908] 熱力学関数は熱容量と状態方程式によって決定されるので、ゆらぎを直接測定することなく熱力学変数のゆらぎの性質が分かる。また、時間平均されたカレントのゆらぎの相関はカレントの巨視的

な値を決める変分関数と関係し、平衡状態での微視的な力学世界の時間反転対称性と巨視的な輸送係数の相反性が結ばれる。[Onsager, 1931]

これらの古典的成果を非線形非平衡系に拡張する試みはあったが、巨視変数の非ガウスゆらぎの性質が変分原理と結ばれたのは 21 世紀に入ってからである。具体的には、1 次元対称単純排他模型という平衡系の理想

気体模型に相当するもっとも簡単な数理模型で、空間平均された密度や時間平均されたカレントのゆらぎの相関が任意次数まで計算された。この極めて困難な計算が実行されただけでも驚きだが、その結果が変分原理の形でまとめられたのは衝撃的だった。[密度ゆらぎに対しては、Derrida, Lebowitz, Speer, Phys. Rev. Lett. 2000; カレントゆらぎに対しては、Bodineau, Derrida, Phys. Rev. Lett. 2005]どちらの変分原理も複合系で定義された量を部分系で定義された量の和について最小化する手続きによって表現されているので、相加性原理と呼ばれる。

2. 研究の目的

相加性原理は行列積表現やペーテ仮説法の技術が適用可能な非平衡格子模型に対して得られたので、その結果の一般性は不明であり、変分原理の背後にあるかもしれない普遍的原理の探索に至っていない。本研究課題では、この数理の結果を物理に橋渡すことを目的にする。ここで、「物理」という言葉を、実験で測定される現象を最小の言葉で体系的に理解する営みという意味で使っている。具体的には、以下の3点を問題にする。

(1) 相加性原理を実験系に適用できるように捉え直し、測定量によって検証可能な形に書き直す。

(2) 従来の方法では測定困難な量を測定可能にするなど、実験技術にとって有用な定式化を行う。

(3) その機構が未解明の現象に対して、それまで理論的に計算困難な量を計算可能にする新しいアプローチを与える。

2年間では、(1),(2)を解決し、(3)において例を少なくとも一つ提出する。

3. 研究の方法

相加性原理は非平衡可解格子模型、および、それらに対応すると予想されているゆらぐ連続場模型 (fluctuating hydrodynamics) において示されてきた。ところで、格子模型は数学的には簡単だが、物理現象との対応は間接的である。特に、物理にとって最も基本的な量である「力」が定義されないのは測定量との関係を調べるのに都合が悪い。ゆらぐ連続場模型は格子模型より現象論に近い分だけ実験に近いが、重要なパラメータである拡散係数や伝導率の密度依存性が(特殊な場合を除いて)任意のままになっている。格子

模型もゆらぐ連続場模型も数理的な解析には適しているが、測定量との関係を重視する本研究課題の主たる対象にはしない。

本研究課題では、大きさがマイクロメーター程度の微粒子(ブラウン粒子)の運動を対象にする。近年、非平衡系における新しい法則をブラウン粒子を用いて検証する実験が相次いで成功しており、より複雑な系を調べる前のテスト実験系として確立しつつある。また、ブラウン粒子多体系は、平衡条件下で、気相、液相、固相を示すことが知られており、統計力学の実験的玩具模型として位置づけられている。非平衡条件下のブラウン粒子多体系の実験も活発になされてきたが、非平衡系の基礎原理を探る問題意識での研究はまだ始まっていない。1粒子実験系が確立しつつある時期なので、次の10年で活発化すると予想している。

ブラウン粒子の運動は、慣性を無視したランジュバン方程式でよく記述されると考えられている。その方程式は力の釣り合いとして解釈されるので、具体的な実験系における操作や力との対応は数理的表現においても明示的である。従って、可解模型の解析から生まれた新しい変分原理を測定量との関係で再編する本研究課題では、非平衡ブラウン粒子多体系が最適な対象であり、数理的には多体ランジュバン方程式を研究することになる。

まず、もっとも簡単な場合として、周長Lのリング上1粒子ブラウン運動の解析から始める。その状況に対応する実験は[Bechinger et al, Phys. Rev. Lett, (2007); Ciliberto et al, Phys. Rev. Lett, (2009); S. Toyabe et al, Phys. Rev. Lett. (2010).]で議論されている。この系で問題にするのは、リング上の粒子の位置 $x(t)$ に対して、その時間平均速度の統計量である。そのキュムラント母関数 $G(h)$ を考える。 h は形式パラメータである。

相加性原理は $G(h)$ を変分原理の形で与える表現であり、現在、いくつかの可解格子模型およびそれに対応する連続場記述で成立することが分かっている。そこで、まず、このブラウン粒子系で相加性原理が成り立つかどうかを調べる。次に、成り立つ場合、相加性原理を操作可能な測定量によって表現する。具体的には、密度変調についての極値問題として定式化されている現在の表現から、外部ポテンシャル場を制御して得られる極値条件によって $G(h)$ を決定する形にする。また、形式パラメータ h が対応する測定可能物理量を同定する。

次に、幅広い実験に対応できるようにするために、広いクラスに対して成り立つ一般形式を見出す。そのためには、上記の問題に対して様々な表現をとりあげ、物理的解釈を介して他の系に適用可能かどうかを調べる。また、確率過程の研究で知られているドンスカー=バラダンとの関係を模索する。

平成24年度では、多体系を考察する。具体的には、格子模型やゆらぎ連続場模型で確立している境界駆動系の相加性原理について、測定可能な版に書き直すことから始める。そしてこの結果をさらにブラウン粒子多体系に一般化する。これは「対称単純排他過程のマクロな振る舞いをブラウン運動多体系のマクロな振る舞いで再現せよ」という問題を解くことに相当する。

この研究結果を踏まえて、本格的に多粒子系の研究に取り組む。ただし、まだ一般的な議論をする段階にはなく、状況設定は不可欠である。特に、エネルギー的相互作用する非平衡格子模型についてカレントの母関数の計算を経由することでゆらぎ連続場の表現に迫ることを試みる。これまでエネルギー相互作用がある場合には、ゆらぎ連続場の発展方程式は現象論的にしか議論されていなかった。そこで我々の公式を使って計算できなかったとことを計算するようにする。

4. 研究成果

ブラウン粒子系に対してカレントの時間平均のキュムラント母関数についての操作変分原理を構築した。そして、それを限りなく一般的な形まで昇華させることに成功した。つまり、マルコフ確率過程として記述される広いクラスの模型に対して、新しいタイプの変分原理が存在することを示したことになる。

具体的に、マルコフジャンププロセスにおいて汎用的に成立する公式では、ポテンシャルを余分に加えた系のアクティビティーともとのアクティビティーの差を最大化するようにポテンシャルを調整することで、カレントの時間平均に重みをかけたバイアスアンサンブルを作ることができ、その結果として母関数を求めることができる。ここで重要なことは、この変分原理では、変分パラメータが、加えるポテンシャルとして表現されており、原理的には実験で実現可能な形になっている。

また、この綺麗な結果は、目標に掲げた、大偏差関数についてのドンスカー=バラダ公式を書き下すことに成功し、ン理論との関係を考える上でもきわめて重要な役割を果

たした。実際、ドンスカー=バラダンと理論との関係は直接的になり、例えば、ドンスカー=バラダン理論にもとづいて我々の変分原理が導出できるようにもなった。さらには、離散時間マルコフ鎖においても、同様な公式を導出することができた。ランジュバン系も含めて、形式的な面については、ほぼ完全な理解を得たといつてよいだろう。

さらに、この公式の意義について考察し、より大きな問題の中に位置づけられつつある。以上の成果の一部は、Phys. Rev. E に18ページの論文として出版された。

また、ミクロなレベルで大偏差関数を考え、それに対して粗視化を実行することは（私たちの変分原理を使えば）流体極限を計算するよりはずっと簡単であることが分かりつつある。この計算を具体的に実行することで、これまでに議論できなかった流体極限についての知見を得ることができる。現在、この研究成果をまとめている。

以上の成果は、国際会議の招待講演で3度発表している。

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 5 件）

[1]N. Nakagawa and S. Sasa,
Work relations for time-dependent states
Phys. Rev. E 87 022109-1-5 (2012)
10.1103/PhysRevE.87.022109、査読有

[2]S. Sasa,
Physics of large deviation
Phys. Scr. 86 058514-1-3 (2012)
10.1088/0031-8949/86/05/058514、査読有

[3]S. Sasa,
Pure glass in finite dimensions
Phys. Rev. Lett. 109 165702-1-4 (2012)
10.1103/PhysRevLett.109.165702、査読有

[4]S. Sasa,
Statistical mechanics of glass transition
in lattice molecule models 45
J. Phys. A: Math. Theor. 035002/1-16
(2012)
10.1088/1751-8113/45/3/035002、査読有

[5]T. Nemoto and S. Sasa,
Thermodynamic formula for the cumulant
generating function of time averaged
current
Phys. Rev. E 84 061113/1-18 (2011)
10.1103/PhysRevE.84.061113、査読有

〔学会発表〕（計 5 件）

[1] S. Sasa
Stochastic Thermodynamics of Adiabatic
pistons
「確率的熱力学」(招待講演)
ノルディック理論物理研究所 (ストックホルム、スウェーデン)
2013 年 3 月 9 日

[2] S. Sasa
Response Measurement of rare
Fluctuations
「非平衡過程と揺動散逸定理に関する会議」
(招待講演)
2012 年 9 月 10 日
(カプリ島、イタリア)

[3] S. Sasa
Response Measurement of rare
Fluctuations
「非平衡揺動応答関係に関する会議」
(招待講演)
(ジリオ島、イタリア)
2012 年 6 月 8 日

[4] S. Sasa,
Response Measurement of non-typical
Fluctuations
「統計力学に関する東アジアジョイントセミナー」(招待講演)
(蘇州、中国)
2012 年 3 月 18 日

[5] S. Sasa,
Thermodynamic formula for the cumulant
generating function of time-averaged
current
「非平衡統計力学における基礎と応用」
(招待講演)
ノルディック理論物理研究所
(ストックホルム、スウェーデン)
2011 年 9 月 28 日

〔図書〕（計 1 件）

現代物理学の論理と方法
編集 米谷民明、著者米谷民明他
(放送大学教育振興会NHK出版,2013)
総ページ数 292p
(うち、127p ~ 160p まで分担)

〔その他〕
ホームページ等

http://www.ton.scphys.kyoto-u.ac.jp/nonlinear/sasa/index_j.html

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

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

()

研究者番号：